



Calcul haute performance en dynamique des contacts via deux familles de décomposition de domaine

Vincent Visseq

► To cite this version:

Vincent Visseq. Calcul haute performance en dynamique des contacts via deux familles de décomposition de domaine. Mécanique des solides [physics.class-ph]. Université Montpellier II - Sciences et Techniques du Languedoc, 2013. Français. NNT: . tel-00848363

HAL Id: tel-00848363

<https://theses.hal.science/tel-00848363>

Submitted on 26 Jul 2013

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Discipline : Mécanique, Génie Mécanique et Génie Civil
Formation doctorale : Mécanique des matériaux et des milieux complexes, des structures et des systèmes
École doctorale : Informatique, Structures, Systèmes

THÈSE

pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ MONTPELLIER 2

Présentée et soutenue publiquement par

VINCENT VISSEQ

le 3 Juillet 2013

Sujet :

**CALCUL HAUTE PERFORMANCE EN DYNAMIQUE DES CONTACTS
VIA DEUX FAMILLES DE DÉCOMPOSITION DE DOMAINE**

F. V. DONZÉ	PROFESSEUR	UJF GRENOBLE	PRÉSIDENT
F.-X. ROUX	PROFESSEUR	ONERA	RAPPORTEUR
M. VIDRASCU	DIRECTEUR DE RECHERCHE	INRIA	RAPPORTEURE
A. ROUSSEAU	CHARGÉ DE RECHERCHE	INRIA	EXAMINATEUR
P. COOREVITS	PROFESSEUR	UPJV	EXAMINATEUR
F. DUBOIS	INGÉNIEUR DE RECHERCHE	LMGC	EXAMINATEUR
P. ALART	PROFESSEUR	MONTPELLIER 2	DIRECTEUR
D. DUREISSEIX	PROFESSEUR	INSA DE LYON	DIRECTEUR

Table des matières

Table des matières	i
Introduction générale	3
1 Dynamique non régulière et décomposition de domaine	7
1 Méthode des éléments discrets – DEM	8
1.1 Dynamique du solide rigide	8
1.2 Contact entre corps	9
1.3 Classification des méthodes DEM	12
1.4 Dynamique non régulière des contacts – NSCD	13
2 Méthodes de décomposition de domaine – DDM	21
2.1 Décomposition de domaine en milieu continu	21
2.2 Décomposition de domaine dans le cadre NSCD	26
2 Méthodes NSCDD et Schwarz-NSCD	35
1 Développements théoriques de la méthode NSCDD	37
1.1 Convergence d'un problème d'interface de référence	37
1.2 Analyse du problème d'interface NSCDD	40
1.3 Critères de convergence de la méthode NSCDD	47
2 Extension aux solides déformables	48
2.1 Modélisation des corps et type de recollement entre sous-domaines	48
2.2 Dynamique des contacts et co-rotationnel	48
2.3 Algorithme NSCDD en co-rotationnel	50
3 Méthode de décomposition de domaine de type Schwarz additif	52
3.1 Formulation historique	52
3.2 Méthode de Schwarz-NSCD	52
3.3 Analyse d'une itération de Schwarz-NSCD	54
4 Comparaison des méthodes NSCDD et Schwarz-NSCD	55
4.1 Dépôt gravitaire 2D	55
4.2 Cisaillement avec conditions périodiques	56
3 Validation de la méthode NSCDD sur la physique des milieux granulaires	63
1 Influence de la méthode NSCDD : cas d'un essai biaxial	64

1.1	Simulation d'un essai biaxial	64
1.2	Comportement macroscopique	65
1.3	Analyse micro-mécanique	68
2	Performance de la méthode NSCDD en implémentation séquentielle . . .	73
2.1	Implémentation séquentielle multi-domaines	73
2.2	Analyse des coûts par étape de calcul	74
4	Structure algorithmique en mémoire distribuée	77
1	Logiciel de calcul LMGC90 et stratégie de parallélisation	78
1.1	Principales étapes d'un algorithme de dynamique des contacts . .	79
1.2	Stratégies de parallélisation et LMGC90	80
2	Détection des contacts	82
2.1	Partitionnement basé sur les contacts grossiers vs partitionnement basé sur les contacts fins	83
2.2	Stratégies de partitionnement envisageables	85
3	Schémas de communication inter-processus	87
3.1	Schémas de communication <i>centralisé</i> (CCS) et <i>décentralisé</i> (DCS)	87
3.2	Comparaison des deux schémas	93
5	Application aux milieux granulaires et aux ouvrages maçonnés	99
1	Simulations parallèles de milieux granulaires	100
1.1	Essai biaxial (2D)	101
1.2	Essai triaxial (3D)	102
2	Simulations de compression triaxiale de grande taille	103
2.1	Échantillon considéré	103
2.2	Validation mécanique	106
2.3	Performances pour différents états d'écoulement	109
3	Application aux ouvrages maçonnés	113
3.1	Structure R+1 et partitionnements	115
3.2	Mise sous poids propre d'une structure R+1	115
3.3	Tassement différentiel d'une structure R+1	116
6	Enrichissement du problème d'interface	121
1	Prise en compte du réseau de contact	122
1.1	Problème d'interface NSCDD enrichi	122
1.2	Schwarz-NSCD avec communications augmentées	123
1.3	Comparaison des méthodes de décomposition de domaine pour la dynamique des contacts	124
2	Stratégie de résolution à deux DDM imbriquées	126
2.1	Validation sur des cas-tests de petite dimension	128
2.2	Cas-test granulaire	133
3	Une approche multiéchelle en espace... et en temps	135
3.1	Algorithme de résolution incomplète	136

3.2 Premiers résultats et analyse	139
Bilan et perspectives	143
Bibliographie	147

Ce manuscrit de thèse est le fruit de trois années passées au Laboratoire de Mécanique et Génie Civil dans l'équipe de Modélisation Mathématique en Mécanique (M³).

Je tiens à remercier mes deux directeurs de thèse, messieurs Pierre Alart et David Dureisseix, pour le soutien dont ils m'ont fait preuve au cours de ces trois années. Leur qualité scientifique m'a été très précieuse et ce dans un relationnel extrêmement agréable. Ils m'ont en particulier permis de prendre le temps pour des développements de code lourds mais qui se sont révélés fructueux, y compris pour l'émergence de nouvelles idées, sans jamais renoncer aux études plus fondamentales et risquées présentées au dernier chapitre.

Je remercie l'équipe de développement du code de calcul LMGC90 : Frédéric Dubois, Mathieu Renouf, Rémy Mozul et Alexandre Martin. La première année fut en grande partie un travail commun avec Alex, qui a assuré la transmission des travaux d'implémentation de Damien Iceta de même qu'il en a tiré toutes les conclusions en termes d'axe de développement informatique. Je pense me souvenir longtemps de séances de "debugage" où le découragement croise de beaux fous rires.

Au cours de ce travail, j'ai appris à connaître la communauté des milieux granulaires qui sévit en particulier au LMGC. Les discussions avec Farhang Radjaï et Émilien Azéma m'ont beaucoup apporté et je leurs suis reconnaissant pour ce nouvel éclairage, qui a permis de mettre en perspective les travaux algorithmiques qui sont au cœur de cette thèse.

Les enseignements de Martin Gander et François-Xavier Roux ont de même été très importants et je les remercie pour les discussions que nous avons pu avoir.

Merci à Laurent Champaney qui a cru en moi lors de mon admission à l'ENS de Caen et m'a ensuite conseillé le LMGC pour y trouver de très bons encadrants de thèse.

Cette thèse a été l'occasion de voyager en Allemagne, en Bretagne, dans les Alpes, sur la presqu'île de Giens et en Corse, en bref de découvrir les charmes de la vie de chercheur. Pour cela je remercie les secrétaires Élisabeth Boulet, Chantal Romano, Reine Causse et Caroline Drap qui en facilitent la préparation et permettent le bon fonctionnement du laboratoire.

Merci à tous les collègues mécaniciens : Paulo, Adriano, Rémy, François, Assunta, Riccardo, Francesco, Walid, Benjamin, papa Azdine, Nono, Patrick, Nicolas, Arthur, Capucine et aussi aux mathématiciens : Vincent, Yousri, Vanessa, Christophe et tout ceux que j'ai oublié ici !

Enfin un petit mot pour ma famille, qui des deux côtés de l'atlantique m'apporte un soutien essentiel. Merci mon Angie d'être là. Ensemble nous avons voyagé à travers la France ces dernières années, maintenant on passe au Danemark !

Introduction générale

La simulation numérique des systèmes multicorps en présence d'interactions complexes, dont le contact frottant, pose de nombreux défis, tant en terme de modélisation que de temps de calcul. Afin de traiter des échantillons réalistes de grandes tailles, différentes stratégies de simulations par éléments discrets (DEM) ont été élaborées, dont la dynamique des contacts (Nonsmooth contact dynamics – NSCD) par Moreau et Jean [60, 44]. La formulation des lois de comportement de type contact unilatéral avec ou sans frottement sont naturellement non régulières, c'est à dire qu'elles s'expriment par des relations non linéaires et non différentiables. L'approche NSCD a pour ambition de gérer de telles lois sans recourir à un processus de régularisation, contrairement aux autres méthodes DEM.

Afin de gérer le caractère discret et non régulier des équations de la dynamique des contacts, des stratégies de résolution itératives ont été développées, tel que l'algorithme de Gauss-Seidel non linéaire par bloc (NLGS) ou un algorithme de gradient conjugué pour les systèmes multicontacts en présence de frottement [68]. Cependant, les coûts de calcul lorsque le nombre de corps augmente ou que leurs géométries et interactions deviennent plus complexes, sont prohibitifs et nécessitent l'emploi de techniques de calcul parallèle.

Une première avancée a été menée par Renouf [69] via la mise en place de directives permettant l'emploi de plusieurs processeurs pour le traitement de boucles de calcul. Cette stratégie de parallélisation à mémoire partagée présente de bonnes performances mais reste limitée à un faible nombre de cœurs de calcul. Le développement de calculateurs parallèles possédant plusieurs milliers de nœuds de calcul suppose d'aller au-delà de ce type de parallélisation de code. Les méthodes de décomposition de domaine semblent alors toutes désignées pour effectuer ce pas en avant. Une série de travaux menés au sein du Laboratoire de Mécanique et Génie Civil a permis d'initier de telles approches pour les structures de tenségrité et les milieux granulaires. Cette thèse se situe dans la continuité de ces travaux. Les techniques de décomposition de domaine ont en effet démontré une grande efficacité dans le cas de problèmes linéaires, ou de problèmes non linéaires résolus par une succession de problèmes linéaires. En présence d'éléments discrets et de lois d'interaction non régulières, ces techniques doivent cependant être repensées. Le maillage issu de la discrétisation du milieu continu est en effet remplacé par un graphe dont les sommets sont les corps et les segments sont les interactions. Le milieu matériel présente alors des non régularités diffuses à travers l'ensemble du domaine, non régularités qu'il est irréaliste de vouloir isoler dans les interfaces. Cette caractéristique a été notamment soulignée par plusieurs situations concrètes, milieux divisés [5, 68], polyarticulés [5, 63,

14], multifracturé [50], cellulaires [2].

Nous retenons ici plus particulièrement une méthode de décomposition de domaine, proche des méthodes FETI, proposée par Alart, Dureisseix et Iceta [6]. Celle-ci consiste à introduire un problème d'interface linéaire. Les corps rigides d'interface sont artificiellement divisés en fonction du nombre de sous-domaines auquel ils appartiennent, puis "re-collés" par l'intermédiaire d'inter-efforts (multiplicateurs de Lagrange). Les interactions non-régulières sont ainsi réparties dans les sous-domaines. La résolution du contact est réalisée par sous-domaine à l'aide du même algorithme que dans le cas mono-domaine (e.g. NLGS) mais sur une portion restreinte de l'échantillon. Cette approche se révèle donc proche dans sa philosophie de celle développée par Barboteu pour les milieux cellulaires [2] ou granulaires à grains déformables [3]. Dans le cadre des milieux divisés de nombreuses questions subsistaient, notamment sur les difficultés rencontrées en décomposition de domaine de milieux continus et leurs traductions aux milieux divisés : problèmes grossiers, gestion des grains de coins, *extensibilité*...

Nous nous sommes également intéressé à une seconde famille de décomposition de domaine, proche des méthodes de Schwarz. Cette étude peut être vue comme un retour sur les travaux de Jean et Breitenkopf [16]. La formalisation mathématique ainsi que la comparaison avec la méthode de type FETI sont présentées dans ce manuscrit. Cependant, l'accent sera majoritairement mis sur la première approche, car l'idée de la méthode de Schwarz adaptée au cadre NSCD est plus tardive dans l'avancement des travaux présentés.

Les objectifs initiaux de cette thèse consistaient à poursuivre les travaux de Iceta sur les approches d'enrichissement de la méthode de type FETI. Cependant il était tout d'abord nécessaire de remettre à plat l'implémentation de la méthode au sein du code de calcul LMGC90 (Logiciel de Mécanique Gérant le Contact). Bien que chronophage, cette phase d'implémentation a été précieuse. Elle a tout d'abord permis d'appréhender cette problématique exotique que constitue la simulation des milieux granulaires, tout spécialement lorsque combinée à la mécanique non régulière et les techniques de décomposition de domaine. Cet investissement est apparu non seulement fructueux en terme de performance de calcul, mais encore du point de vue des idées. Les formulations théoriques devaient être clarifiées et stabilisées. Bien que les fondations théoriques de la méthode de type FETI soient solidement établies, la volonté de gérer de nombreux sous-domaines a mis à jour des problématiques, comme celle des grains de coins, qu'il restait à résoudre. Cette implémentation est le résultat d'un travail collectif avec Alexandre Martin et l'équipe de développement de LMGC90. Les travaux en cours parmi cette communauté concernant la simulation d'ouvrages maçonnés sous séisme ont par ailleurs motivé l'extension de la méthode de décomposition de domaine aux échantillons constitués de polyèdres. De plus, l'expérimentation numérique de tests comportant un grand nombre de corps a permis d'alimenter la réflexion initiale autour du caractère discret/continu d'un milieu granulaire.

Bien que la dynamique d'un milieu granulaire comporte des ré-arrangements locaux a priori incompatibles avec un comportement de structure, l'échantillon granulaire considéré globalement fait preuve de caractéristiques structurales. La méthode NSCD, qui

trouve tout son intérêt pour les échantillons granulaires denses, rend naturellement compte de ce comportement collectif. En pratique, le passage de la dynamique locale d'un corps à la dynamique globale de l'échantillon s'effectue par la propagation des informations de contact au cours des itérations. Le rôle du réseau de contact dans l'émergence du comportement global est alors à souligner. De même le problème d'interface de la méthode de type FETI (ou les communications de la méthode de type Schwarz) a un caractère local, partiellement indépendant de la dynamique globale de l'échantillon granulaire. Cette propagation lente de l'information au travers du réseau de contacts est une limitation des performances tant de la méthode NSCD que de ses versions DDM. Ce mécanisme semble interdire les techniques d'accélération de convergence, tel les problèmes grossiers développés en décomposition de domaine pour les milieux continus.

Cependant, des approches d'enrichissement du problème d'interface de type FETI, basées sur la prise en compte du réseau de contacts des sous-domaines, ont été proposées par [6]. Les résultats présentés par ces auteurs illustrent que les tendances obtenues sur des échantillons de quelques corps ne peuvent être directement extrapolées à des échantillons granulaires plus vastes ; l'enrichissement du problème d'interface dans ces derniers cas n'apporte pas, sur un pas de temps, de résultats satisfaisants. Malgré ce constat contrasté, l'idée d'un algorithme de résolution incomplète, prenant appui sur le comportement multiéchelle en espace et en temps des échantillons granulaires denses restait à approfondir. Comme on peut le constater, des détours ont été nécessaires pour finalement répondre partiellement à la problématique initiale intitulée "dialogue discret continu en dynamique granulaire via une décomposition de domaine espace-temps".

Ce manuscrit se décompose en six chapitres.

Dans le premier chapitre, les méthodes de simulations par éléments discrets sont discutées suivant que les interactions de contacts suivent des lois non régulières ou régulières ainsi qu'en fonction de l'intégration temporelle implicite ou explicite mise en œuvre. Nous détaillons alors la méthode de dynamique des contacts ainsi que les différentes approches de décomposition de domaine qui s'y adaptent.

Le second chapitre présente les développements théoriques récents de la méthode NonSmooth Contact Domain Decomposition (NSCDD) et de la méthode de Schwarz-NSCD, qui constituent les deux familles de décomposition de domaine étudiées dans ce manuscrit.

Une étude de validation de l'approche de décomposition de domaine sur la base de résultats fondamentaux de la physique des milieux granulaires est ensuite présentée au chapitre 3.

Les chapitres 4 et 5 donnent une vue d'ensemble de l'implémentation et des résultats de calcul de la méthode NSCDD. Sans entrer dans les détails, quelques notions sur le code de calcul LMGC90 sont évoquées, afin de mettre en lumière les choix de programmation et la signification des résultats en termes de calcul intensif présentés.

Finalement, le chapitre 6 propose une nouvelle stratégie numérique intégrant une résolution incomplète par DDM, mais autocorrectrice dans la simulation d'un processus.

Chapitre 1

Dynamique non régulière et décomposition de domaine

Dans ce premier chapitre, les méthodes de simulation numérique par éléments discrets sont présentées d'un point de vue algorithmique. Différentes techniques de parallélisation sont ensuite abordées, en particulier des techniques de décomposition de domaine adaptées à la dynamique des contacts.

Sommaire

1	Méthode des éléments discrets – DEM	8
1.1	Dynamique du solide rigide	8
1.2	Contact entre corps	9
1.3	Classification des méthodes DEM	12
1.4	Dynamique non régulière des contacts – NSCD	13
2	Méthodes de décomposition de domaine – DDM	21
2.1	Décomposition de domaine en milieu continu	21
2.2	Décomposition de domaine dans le cadre NSCD	26

1 Méthode des éléments discrets – DEM

On regroupe sous le terme de méthode des éléments discrets (Discrete Element method – DEM) différentes approches mécaniques permettant de représenter la dynamique de milieux discrets, constitués de corps de géométrie et de propriétés matérielles potentiellement différentes. Les corps constituant le système considéré peuvent être modélisés par des solides rigides ou déformables et leurs interactions peuvent être de type contact ou à distance.

Deux principales stratégies d'intégration temporelle sont employées pour représenter l'évolution en temps de ce type de système :

- “Time Stepping” : cette approche consiste à discrétiser le temps en intervalles identiques, quitte à résoudre des problèmes non réguliers sur chaque pas.
- “Event Driven” : cette approche permet l'alternance de phases de vol libre (phases sans “événement”) et de phases de mise à jour des efforts appliqués aux solides, lorsqu'un choc se produit.

Par la suite nous focaliserons notre étude sur les stratégies de discrétisation du temps en intervalles, stratégies mieux adaptées aux collections d'éléments discrets comportant de nombreux contacts simultanés. De nombreuses méthodes ont été développées dans ce cadre depuis la fin des années 80. Toutes ces méthodes se basent sur les équations fondamentales de la dynamique classique et les lois de contacts entre solides, qui font l'objet des deux sections suivantes. Elles se répartissent alors vis-à-vis des choix de modélisation des interactions de contact ainsi que des méthodes d'intégration temporelle des équations de la dynamique.

1.1 Dynamique du solide rigide

Considérons, dans un premier temps, la description de la dynamique d'un solide rigide en l'absence de contacts. Le formalisme utilisé classiquement est celui de Newton (1687) et Euler (1707-1783). La cinématique d'un solide S_i est, par exemple, représentée par la vitesse de translation de son centre de gravité notée $U_i = \dot{X}_i$ (X_i étant la position du centre de gravité) et un vecteur vitesse de rotation Ω_i exprimé dans le repère principal d'inertie R_i attaché au solide.

On peut alors écrire les équations de Newton-Euler (Principe fondamental de la dynamique) appliquées au solide S_i , au centre de gravité (noté G_i), dans la base associée à un référentiel galiléen R_g ,

$$\begin{cases} M_i \dot{U}_i = F_i^{ext} \\ J_i \dot{\Omega}_i + \Omega_i \times J_i \Omega_i = M_i^{ext}, \end{cases} \quad (1.1)$$

avec M_i la masse du solide, J_i la matrice d'inertie du solide S_i exprimée dans le repère principal d'inertie R_i attaché au solide, F_i^{ext} et M_i^{ext} les résultantes et moments en G dérivant d'actions mécaniques suffisamment régulières.

1.2 Contact entre corps

Considérons maintenant les corps S_i et S_j susceptibles d'entrer en contact (indiqué par α) et nommés par convention *candidat* et *antagoniste* respectivement. On suppose qu'il existe à tout instant deux points (P, P') , P appartenant à la frontière de S_i et P' appartenant à la frontière de S_j , minimisant la distance MM' quels que soient $M \in \partial S_i$ et $M' \in \partial S_j$. On définit par la suite un vecteur unitaire normal à S_i en P , à S_j en P' , et orienté du corps *antagoniste* vers le corps *candidat*, que l'on notera $\mathbf{n}$ (FIG.1.1). Ce vecteur est unique pour des disques en 2D ou des sphères en 3D, plus généralement pour des corps convexes réguliers. Dans un cas plus général (corps non convexes ou supportant des arêtes et des sommets) une règle de construction doit alors être choisie.

La distance $g^\alpha = \overline{PP'}$ entre les corps candidats au contact est appelée *interstice* (ou *gap* en anglais). La *vitesse relative* v_α est définie par,

$$v^\alpha = U(P \in S_i) - U(P' \in S_j), \quad (1.2)$$

où $U(P \in S_i)$ est la vitesse du point P appartenant à S_i et $U(P' \in S_j)$ est la vitesse du point P' appartenant à S_j . Lorsque les corps S_i et S_j sont en contact, alors $g = 0$ et $v^\alpha = [v_t^\alpha, v_n^\alpha, v_s^\alpha]$ est nommée vitesse relative au contact α . Alors l'interstice (qui est une fonction continue du temps) a pour dérivée v_n^α :

$$\dot{g}^\alpha = v_n^\alpha.$$

L'effort de contact est noté par la suite, pour un contact α , $f^\alpha = [f_n^\alpha, f_t^\alpha, f_s^\alpha]$.

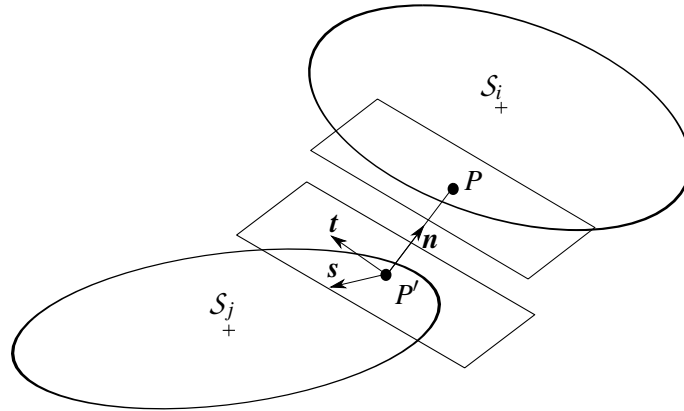


FIGURE 1.1 – Repère local au contact $R_\alpha = (P', \mathbf{n}, \mathbf{t}, \mathbf{s})$ entre deux solides S_i et S_j

1.2.1 Lois de contact

Les phénomènes physiques et chimiques intervenants dans une interaction de contact entre deux corps sont complexes. Pour un type de contact fixé, des données expérimentales sont a priori nécessaires afin de construire une loi d'interaction qui rende compte de

ces phénomènes. Pour les études menées dans cette thèse, qui concernent principalement les milieux granulaires et les ouvrages maçonnés secs, on estime que les phénomènes principaux à prendre en compte sont l'unilatéralité et le frottement sec.

1.2.2 Condition de non interpénétration

La non-interpénétration des corps est l'un des ingrédients essentiels du contact unilatéral. Elle signifie que les frontières des corps *candidat* et *antagoniste* ne peuvent s'intersecter. Cette propriété implique que l'interstice g^α entre les corps candidats au contact α est positif. Il est par ailleurs supposé que les corps n'exercent pas de forces attractives l'un sur l'autre. On a alors la *relation de complémentarité*,

$$g^\alpha \geq 0, \quad f_n^\alpha \geq 0, \quad f_n^\alpha g^\alpha = 0, \quad (1.3)$$

représentée par le graphe de Signorini FIG.1.2. Ce graphe n'est pas un graphe de fonction, car l'on ne peut exprimer g^α en fonction de f_n^α , ni f_n^α en fonction de g^α . Il n'est donc pas envisageable de considérer ce graphe dans le cadre de méthodes explicites. En temps continu le Lemme de viabilité de Moreau [60] montre que la loi de contact unilatéral (1.3) entre interstice et force de contact est satisfaite si les relations suivantes sont respectées,

$$\begin{cases} \text{Si } g^\alpha > 0, & r_n^\alpha = 0, \\ \text{Si } g^\alpha = 0, & v_n^\alpha \geq 0, \quad r_n^\alpha \geq 0, \quad r_n^\alpha v_n^\alpha = 0. \end{cases} \quad (1.4)$$

Les relations de complémentarité sont ainsi transférées sur la composante normale de la vitesse relative v_n^α et de l'impulsion de contact r_n^α , modulo un test sur l'interstice. L'utilisation des impulsions à la place des forces est justifié par l'écriture de la dynamique non régulière, admettant des sauts de vitesses, à l'aide de la notion de mesure différentielle adaptée tant aux vitesses (relatives) qu'aux impulsions [60, 61] (cf. SECT.1.4).

Une autre façon de modéliser le contact est de considérer que f_n^α est une fonction de l'interstice. On appellera alors ce type de lois de contact des lois régularisées. On peut par exemple constater qu'à une échelle fine la surface des matériaux n'est pas parfaite et qu'une déformation localisée au contact peut être prise en compte par des valeurs négatives de g^α . Par exemple, il peut être supposé que la force de réaction est proportionnelle à l'interpénétration (FIG.1.3). Des formulations plus complexes peuvent être introduites (FIG.1.4), assurant la continuité de la dérivée de la loi de contact (e.g. loi de Hertz).

1.2.3 Loi de frottement

Une loi de frottement relie les efforts tangentiels $f_T^\alpha = [f_t^\alpha, f_s^\alpha]$ (ou de façon équivalente les impulsions $r_T^\alpha = [r_t^\alpha, r_s^\alpha]$) de deux corps en contact à leurs vitesses tangentielles relatives $v_T^\alpha = [v_t^\alpha, v_s^\alpha]$. Le frottement sec est classiquement modélisé par la loi de Coulomb, synthétisant les observations de Léonard de Vinci, Amontons et Coulomb. La caractéristique de cette loi est que les forces de frottement sont contenues dans un cône

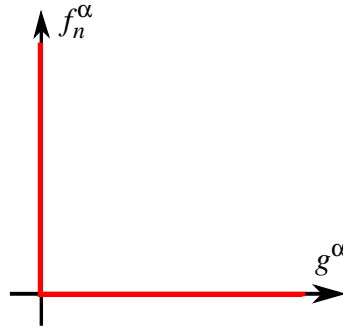


FIGURE 1.2 – Graphe de Signorini

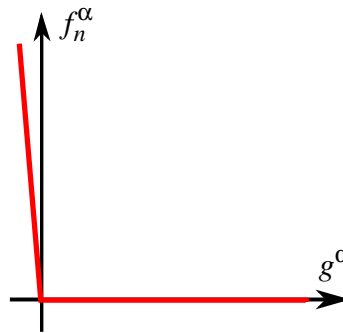


FIGURE 1.3 – Graphe de contact bilinéaire avec élasticité

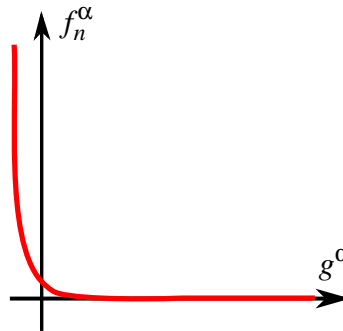


FIGURE 1.4 – Graphe de contact non-linéaire

d'ouverture μ (le cône de Coulomb) : $\|f_T^\alpha\| \leq \mu f_n^\alpha$. Si la vitesse de glissement v_T^α est non nulle, cette force est opposée à la vitesse de glissement et son module vaut μf_n^α , soit,

$$\|f_T^\alpha\| \leq \mu f_n^\alpha, \quad \|v_T^\alpha\| \neq 0 \Rightarrow f_T^\alpha = -\mu f_n^\alpha \frac{v_T^\alpha}{\|v_T^\alpha\|}. \quad (1.5)$$

Cette loi est représentée FIG.1.5. Comme pour la condition de non interpénétration, le graphe de représentation de la loi de Coulomb n'est pas une fonction et ne se prête donc pas à une résolution explicite de l'effort tangentiel de contact en fonction de la vitesse relative des deux corps concernés.

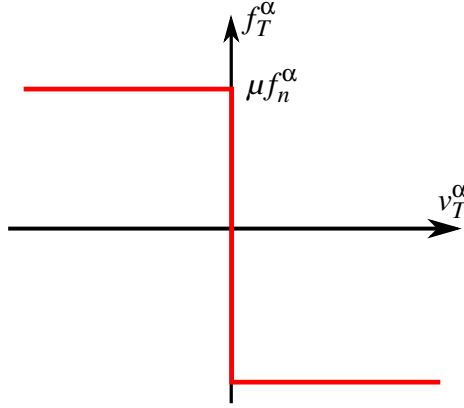


FIGURE 1.5 – Graphe de Coulomb

Le frottement entre deux pièces lubrifiées, dénommé frottement visqueux, a pour caractéristique que quelle que soit la force tangentielle, celle-ci engendre du glissement entre les deux corps. Une façon de régulariser le frottement de Coulomb est donc de supposer une constante d'amortissement γ_T^α (issue de l'expérimentation ou choisie comme paramètre du modèle numérique) reliant linéairement f_T^α à v_T^α tant que $\|f_T^\alpha\| \leq \mu f_n^\alpha$. On obtient alors la loi de Coulomb régularisée,

$$f_T^\alpha = \begin{cases} -\gamma_T^\alpha v_T^\alpha, & \|f_T^\alpha\| \leq \mu f_n^\alpha, \\ -\mu f_n^\alpha \frac{v_T^\alpha}{\|v_T^\alpha\|}, & \|f_T^\alpha\| > \mu f_n^\alpha. \end{cases} \quad (1.6)$$

1.3 Classification des méthodes DEM

Comme indiqué en introduction, les différentes branches de la méthode des éléments discrets peuvent schématiquement être distinguées en fonction de l'approche explicite ou implicite choisie pour traiter, d'une part, l'intégration en temps des équations de la dynamique et d'autre part, les lois de contact entre solides.

Les premières méthodes DEM, introduite par Cundall [21] (1979) et Allen [8] (1987) considèrent des schémas d'intégration explicites sur un intervalle de temps qui ne peuvent être mis en œuvre qu'avec des interactions régularisées ("smooth") entre les corps du système. Cette classe de méthode DEM sera nommée *smooth-DEM* par la suite. Cette approche est l'une des plus populaires car à la fois simple, souple et générale. Elle nécessite la définition par l'utilisateur des paramètres de régularisation des lois de contact, ce qui peut être délicat. Le pas de temps employé est aussi un paramètre très important de cette méthode. En effet, ce modèle mettant en jeu une réponse harmonique de la position des corps, le pas de temps choisi doit être inférieur à la fréquence d'oscillation d'une onde courte du système.

La méthode *Granular Element Method* introduite par Kishino [47] (1988) considère un modèle régularisé des lois de contact mais introduit un schéma d'intégration temporelle implicite. La méthode de résolution est alors à rapprocher des techniques de pénalisation

prises en œuvre dans le cadre des méthodes Éléments Finis.

Dans un esprit différent, la méthode *Contact Dynamics* est introduite par Moreau [58] (1988) pour des modèles d'interactions non régulières couplés à une méthode d'intégration temporelle implicite. Des travaux ultérieurs d'extension de la méthode aux simulations de collections de corps déformables (Jean [44] 1999) ont mené à la méthode dénommée classiquement *NonSmooth Contact Dynamics* (NSCD). Cette approche est développée dans la section suivante et constitue le cadre théorique de ce manuscrit.

Carpenter *et al.* [18] (1991) proposèrent une méthode pour résoudre des modèles d'interactions non régularisées combinées à un schéma d'intégration temporelle explicite.

1.4 Dynamique non régulière des contacts – NSCD

La dynamique non régulière des contacts (NonSmooth Contact Dynamics – NSCD) a été introduite par J. J. Moreau [60] et développée, notamment, par M. Jean [44]. Les idées principales en sont :

“En cas de collisions, des sauts de vitesse sont attendus. [...] Leurs dérivées (et donc les accélérations) prennent la forme de mesures, ce qui généralise le formalisme traditionnel des percussions. Un calcul différentiel non régulier, plus faible que celui des fonctions différentiables, leur est applicable. Les équations différentielles à mesures qui régissent alors la dynamique se prêtent à un traitement numérique par discrétisation du temps pourvu qu'on fournisse des lois de collision. [...] Tous les contacts présents dans le système à l'instant d'une collision participent à la dynamique de l'événement. Des méthodes numériques prenant en compte les contacts collectivement fournissent ainsi des résultats plausibles dans des circonstances où le traditionnel coefficient de restitution est inopérant.”

1.4.1 Dynamique en temps continu

Les collisions et chocs entre corps du système faisant intervenir des sauts de vitesses associées à des impulsions de Dirac des forces de contact, l'utilisation des dérivées des vitesses des corps est donc proscrite du formalisme NSCD.

Les équations de Newton-Euler pour un solide S_i sont alors formulées en terme d'équation différentielles mesurables. Considérant un modèle de corps rigide, ces équations s'écrivent,

$$M_i dV_i = F_i^d(x_i, t) dt + P_i d\nu, \quad (1.7)$$

avec $F_i^d(x_i, t)$ les efforts extérieurs (résultante et moment) imposés, dt la mesure de Lebesgue, dV_i une mesure différentielle représentant la mesure d'accélération, $d\nu$ une mesure positive et P_i la représentation (résultante et moment) au centre de gravité du corps des densités locales d'impulsions de contact. La mesure $d\nu$ est en général la somme de la mesure de Lebesgue et de mesures de Dirac (intervenant lors de chocs entre les corps),

$$P_i d\nu = F dt + \sum_n p_n \delta_{t_n},$$

avec F un effort de contact suffisamment régulier et p_n la densité d'impulsion lors du choc survenu à l'instant $t_n \in]t_i, t_{i+1}]$. V_i est la concaténation dans un même vecteur des composantes U_i associées aux vitesses de translations du centre de gravité du solide (exprimées dans la base globale) et des composantes de rotation Ω_i exprimées dans le repère principal d'inertie R_i du solide. M_i est une matrice diagonale comportant à la fois la masse et les paramètres inertiels du solide exprimés dans sa base principale d'inertie,

$$M_i = \begin{bmatrix} M_i I_{3 \times 3} & 0 \\ 0 & J_i \end{bmatrix},$$

avec $I_{3 \times 3}$ la matrice identité de taille 3×3 .

Pour une collection de N_S corps $C_{N_S} = \{S_1, \dots, S_{N_S}\}$, il est pratique de noter,

$$V = [V_1, \dots, V_{N_S}],$$

la concaténation en un seul vecteur des vitesses généralisées des N corps de la collection. De la même façon on note F^d , P , M , les concaténations des vecteurs F_i^d , P_i et des matrices M_i pour tous les corps d'une même simulation.

1.4.2 Dynamique en temps discret

Pour un intervalle de temps $]t_i, t_{i+1}]$, de longueur $h = t_{i+1} - t_i$, on note avec l'exposant $(-)$ les quantités connues en début de pas de temps ; les quantités en fin de pas de temps (sans exposant) sont alors à déterminer. En intégrant les deux membres de l'équation (1.7) pour une collection de corps C on obtient,

$$M(V - V^-) = \int_{]t_i, t_{i+1}]} F^d(x, t) dt + \int_{]t_i, t_{i+1}]} P dv.$$

On note R^D une approximation de $\int_{]t_i, t_{i+1}]} F^d(x, t) dt$, qui est une moyenne sur l'intervalle de temps $]t_i, t_{i+1}]$ des forces extérieures connues.

Le terme d'impulsion $\int_{]t_i, t_{i+1}]} P dv$ est à ce stade inconnu et sera noté R par la suite ; il regroupe toutes les actions mécaniques associées aux réactions de contact, percussions, glissements, etc. entre corps. R et V sont donc le couple d'inconnues à déterminer. L'équation à traiter peut être résumée formellement, en notant $R^d = R^D + MV^-$, par :

$$MV = R + R^d. \quad (1.8)$$

En l'état, il n'est évidemment pas possible de résoudre cette équation. On remarque de plus que M étant diagonale par bloc, les équations de la dynamique sont indépendantes pour chaque corps de la collection C .

1.4.3 Passage du repère des corps au repère des contacts

Le système d'équations (1.8) semble, dans un premier temps, être une simple concaténation d'équations linéaires indépendantes. Si le terme associé aux impulsions de contact R était connu, ce serait en effet le cas. Dans les méthodes régularisées, la détermination explicite des efforts de contact permet d'exploiter cette propriété. Cependant, pour un milieu granulaire ou une structure maçonnée par exemple, un comportement d'ensemble émerge au travers des contacts qu'entretiennent les corps entre eux. Ce réseau de contacts présent dans les collections de corps contient de fait la majeure partie de l'information sur le comportement macroscopique des milieux discrets (pour les régimes d'écoulements lents). Il est caractérisé par des opérateurs de passage des repères principaux d'inertie des corps aux repères des contacts (et inversement).

Prenons deux disques ($\mathcal{S}_i$ et $\mathcal{S}_j$) en contact (FIG.1.6). On peut exprimer les vitesses relatives associées au contact (noté α) en fonction des inconnues cinématiques des corps $\mathcal{S}_i$ et $\mathcal{S}_j$, à l'aide de l'équation (1.2), comme :

$$\begin{bmatrix} v_n^\alpha \\ v_t^\alpha \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi & 0 & -\cos\varphi & -\sin\varphi & 0 \\ -\sin\varphi & \cos\varphi & \text{ray}_i & \sin\varphi & -\cos\varphi & \text{ray}_j \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V_{1i} \\ V_{2i} \\ V_{3i} \\ V_{1j} \\ V_{2j} \\ V_{3j} \end{bmatrix},$$

avec φ l'angle de rotation du repère de contact par rapport au repère global (confondu dans ce cas particulier avec les repères principaux d'inertie des deux solides).

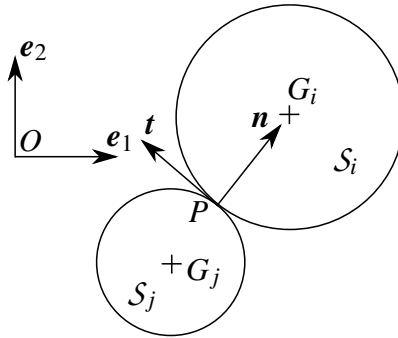


FIGURE 1.6 – Contact de deux disques

Si on note H_α^T la matrice de passage des inconnues des corps aux inconnues des contacts, on obtient :

$$v_\alpha = H_\alpha^T [V_i, V_j].$$

Dans le cas général 3D, l'expression de l'opérateur H_α^T devient plus complexe. On note P_{gc} la matrice de passage de la base globale (repère du laboratoire) à la base locale au contact, P_{ig} la matrice de passage de la base principale d'inertie du solide $\mathcal{S}_i$ à

la base globale et Z_i la matrice $Z_i = P_{gc} P_{ig}^{i skew}(P G_i)$. Les différents repères utilisés sont représentés FIG.1.7. Avec ces notations on a,

$$v_\alpha = \begin{bmatrix} P_{gc} & Z_i & -P_{gc} & -Z_j \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_i \\ \Omega_i \\ U_j \\ \Omega_j \end{bmatrix}.$$

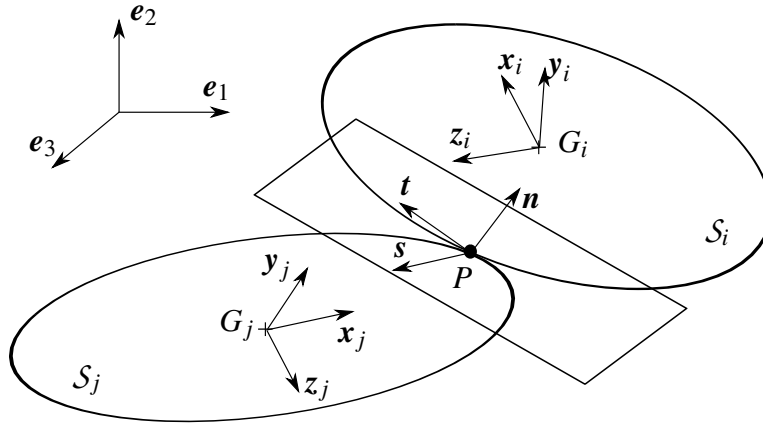


FIGURE 1.7 – Configuration de contact, cas général 3D ; $R_g = (O, e_1, e_2, e_3)$ le repère global, $R_i = (G_i, x_i, y_i, z_i)$ le repère attaché au solide S_i et $R_\alpha = (P, n, t, s)$ le repère attaché au contact α .

On remarque que cette matrice dépend de la configuration de contact ($H_\alpha^T = H_\alpha^T(x)$) et est donc une inconnue du problème d'évolution. Nous considérerons par la suite une prédiction explicite de la configuration de contact sur l'intervalle $[t_i, t_{i+1}]$ calculée à partir des données en début de pas de temps.

Les vitesses relatives pour l'ensemble des contacts présents dans une simulation v s'expriment alors en fonction des vitesses des corps,

$$v = H^T V, \quad (1.9)$$

avec H^T l'assemblage des matrices élémentaires H_α^T . On peut de même exprimer la relation entre les impulsions de contact r_α supportées par un corps S_i et le torseur résultant sur ce même corps sous forme matricielle. On note cette relation linéaire,

$$R_i = \sum_{\alpha} G_\alpha r_\alpha, \quad (1.10)$$

et pour une collection de corps en contact,

$$R = Gr. \quad (1.11)$$

L'énergie du système exprimée dans le repère des contacts et dans le repère associé aux corps étant égale, on a

$$\forall (V, r) \quad V \cdot R = v \cdot r = H^T V \cdot r = (H^T V)^T r = V^T H r = V \cdot Hr,$$

donc,

$$\begin{aligned}\forall(V, r) \quad V \cdot (R - Hr) &= 0 \\ V \cdot (Gr - Hr) &= 0\end{aligned}\tag{1.12}$$

d'où $G = H$. On obtient ainsi la relation classique entre impulsions de contact et torseur résultant sur les corps,

$$R = Hr.\tag{1.13}$$

Les équations (1.9) et (1.13) sont appelées *équations de compatibilité*.

1.4.4 Dynamique réduite aux contacts

La dynamique macroscopique des échantillons granulaires dense étant pilotée par le réseau de contact, on va exprimer les équations de la dynamique “condensées” aux contacts. Pour cela multiplions à gauche l'équation (1.8) par $H^T M^{-1}$,

$$H^T M^{-1} M V = H^T M^{-1} R + H^T M^{-1} R^d,$$

d'où en utilisant les équations de compatibilité sur les vitesses (1.9), on obtient,

$$v = H^T M^{-1} R + H^T M^{-1} R^d,$$

en utilisant maintenant la compatibilité sur les impulsions, on a,

$$v = H^T M^{-1} Hr + H^T M^{-1} R^d.$$

Finalement, en notant $v^d = H^T M^{-1} R^d$, on obtient les équations de la dynamique exprimées en fonction des inconnues de contact :

$$Wr - v = -v^d,\tag{1.14}$$

avec la matrice $W = H^T M^{-1} H$ classiquement nommée *matrice de Delassus*.

Comme W (contrairement à M) n'est pas diagonale, cette formulation de la dynamique permet de prendre en compte collectivement l'ensemble des contacts de l'échantillon simulé. De plus, les inconnues aux contacts sont exprimées dans les différents repères de contact ce qui facilite le traitement des lois d'interactions décrites section 1.2. Cependant on est ici en présence d'un opérateur W a priori non inversible et les lois de contact à considérer sont potentiellement non régulières (loi de Signorini et de Coulomb non régularisées, par exemple). La combinaison de ces deux difficultés rend la résolution de la dynamique réduite très délicate. En effet, s'il était possible d'écrire une relation $r = Kv$, la question serait de trouver un inverse généralisé $\tilde{W}^+$ tel que $\tilde{W}r = v^d$. Le fait que les inconnues de contact suivent des lois non régulières impose donc des méthodes itératives dédiées à la résolution de (1.14) et des lois d'interactions.

1.4.5 Méthode de Gauss Seidel non linéaire (NLGS)

Cette méthode itérative dérivée de la méthode de Gauss Seidel est présentée ici comme référence pour la résolution des problèmes NSCD du fait de son caractère générique (des lois d'interaction très variées peuvent y être considérées) et de sa robustesse (malgré le peu de résultats théoriques sur les propriétés de convergence de cette méthode). D'autres méthodes de résolution peuvent être envisagées, en particulier une méthode dérivée de l'algorithme du gradient conjugué présentée par Renouf [68] pour le frottement sec.

L'algorithme NLGS consiste à considérer la matrice W par blocs $W_{\alpha\beta}$ associés aux contacts α et β . On a alors les blocs diagonaux $W_{\alpha\alpha}$ et les blocs extra diagonaux $W_{\alpha\beta}$ ($\alpha \neq \beta$). L'itéré $k+1$ de l'algorithme NLGS, avec N_c contacts simulés, est présenté ci-dessous, avec $\mathcal{R}(v_\alpha, r_\alpha) = 0$ la relation de comportement non régulière au contact α . De plus on notera formellement $\mathcal{R}(v, r) = 0$ ces relations de comportement pour les vecteurs assemblés v et r .

Algorithm 1 Itération $k+1$ de l'algorithme NLGS

```

for  $\alpha = 1, \dots, N_c$  do
   $W_{\alpha\alpha}r_\alpha^{k+1} - v_\alpha^{k+1} = -v_\alpha^d - \sum_{\beta < \alpha} W_{\alpha\beta}r_\beta^{k+1} - \sum_{\beta > \alpha} W_{\alpha\beta}r_\beta^k$ 

   $\mathcal{R}(v_\alpha, r_\alpha) = 0$ 
end for

```

Pour un contact α on a alors,

$$W_{\alpha\alpha}r_\alpha^{k+1} - v_\alpha^{k+1} = b_\alpha^{k+1}, \quad (1.15)$$

avec $b_\alpha^{k+1} = v_\alpha^d + \sum_{\beta < \alpha} W_{\alpha\beta}r_\beta^{k+1} + \sum_{\beta > \alpha} W_{\alpha\beta}r_\beta^k$. Dans le cas de contacts frottants, on résout les équations (1.15) par des méthodes d'intersection des graphes de Signorini et de Coulomb. Pour simplifier, on représente FIG.1.8 et FIG.1.9 les intersections de graphes dans le cas d'un contact frottant où $W_{\alpha\alpha}$ est diagonale. Lorsque les termes $W_{nT}^{\alpha\alpha}$ ne sont pas nuls, les équations de la dynamique locale au contact peuvent être résolues par une méthode d'intersection de graphe plus générale, une approche par bi-potentiel ou des algorithmes type Newton généralisé dans les cas tridimensionnels [1].

1.4.6 Convergence de l'algorithme NLGS

La convergence de l'algorithme NLGS est une question épineuse. En effet, peu de résultats sont disponibles hormis pour des cas de figure très particuliers (voir [45]). Les critères de convergence mis en œuvre dans le code de calcul LMGC90 reposent sur la notion de stabilité énergétique du réseau de contact. En pratique, on vérifie que la variation d'énergie (moyenne, maximale ou une somme pondérée de ces deux quantités) entre deux itérations NLGS soit inférieure à une tolérance fixée par l'utilisateur. Le contrôle de l'algorithme NLGS est de fait largement heuristique et dépend du type de simulation effectuée.

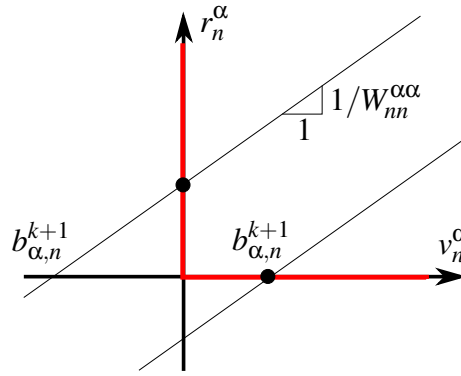


FIGURE 1.8 – Intersection du graphe de Signorini et de l'équation de la dynamique réduite au contact (composante normale) pour deux valeurs de b_α^{k+1}

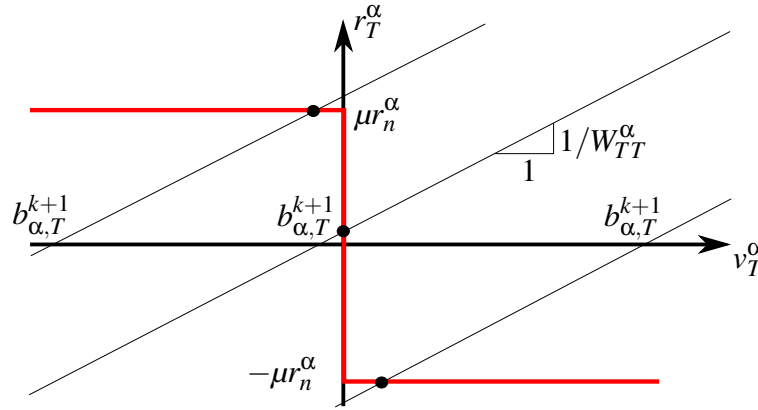


FIGURE 1.9 – Intersection du graphe de de Coulomb et de l'équation de la dynamique réduite (composantes tangentielles) pour trois valeur de b_α^{k+1}

Trois type critères de convergence sont disponibles dans la plate forme de calcul LMGC90, basés : sur une norme dite quadratique (“*Quad*”), une norme dit max (“*Maxm*”) et une combinaison empirique de ces deux précédentes, nommé “*QM/16*”.

Le critère en norme quadratique est défini, pour une tolérance numérique Tol fixée par l'utilisateur, par,

$$Quad \equiv \left\{ \begin{array}{l} \frac{\sum_\alpha \langle \Delta v_\alpha, r_\alpha \rangle}{\sum_\alpha \langle W_{\alpha\alpha} r_\alpha, r_\alpha \rangle} < Tol, \text{ et} \\ \frac{\sqrt{\sum_\alpha \|\Delta v_\alpha\|^2 / N_C}}{\sqrt{\sum_\alpha \|W_{\alpha\alpha} r_\alpha\|^2 / N_C}} < Tol, \text{ et} \\ \frac{\sqrt{\sum_\alpha \|\Delta v_\alpha\|^2 \|r_\alpha\|^2 / N_C}}{\sum_\alpha (W_{\alpha\alpha} r_\alpha, r_\alpha) / N_C} < Tol, \end{array} \right. \quad (1.16)$$

avec, pour chaque contact α , Δv^α la variation de vitesse relative au contact entre deux

itérations de l'algorithme NLGS (ALG.1), r_α la dernière valeur connue des impulsions au contact α , $\langle, \rangle$ le produit scalaire associé à la norme euclidienne $\|\cdot\|$ et N_C le nombre de contacts actifs.

De même, le critère en norme max est,

$$Maxm \equiv \left\{ \begin{array}{l} \frac{\sum_{\alpha} \langle \Delta v_{\alpha}, r_{\alpha} \rangle}{\sum_{\alpha} \langle W_{\alpha\alpha} r_{\alpha}, r_{\alpha} \rangle} < Tol, \text{ et} \\ \frac{\max_{\alpha} \|\Delta v_{\alpha}\|^2}{\sqrt{\sum_{\alpha} \|W_{\alpha\alpha} r_{\alpha}\|^2 / N_C}} < Tol, \text{ et} \\ \frac{\max_{\alpha} \langle \Delta v_{\alpha}, r_{\alpha} \rangle}{\sum_{\alpha} (W_{\alpha\alpha} r_{\alpha}, r_{\alpha}) / N_C} < Tol. \end{array} \right. \quad (1.17)$$

Nous seront amené par la suite CHAP.3 à interpréter ces critères comme des *indicateurs* de convergence, en eux-mêmes insuffisants à justifier la pertinence d'une simulation numérique, simulation qu'il sera alors nécessaire d'évaluer *a posteriori*.

1.4.7 Vue d'ensemble des espaces de travail

La méthode NSCD traite donc de deux types de quantités : les quantités associés à la dynamique des solides et celles attachées aux contacts. On représente classiquement les relations entre ces quantités par un schéma d'espaces en dualité (FIG.1.10).

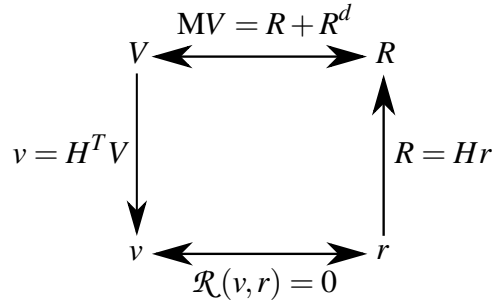


FIGURE 1.10 – Diagramme commutatif entre espaces de vitesses et d'impulsions, attachés aux corps (partie supérieure) et attachés aux contacts (partie inférieure)

2 Méthodes de décomposition de domaine – DDM

Différentes techniques de décomposition de domaine adaptées à la méthode NSCD ont été développées afin de répondre aux exigences de temps de calcul des simulations actuelles. En effet, si la méthode NSCD considère de “grands” pas de temps (par rapport à ceux communément employés dans le cadre des méthodes régularisées) les coûts de calcul n’en restent pas moins conséquents (de l’ordre de plusieurs mois pour des simulations réalistes exécutées sur un seul cœur de calcul). L’étape cruciale est, de ce point de vue, la phase de résolution des impulsions de contact par l’algorithme NLGS. Le nombre d’itérations nécessaires afin de stabiliser le réseau d’efforts peut être conséquent et augmente considérablement avec le nombre de corps et de contacts présents dans l’échantillon. Pour les simulations 3D de corps de géométrie complexes (polyèdres, objets non-convexes) la détection du contact et la construction des opérateurs (H, H^T) devient de même une phase coûteuse.

Les méthodes de décomposition de domaine ont fait leurs preuves dans le cas de problèmes linéaires ou de problèmes non linéaires résolus itérativement par une succession de problèmes linéaires. On remplace en général une méthode de résolution directe mono-domaine par un algorithme DDM itératif. Dans le cas de la méthode NSCD, le caractère discret et non régulier du problème à traiter mène à repenser les techniques de décomposition de domaine.

L’*extensibilité* des méthodes DDM est fréquemment analysée du point de vue de l’*extensibilité* forte (évolution du nombre d’itérations à convergence lorsque le nombre de processeurs croît pour un même problème à traiter) et de l’*extensibilité* faible (évolution du nombre d’itérations à convergence lorsque le nombre de processeurs croît en même temps que la taille du problème à traiter). La performance des algorithmes est caractérisée par le facteur d’*accélération parallèle* (S_p), et le facteur d’*efficacité* (E_p),

$$S_p = \frac{T_1}{T_{N_p}}, \quad (1.18)$$

$$E_p = \frac{S_p}{N_p}, \quad (1.19)$$

avec N_p le nombre de cœurs de calcul mis en jeu (considéré par la suite égal au nombre de sous-domaines), T_1 et T_{N_p} les temps CPU en séquentiel et parallèle respectivement. L’objectif de la parallélisation d’un algorithme via une méthode décomposition de domaine est alors de diviser le temps de calcul par le nombre de processeurs utilisés $S_p \simeq N_p$. Une *accélération parallèle* égale à N_p caractérise un algorithme DDM “linéaire” et supérieure à N_p un algorithme DDM “super-linéaire”.

2.1 Décomposition de domaine en milieu continu

Les techniques de décomposition de domaines classiques, adaptées à la résolution de problèmes issus de formulations continues, se regroupent en deux catégories : les mé-

thodes de Schwarz et les méthodes de Schur. Bien que la structure du problème NSCD soit assez éloignée de celles rencontrées en milieu continu, nous présentons ici les idées principales de ces deux familles de méthodes. Nous verrons par la suite que les deux méthodes discutées tout au long de ce manuscrit ont de forts liens de parenté avec ces premières méthodes.

Afin de simplifier cette présentation, considérons l'équation de la chaleur

$$\partial_t u - \Delta u = f \quad (1.20)$$

représentant l'évolution en temps et en espace de la température u d'un corps définissant le domaine Ω (on prend $\Omega = [0, 1]$ pour simplifier). Une discrétisation en temps donne l'équation elliptique à résoudre pour passer du temps t_i au temps t_{i+1}

$$-\frac{d^2 u}{dx^2} + \eta u = f \quad (1.21)$$

avec η et f deux constantes et les températures imposées u_g^d et u_d^d en 0 et 1. On notera, après discrétisation (e.g. par différences finies ou éléments finis),

$$Au = f. \quad (1.22)$$

2.1.1 Méthodes de Schwarz

La *méthode de Schwarz alterné*, introduite par H.A. Schwarz en 1870 (bien avant les calculateurs parallèles !) consiste à calculer itérativement la solution de (1.21). Le domaine Ω est divisé en deux sous-domaines Ω_1 et Ω_2 . La frontière de Ω_1 située dans Ω_2 est notée Γ_1 , et frontière de Ω_2 située dans Ω_1 est notée Γ_2 . Dans le cas uni-dimensionnel, le recouvrement $\Omega_1 \cap \Omega_2$ est un intervalle de longueur δ . On cherche alors une suite (u_1^n, u_2^n) telle que

$$\begin{aligned} -\frac{d^2 u_1^{n+1}}{dx^2} + \eta u_1^{n+1} &= f \text{ dans } \Omega_1, & -\frac{d^2 u_2^{n+1}}{dx^2} + \eta u_2^{n+1} &= f \text{ dans } \Omega_2, \\ u_1^{n+1}(0) &= u_g^d, & u_2^{n+1}(1) &= u_d^d, \\ u_1^{n+1}|_{\Gamma_1} &= u_2^n|_{\Gamma_1}, & u_2^{n+1}|_{\Gamma_2} &= u_1^n|_{\Gamma_2}. \end{aligned}$$

La *méthode de Schwarz parallèle* est une variante, avec $u_2^{n+1}|_{\Gamma_2} = u_1^n|_{\Gamma_2}$. Les calculs par sous-domaines sont alors effectués en parallèle.

On peut montrer que les formulations discrètes [30] des algorithmes de *Schwarz alterné*,

$$A_1 u_1^{n+1} = f_1 - B_1 u_2^n, \quad A_2 u_2^{n+1} = f_2 - B_2 u_1^{n+1}, \quad (1.23)$$

et *Schwarz parallèle*

$$A_1 u_1^{n+1} = f_1 - B_1 u_2^n, \quad A_2 u_2^{n+1} = f_2 - B_2 u_1^n, \quad (1.24)$$

sont, respectivement, des méthodes de Gauss-Seidel et de Jacobi par bloc, avec A_E la restriction de la matrice A aux éléments du sous-domaine E , et B_1 une matrice qui à un vecteur défini sur Ω_2 associe un vecteur défini sur Ω_1 , prolongé par 0 hors de Ω_2 .

La méthode de *Schwarz additif* –AS– se place dans le cas d'un *recouvrement minimal* (dans le cas d'un segment discrétisé avec un pas h , on aurait $\delta = h$). Le recouvrement géométrique est alors minimal et le recouvrement algébrique est vide. L'idée principale de cette méthode est d'interpréter l'algorithme de Schwarz parallèle discrétisé comme une méthode itérative pour le système préconditionné

$$M_{AS}^{-1}Au = M_{AS}^{-1}f, \quad (1.25)$$

avec $u = [u_1, u_2]$ et $f = [f_1, f_2]$ et le préconditionneur :

$$M_{AS}^{-1} = \sum_{E=1}^{N_{sd}} R_E^T A_E^{-1} R_E. \quad (1.26)$$

Lorsque A est symétrique définie positive M_{AS}^{-1} l'est aussi, ce qui permet la résolution du système linéaire (1.25) par l'algorithme du *gradient conjugué*. La résolution des systèmes linéaires du type $A_1 x_1 = b_1$ intervenants dans l'algorithme, sont alors effectués en parallèle et le conditionnement de la résolution du système linéaire est amélioré par le préconditionneur M_{AS}^{-1} , ce qui fait de la méthode AS une méthode robuste et efficace.

L'algorithme de *Schwarz additif restreint* –RAS– est une variante de la méthode AS, avec des opérateurs de restriction $\tilde{R}_E$, tels que $\sum_E \tilde{R}_E^T \tilde{R}_E = I$. Cependant, le préconditionneur

$$M_{RAS}^{-1} = \sum_{E=1}^{N_{sd}} \tilde{R}_E^T A_E^{-1} R_E \quad (1.27)$$

n'est pas symétrique, ce qui interdit l'emploi d'une méthode de gradient conjugué, mais d'autres méthodes de Krylov (e.g. GMRES [74]) peuvent être adoptées. La méthode RAS est donc spécifique à des problèmes initialement non symétriques.

Enfin les *méthodes de Schwarz optimisées* [52] font intervenir des conditions de transmission portant sur la dérivée de la fonction (conditions aux limites de type Neumann) ou des conditions de type Robin (combinaison de conditions aux limites de type Dirichlet et Neumann). Ces méthodes établissent un pont avec les méthodes de Schwarz classique, qui fonctionnent avec du recouvrement et les méthode de complément de Schur, car elles permettent de considérer des décompositions sans recouvrement ($\delta = 0$ dans notre cas) du domaine initial.

2.1.2 Méthodes de complément de Schur

Une seconde famille de décomposition de domaine est historiquement dérivée des travaux de Przemieniecki en 1963 dans le contexte du calcul en aéronautique.

Méthode de Schur primale. L'idée est d'écrire le système linéaire (uni-dimensionnel, avec deux sous-domaines Ω_1 et Ω_2 , sans recouvrement) $Au = f$ en renumérotant les inconnues $u = [u_1, u_2, u_\Gamma]$ (on suppose donc un déplacement unique à l'interface) de telle sorte que

$$Au = f \Leftrightarrow \begin{bmatrix} A_{11} & 0 & A_{1\Gamma} \\ 0 & A_{22} & A_{2\Gamma} \\ A_{\Gamma 1} & A_{\Gamma 2} & A_{\Gamma\Gamma} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_\Gamma \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_\Gamma \end{bmatrix}.$$

Ce système donne trois blocs dont les solutions sont

$$\begin{aligned} u_1 &= A_{11}^{-1}(f_1 - A_{1\Gamma}u_\Gamma) \\ u_2 &= A_{22}^{-1}(f_2 - A_{2\Gamma}u_\Gamma) \\ A_{\Gamma 1}u_1 + A_{\Gamma 2}u_2 + A_{\Gamma\Gamma}u_\Gamma &= f_\Gamma \end{aligned} \quad (1.28)$$

On peut donc condenser le système sur l'interface, ce qui donne l'équation

$$Su_\Gamma = \tilde{f}_\Gamma, \quad (1.29)$$

avec $S = A_{\Gamma\Gamma} - A_{\Gamma 1}A_{11}^{-1}A_{1\Gamma} - A_{\Gamma 2}A_{22}^{-1}A_{2\Gamma}$ la matrice du complément de Schur et $\tilde{f}_\Gamma = f_\Gamma - A_{\Gamma 1}A_{11}^{-1}f_1 - A_{\Gamma 2}A_{22}^{-1}f_2$. En contraste avec l'algorithme de Schwarz, la méthode de Schur introduit un nouveau système, de taille réduite (égal au nombre de degrés de liberté des nœuds d'interface). On peut montrer [30] que cette approche correspond à l'écriture des problèmes sous-domaine par sous-domaine complétée par les conditions de continuité de la fonction recherchée *et de sa dérivée* sur l'interface. La méthode BDD (*Balancing Domain Decomposition*) de Le Tallec et Mandel [51, 20] est la version la plus connue d'une méthode de Schur primale.

Méthode de Schur duale. Supposons maintenant que la variable d'interface soit la dérivée de u sur Γ

$$\frac{\partial u_1}{\partial x}|_\Gamma = \frac{\partial u_2}{\partial x}|_\Gamma = \lambda, \quad (1.30)$$

le système global s'écrit sous forme matricielle

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} A_{11} & A_{1\Gamma} \\ A_{\Gamma 1} & \frac{1}{2}A_{\Gamma\Gamma} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_1|_\Gamma \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} f_1 \\ f_1|_\Gamma + \frac{1}{h}\lambda \end{bmatrix}, \\ \begin{bmatrix} A_{22} & A_{2\Gamma} \\ A_{\Gamma 2} & \frac{1}{2}A_{\Gamma\Gamma} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_2 \\ u_2|_\Gamma \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} f_2 \\ f_2|_\Gamma - \frac{1}{h}\lambda \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

De même que pour la méthode primale, mais sous-domaine par sous-domaine, la condensation à l'interface donne

$$S_1 u_1|_\Gamma = \tilde{f}_1 + \frac{1}{h}\lambda, \quad (1.31)$$

avec $S_1 = \frac{1}{2}A_{\Gamma\Gamma} - A_{\Gamma 1}A_{11}^{-1}A_{1\Gamma}$, $\tilde{f}_1 = f_1|_{\Gamma} - A_{\Gamma 1}A_{11}^{-1}f_1$,

$$S_2 u_2|_{\Gamma} = \tilde{f}_2 - \frac{1}{h}\lambda, \quad (1.32)$$

avec $S_2 = \frac{1}{2}A_{\Gamma\Gamma} - A_{\Gamma 2}A_{22}^{-1}A_{2\Gamma}$, $\tilde{f}_2 = f_2|_{\Gamma} - A_{\Gamma 2}A_{22}^{-1}f_2$. Il reste maintenant à écrire la condition de continuité à l'interface

$$u_1|_{\Gamma} - u_2|_{\Gamma} = 0. \quad (1.33)$$

On a alors

$$u_1|_{\Gamma} - u_2|_{\Gamma} = 0 = S_1^{-1}(\tilde{f}_1 + \frac{1}{h}\lambda) - S_2^{-1}(\tilde{f}_2 - \frac{1}{h}\lambda).$$

Après factorisation, nous obtenons le problème d'interface de la méthode de Schur duale, d'inconnue λ

$$(S_1^{-1} + S_2^{-1})\lambda = -hS_1^{-1}\tilde{f}_1 + hS_2^{-1}\tilde{f}_2. \quad (1.34)$$

Méthode FETI. La méthode FETI (*Finite Element Tearing and Interconnecting*) de Farhat et Roux [28, 56, 27, 72] est une méthode de type complément de Schur dual, mais avec deux ingrédients supplémentaires. Le premier élément est l'ajout d'un problème grille grossière naturel. Les sous-domaines ne possédant que des conditions d'interface de type Neumann voient leurs solutions définies à un mouvement de solide rigide près. Ces constantes libres peuvent donc astucieusement être utilisées pour former un problème grille grossière. Le deuxième élément concerne le préconditionnement. On peut en effet montrer que pour le préconditionneur $\frac{1}{2}S_1\frac{1}{2} + \frac{1}{2}S_2\frac{1}{2}$ la convergence de la méthode est indépendante de la taille du maillage (convergence en $O(1)$).

2.1.3 Préconditionneur “grille grossière”

Les méthodes de décomposition de domaine, pour le type de problème présenté dans cette sous-section, voient leurs vitesses de convergence décroître avec le nombre de sous-domaines. La transmission de l'information entre les sous-domaines étant locale, il est nécessaire d'itérer afin que qu'une condition imposée sur un bord soit prise en compte par les sous-domaines distants. Afin de propager l'information rapidement entre tous les sous-domaines, le concept de “grille grossière” s'est imposé, mais le calcul en diffère selon les méthodes et les auteurs [78]. Une façon simple de construire ce problème est de définir une grille grossière (ensemble de points ou de nœuds) et de considérer la discrétisation initiale du problème comme constituant une grille fine. On définit alors les opérateurs de restriction R qui à un champs u_f , défini sur la grille fine, associe u_g , défini sur la grille grossière, et d'extension E . Pour chaque itération, on calcule alors

- le résidu $r_f = f - Au_f$,
- sa restriction sur la grille grossière $r_g = Rr_f$,
- la résolution de l'équation discrétisée sur la grille grossière $u_g = A_g^{-1}r_g$,
- la correction de la solution sur la grille fine $u_f = u_f + Eu_g$,

avec $A_g = RAE$ la matrice du problème discrétisé sur la grille grossière. On montre alors [78] que le conditionnement du système préconditionné par la méthode de Schwarz additif avec grille grossière est majoré par

$$C \left(1 + \frac{H}{\delta} \right), \quad (1.35)$$

avec C une constante indépendante de la taille des sous-domaines H et du paramètre de recouvrement δ .

Nous avons déjà remarqué que pour la méthode FETI un problème grille grossière naturel est défini à l'aide des degrés de libertés rigides. On peut montrer [55, 54] que le conditionnement du problème FETI ou BDD avec grille grossière est majoré par

$$C \left(1 + \log^2 \left(\frac{H}{h} \right) \right), \quad (1.36)$$

avec C une constante indépendante de la taille des domaines H et du paramètre de discrétisation h .

2.1.4 Discussion

Cette brève présentation des méthodes de décomposition de domaine en milieu continu concerne la résolution d'équations linéaires (possiblement incluses dans une boucle de résolution itérative de type Newton). Les différents algorithmes, regroupés en deux familles de méthodes (méthodes de Schwarz et méthodes de complément de Schur) ont été et sont encore l'objet d'une recherche intense. On constate que ces approches ne s'opposent pas aux autres méthodes numériques, mais que le cadre décomposition de domaine permet de combiner de façon cohérente les méthodes itératives de type Krylov (et notamment la méthode du gradient conjugué préconditionné) et les algorithmes multi-grilles.

Dans le cas de la méthode NSCD, nous allons voir que les choses se présentent différemment, car le problème à résoudre est fondamentalement non-linéaire et l'échelle de "discrétisation" est imposée par la géométrie des éléments discrets constituant l'échantillon. L'approche décomposition de domaine doit donc être repensée, bien que des parallèles avec les méthodes de complément de Schur dual (sous-section suivante) et de Schwarz additif (CHAP.2 SECT.3) peuvent être mis en lumière.

2.2 Décomposition de domaine dans le cadre NSCD

Les méthodes de décomposition de domaines doivent être repensées lorsque l'on considère la simulation de milieux discrets par la méthode NSCD. Les caractéristiques distinctives de cette méthode (e.g. par rapport à la méthode des Éléments Finis) ayant un impact sur la stratégie DDM à adopter sont :

- l'absence de maillage : position des corps et des contacts fortement évolutive au cours d'une simulation,

- la présence de non-régularités diffuses (interactions non régulières présentes sur l'ensemble de l'échantillon),
- la non-unicité (dans le cas général) de la solution du problème NSCD,
- un solveur de contact itératif.

2.2.1 Partitionnement en sous-domaines

Du fait de l'absence de maillage, le partitionnement en sous-domaines d'une collection d'éléments discrets consiste, à chaque pas de temps ou à une fréquence donnée, à décomposer le graphe constitué de corps (nœuds) et d'interactions (segments) en sous-graphes. Deux méthodes de partitionnement de ce graphe corps/interactions sont envisagées ici. On définit tout d'abord une grille de partitionnement fixée arbitrairement par l'utilisateur. Cette grille forme un domaine spatial fictif Ω tel que, pour N_{sd} sous-domaines,

$$\Omega = \Omega_1 \cup \dots \cup \Omega_E \cup \dots \cup \Omega_{N_{sd}}, \quad (1.37)$$

sans recouvrement entre les sous-domaines spatiaux fictifs,

$$\Omega_1 \cap \dots \cap \Omega_E \cap \dots \cap \Omega_{N_{sd}} = \emptyset. \quad (1.38)$$

Partitionnement primal. Une première approche consiste à répartir les corps dans les sous-domaines : les corps dont le centre de gravité appartient à Ω_E seront nommés corps internes au sous-domaine E . Une interaction entre corps sera :

- interne, si le *candidat* et l'*antagoniste* appartiennent à un même sous-domaine,
- d'interface, si le *candidat* et l'*antagoniste* n'appartiennent pas au même sous-domaine.

Ainsi, l'interface entre sous-domaines peut être définie par l'ensemble des interactions (non régulières) dont le *candidat* et l'*antagoniste* n'appartiennent pas au même sous-domaine (FIG.1.11(a)).

Partitionnement dual. L'approche duale de cette dernière consiste à répartir les interactions dans les différents sous-domaines. Pour ce faire, on prend le point milieu du segment joignant les centres de gravité des corps *candidat* et *antagoniste*. Les interactions dont ce point appartient à Ω_E seront nommées interactions internes au sous-domaine E . L'interface entre sous-domaines se trouve alors être constituée de corps (FIG.1.11(b)). Le nombre de sous-domaines dans lesquels un corps $\mathcal{S}_i$ supporte des contacts est appelé son nombre de *multiplicité*, noté m_i .

Les deux sections ci-dessous présentent deux algorithmes de décomposition de domaine basés respectivement sur la méthode de partitionnement primale et duale. On prendra par la suite les notations présentées tableau 1.1.

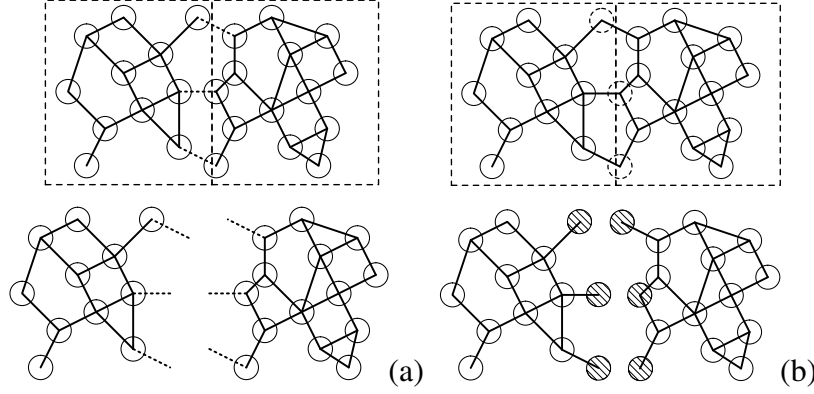


FIGURE 1.11 – Partitionnement en sous-domaines primal (a) et dual (b) [33, 41]

N_S	Nombre de corps de la simulation
N_c	Nombre de contacts de la simulation
N_{sd}	Nombre de sous-domaines
E	Indice d'un sous-domaine
N_E^S	Nombre de corps du sous-domaine E
N_E^c	Nombre de contacts du sous-domaine E
Γ	Indice de l'interface globale

TABLE 1.1 – Notations relative à l'échantillon complet et sous-structuré

2.2.2 Sous-structuration algébrique associée au partitionnement primal

La répartition des interactions en contacts internes et contacts d'interface, définie par le partitionnement primal, conduit au rangement des inconnues de contact,

$$\begin{aligned} r &= [r_1, \dots, r_E, \dots, r_{N_{sd}}, r_\Gamma], \\ v &= [v_1, \dots, v_E, \dots, v_{N_{sd}}, v_\Gamma]. \end{aligned}$$

On montre alors [33] (pour $N_{sd} = 2$), que la dynamique condensée au contact (1.14) prend la forme,

$$\left\{ \begin{array}{l} \begin{bmatrix} W_{11} & 0 & W_{1\Gamma} \\ 0 & W_{22} & W_{2\Gamma} \\ W_{\Gamma 1} & W_{\Gamma 2} & W_{\Gamma\Gamma} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} r_1 \\ r_2 \\ r_\Gamma \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_\Gamma \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} v_E^d \\ v_{E'}^d \\ v_\Gamma^d \end{bmatrix}, \\ \mathcal{R}(v, r) = 0. \end{array} \right. \quad (1.39)$$

L'itération $k + 1$ de l'algorithme NLGS ainsi formulé est composée du traitement des sous-domaines 1 et 2, prenant en compte les valeurs de r_Γ^k , puis la résolution des impulsions de contacts d'interface r_Γ^{k+1} connaissant r_1^{k+1} et r_2^{k+1} .

Les échanges nécessaires entre les différents processeurs sont donc :

- l'envoi par chaque processeur, associé à un sous-domaine d'indice E du vecteur $W_{\Gamma E}^{k+1}$ sur le processeur associé à l'interface Γ .
- l'envoi par le processeur associé à l'interface Γ du vecteur $W_{E\Gamma}^{k+1}$ à chaque sous-domaine E .

Dans cette approche, l'interface apparaît comme un $(n+1)^{ième}$ sous-domaine, constitué de contacts, comme les sous-domaines standards, avec une structure très similaire des équations (et inéquations) à résoudre : dynamique réduite et relations d'interaction. Pour plus de détails, se reporter aux travaux de T.M.P. Hoang [7, 35, 33, 34, 36].

2.2.3 Méthode de type FETI associée au partitionnement dual

La formulation de la méthode DDM présentée ci-dessous a été introduite par D. Iceta [38, 39, 40, 41, 42, 6]. Nous avons cependant été amené à préciser certains concepts (partition d'unité sur les masses, opérateurs de passage par sous-domaines) afin d'introduire les développements du CHAP.2 se rapportant à cette méthode.

L'idée de cette méthode est d'isoler les non régularités à l'intérieur des sous-domaines. Bien que peu intuitif, le partitionnement dual présenté ci-dessus permet en effet de répartir les interactions de contact à l'intérieur des différents sous-domaines. Il est alors possible d'introduire un problème d'interface linéaire. On retrouve la même démarche dans la méthode DDM pour les problèmes multicontact dans [14, 4], ou des structures discrètes réticulées de type tenségrité [5]. Dans l'esprit de la méthode FETI, ce problème d'interface consiste à imposer (à convergence) un saut de vitesse nul des corps d'interface, par l'intermédiaire de variables additionnelles (multiplicateurs de Lagrange). Cette méthode de décomposition de domaine peut être caractérisée de méthode sans recouvrement. En effet, un corps d'interface $\mathcal{S}_i$ est conceptuellement divisé en fonction de son nombre de multiplicité m_i . Dans un cadre élément fini, le maillage de ce corps supportant des contacts dans m_i sous-domaines serait réparti parmi ceux-ci. La modélisation rigide des corps ne permettant pas une telle division géométrique, le caractère non recouvrant de la méthode est alors pris en compte par une partition de l'unité des paramètres d'inertie des corps.

Quantités par sous-domaines. Une fois le partitionnement dual réalisé, les vitesses des corps par sous-domaine sont définies comme,

$$V_E = B_E V, \quad (1.40)$$

avec B_E une matrice booléenne non signée (de taille $pN_E^S \times pN_S$, avec $p = 3 \times (D-1)$ et $D = 2, 3$ selon la dimension du problème) sélectionnant les éléments de V intervenant dans le sous-domaine E . Les impulsions résultantes sur les corps de l'échantillon s'écrivent,

$$R = \sum_{E=1}^{N_{sd}} B_E^T R_E; \quad (1.41)$$

l'impulsion résultante sur un corps $\mathcal{S}_i$, de multiplicité m_i , est la somme des impulsions de contact issues des différents sous-domaines auxquels appartient ce corps. Les vitesses et

impulsions des corps par sous-domaine sont reliées aux inconnues de contacts par,

$$R_E = H_E r_E, \quad (1.42)$$

$$v_E = H_E^T V_E, \quad (1.43)$$

où H_E , r_E et v_E sont les restrictions de H , r et v définies lors du partitionnement en sous-domaine de type dual (FIG.1.11(b)) tel que :

$$r = [r_1, \dots, r_E, \dots, r_{N_{sd}}], \quad (1.44)$$

$$v = [v_1, \dots, v_E, \dots, v_{N_{sd}}]. \quad (1.45)$$

Partition de l'unité. La partition de l'unité sur les paramètres d'inertie des corps est définie (pour des raisons de simplicité), sous la forme :

$$\tilde{M}_E = B_E D M B_E^T, \quad (1.46)$$

avec :

$$D_{kl} = \begin{cases} 0 & \text{si } k \neq l \\ 1/m_i & \text{si } k = l \end{cases}, \quad (1.47)$$

pour les entrées k correspondantes au corps S_i . Concrètement, cette partition de l'unité consiste à équirépartir la masse volumique des corps d'interface dans les sous-domaines où ces corps supportent des contacts.

Recollement d'interface. La dynamique de chaque sous-domaine E (première ligne de l'équation (1.48)) comporte dorénavant un nouveau terme au second membre, issu des efforts exercés par les sous-domaines voisins à travers les grains d'interface. Ces efforts d'interface F_Γ sont en fait des multiplicateurs de Lagrange associés à la condition de recollement des vitesses des corps d'interface constituant la seconde ligne du système (1.48) (avec $A_{\Gamma E}$ une matrice booléenne signée reliant les vitesses généralisées V_E du sous-domaine E aux sauts de vitesse des corps de l'interface globale Γ),

$$\begin{cases} \tilde{M}_E V_E = R_E + R_E^d - A_{\Gamma E}^T F_\Gamma, & E = 1, \dots, N_{sd} \\ \sum_{E=1}^{N_{sd}} A_{\Gamma E} V_E = 0. \end{cases} \quad (1.48)$$

Bien que exprimé formellement comme une somme, le saut de vitesse pour un corps d'interface ne fait intervenir que seuls les sous-domaines interconnectés au travers de ce corps.

On obtient alors une formulation de type FETI du problème (de structure similaire à celle proposée par Dureisseix et Farhat [25] dans le cadre de la mécanique des milieux continus), avec le vecteur des multiplicateurs de Lagrange F_Γ associés aux conditions de sauts d'interface.

Problème d'interface. En exprimant la vitesse des corps par sous-domaines sous la forme,

$$V_E = \tilde{M}_E^{-1} \left(R_E + R_E^d - A_{\Gamma E}^T F_\Gamma \right), \quad (1.49)$$

et en injectant cette expression dans la deuxième ligne de l'équation (1.48), on obtient le problème d'interface linéaire, d'inconnues F_Γ ,

$$X F_\Gamma = \sum_{E=1}^{N_{sd}} A_{\Gamma E} \tilde{M}_E^{-1} \left(R_E + R_E^d \right), \quad (1.50)$$

avec $X = \sum_{E=1}^{N_{sd}} A_{\Gamma E} \tilde{M}_E^{-1} A_{\Gamma E}^T$, l'opérateur d'interface du système.

Système. Pour chaque sous-domaine E , la projection aux contacts des impulsions d'interface F_Γ est notée :

$$v_E^\Gamma = H_E^T \tilde{M}_E^{-1} A_{\Gamma E}^T F_\Gamma. \quad (1.51)$$

L'ensemble des équations d'inconnues $((v_E, r_E)_{E=1, \dots, N_{sd}}, F_\Gamma)$ se répartit en équations par sous-domaines et équations d'interface,

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{W}_E r_E - v_E = -v_E^d + v_E^\Gamma, \\ \mathcal{R}(v_E, r_E) = 0 \end{array} \right\} E = 1, \dots, N_{sd} \quad (1.52)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} X F_\Gamma = \sum_{E=1}^{N_{sd}} A_{\Gamma E} \tilde{M}_E^{-1} \left(R_E + R_E^d \right), \end{array} \right.$$

avec $\tilde{W}_E = H_E^T \tilde{M}_E^{-1} H_E$.

Critères de convergence. En plus des critères de convergence par sous-domaine, portant essentiellement sur la stabilité du réseau de contact, [6] propose le critère de convergence du problème d'interface suivant,

$$Z_i = \sqrt{\frac{(F_\Gamma^k - F_\Gamma^{k+1})^T (F_\Gamma^k - F_\Gamma^{k+1})}{(F_\Gamma^{k+1})^T F_\Gamma^{k+1}}}, \quad (1.53)$$

avec $k, k+1$, deux itérés DDM successifs (Étape 1 + Étape 2, cf. ALG.2). Le critère de convergence de l'algorithme ALG.2 consiste alors dans le respect d'un critère de convergence en volume et du critère de convergence sur l'interface.

Algorithme de résolution des impulsions de contact. L'algorithme ALG.2 synthétise les différentes étapes de calcul des inconnues de contact et d'interface d'un problème NSCD traité avec la méthode de décomposition de domaine de type FETI. Ici n_{GS} est le nombre d'itérations NLGS (fixé par l'utilisateur) par sous-domaines.

Suite aux études réalisées dans [42] nous prendrons par la suite $n_{GS} = 1$ (les itérations NLGS par sous-domaine sans mises à jour des inter-impulsions F_Γ n'accélérant pas significativement la convergence de la méthode).

Algorithm 2 Itérations de la méthode de décomposition de domaine de type FETI

while (critère de convergence non satisfait) **do**

Étape 1 : Résolution par sous-domaine, pour $E = 1, \dots, N_{sd}$

Calcul de $v_E^\Gamma(F_\Gamma)$

Calcul de $\bar{r}_E$ avec n_{GS} itérations de Gauss-Seidel sur :

$$\begin{cases} \tilde{W}_E \bar{r}_E - \bar{v}_E = -v_E^d + v_E^\Gamma \\ \mathcal{R}(\bar{v}_E, \bar{r}_E) = 0 \end{cases}$$

Mise à jour de $r_E \leftarrow \bar{r}_E$

Calcul de $\bar{R}_E$

Étape 2 : Sur l'interface

Calcul de $\bar{F}_\Gamma$:

$$X\bar{F}_\Gamma = \sum_{E=1}^{N_{sd}} A_{\Gamma E} \tilde{M}_E^{-1} (\bar{R}_E + R_E^d)$$

Mise à jour de $F_\Gamma \leftarrow \bar{F}_\Gamma$

end while

2.2.4 Approche de parallélisation du solveur NLGS

D'autres travaux de parallélisation de la méthode NSCD [48] se focalisent sur la parallélisation de l'algorithme de Gauss-Seidel non linéaire (NLGS). L'idée est d'obtenir une formulation de la méthode NSCD en mémoire distribuée sans perturber l'algorithme de résolution des impulsions de contacts. Pour cela les auteurs définissent une base de donnée (relativement complexe) sur les corps, les contacts et les sous-domaines/processeurs de l'échantillon.

La figure 1.12 présente la distribution de la base de donnée d'un domaine multicontact sur trois processeurs. Les corps sont alors affectés d'un *type* : *parent*, *child* ou *dummy*. Pour un processeur E , les corps *parent* sont ceux dont le centre d'inertie appartient à Ω_E ; les corps *child* sont ceux dont une partie du volume appartient à Ω_E mais pas leur centre d'inertie ; enfin les corps *dummy* sont les corps supportant un contact pour lequel un corps *parent* ou *child* est candidat.

De même, les contacts sont typés *interne* ou *externe*. Pour un processeur E , les contacts *internes* sont ceux définis entre des corps *parent* et/ou *child* ; les contacts *externes* sont ceux définis entre corps *dummy* et *parent* ou *child*.

On attribue ensuite une couleur à chaque processeurs afin d'organiser les échanges de messages nécessaires à l'algorithme 1, où certaines inconnues de contact β sont gérées

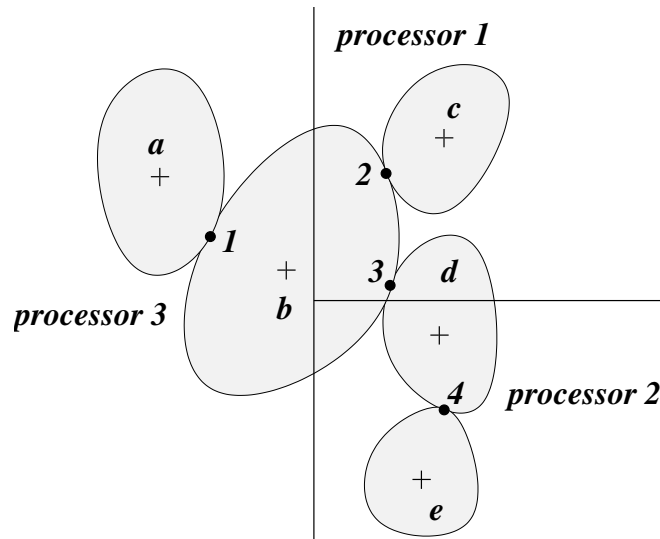


FIGURE 1.12 – Partitionnement d’un domaine multicontact, les corps sont indicés de a à e et les contacts de 1 à 4, d’après Koziara [48].

par des processeurs voisins. Les auteurs proposent de distinguer les contacts en quatre groupes : *Top*, *Bottom*, *Middle* et *Inner*. Les contacts *Top* ne nécessitant de communications qu’avec les processeurs de couleurs inférieures ; *Bottom* ne nécessitant de communications qu’avec les processeurs de couleurs supérieures ; *Middle* nécessitant des communications avec les processeurs de couleurs inférieures et supérieures ; *Inner* ne nécessitant pas de communication.

L’algorithme de Gauss Seidel non linéaire ainsi parallélisé nécessite de nombreux échanges durant les itérations, ce qui est très intrusif, mais permet néanmoins le recouvrement des phases d’échanges de messages par des phases de calculs.

Conclusion

Dans ce chapitre introductif, nous avons indiqué brièvement les idées principales qui guident la modélisation numérique des milieux discrets dans le cadre des méthodes DEM. Basées sur les équations de la dynamique des solides rigides ainsi que sur la modélisation des interactions de type contact entre corps, ces méthodes divergent quant à l’approche explicite ou implicite d’intégration de ces équations ainsi que dans le caractère régularisé ou non des lois de contact. En fonction des phénomènes que le modélisateur souhaite décrire cette panoplie de méthodes ouvre de larges possibilités.

Nous avons ensuite détaillé la méthode NonSmooth Contact Dynamics introduite par J.J. Moreau et M. Jean et développée notamment au Laboratoire de Mécanique et Génie Civil de Montpellier. L’idée principale de cette méthode est de prendre en compte les interactions de contact collectivement au cours d’un pas de temps. Une formulation de la dynamique en termes d’impulsion/vitesse permet alors de prendre en compte des lois de

contact variées (en particulier non régulières) au travers d'un solveur de contact générique Gauss-Seidel Non Linéaire (NLGS).

Cette méthode, quoi que bien adaptée à la simulation de milieux discrets (milieux granulaires, ouvrages maçonnés, milieux fracturés, etc.), nécessite d'être envisagée dans le cadre du calcul parallèle du fait de coûts de calcul très importants pour des simulations réalistes. Les méthodes de décomposition de domaine sont un cadre théorique suffisamment général et souple pour présenter un intérêt de ce point de vue. Cependant, les techniques classiques de décomposition de domaine ne sont pas immédiatement transférables à la méthode NSCD. Les non-régularités diffuses ainsi que le caractère discret du problème génèrent des spécificités d'ordre conceptuel et méthodologique.

Dans le chapitre suivant, nous allons présenter les développements théoriques récents de la méthode de décomposition de domaine de type FETI présentée ci-dessus ainsi qu'une seconde méthode basée, elle aussi, sur le partitionnement dual en sous-domaine.

Chapitre 2

Méthodes NSCDD et Schwarz-NSCD

Dans ce second chapitre, les développements récents de la méthode NSCDD (formulation incrémentale du problème d'interface, traitement des grains de coin), ainsi qu'une tentative d'extension aux solides déformables, sont présentés. Une seconde méthode, proche des méthodes de Schwarz et inspirée des travaux de Breitenkopf et Jean est introduite et comparée à la méthode NSCDD.

Sommaire

1	Développements théoriques de la méthode NSCDD	37
1.1	Convergence d'un problème d'interface de référence	37
1.2	Analyse du problème d'interface NSCDD	40
1.3	Critères de convergence de la méthode NSCDD	47
2	Extension aux solides déformables	48
2.1	Modélisation des corps et type de recollement entre sous-domaines	48
2.2	Dynamique des contacts et co-rotationnel	48
2.3	Algorithme NSCDD en co-rotationnel	50
3	Méthode de décomposition de domaine de type Schwarz additif	52
3.1	Formulation historique	52
3.2	Méthode de Schwarz-NSCD	52
3.3	Analyse d'une itération de Schwarz-NSCD	54
4	Comparaison des méthodes NSCDD et Schwarz-NSCD	55
4.1	Dépôt gravitaire 2D	55
4.2	Cisaillement avec conditions périodiques	56

Introduction

La présentation de la méthode de décomposition de domaine de type FETI (que l'on nommera par la suite NSCDD : "NonSmooth Contact Domain Decomposition") faite au chapitre précédent laisse des questions ouvertes, tant en termes algorithmiques que théoriques. Dans la première section de ce chapitre (SECT.1) nous allons aborder deux points clés, du point de vue théorique, de cette méthode.

D'une part, le problème d'interface NSCDD est envisagé dans le cadre d'une procédure itérative, menant à une formulation incrémentale de ce problème. Afin d'illustrer la façon dont convergent les inter-impulsions d'interface F_T , nous considérerons le cas d'un disque percutant une fondation, en imaginant que ce disque participe à deux sous-domaines ; ce qui permet d'interpréter le problème d'interface comme un problème de point fixe, indépendamment de la dynamique non-régulière agissant (pour un milieu granulaire) dans les sous-domaines.

D'autre part, la structure de l'opérateur d'interface X est étudiée, en particulier lorsque l'échantillon sous-structuré comporte des corps de multiplicité supérieure à 2. La nature rigide des éléments discrets considérés ici implique de repenser le traitement de ces grains de coin. On montre que pour ces corps l'opérateur d'interface est non diagonal mais peut être connu explicitement (en 2D et 3D) si un choix approprié du nombre de liens (multiplicateurs de Lagrange) est effectué.

La seconde section est une tentative d'extension de la méthode NSCDD au cas de collections d'éléments discrets déformables. Plusieurs approches peuvent être envisagées : partitionnement du maillage et mise en œuvre de techniques classiques de décomposition de domaine issues de la mécanique des milieux continus pour chaque corps d'interface, duplication des maillages et conditions de recollement sur les nœuds d'interface, ou encore, et c'est cette dernière possibilité qui est développée d'un point de vue théorique, combinaison d'une approche co-rotationnelle pour décrire la dynamique des corps et recollement des corps d'interface sur leurs seuls degrés de libertés rigides. Cette dernière solution a pour avantage de tirer partie des faibles déformations des corps subissant des mouvements finis en représentant cette dynamique par une cinématique rigide plus une déformation quasi-statique dans le repère principal d'inertie lié à chaque corps. La méthode NSCDD peut alors être employée afin de sous-structurer le problème.

La section 3 introduit une deuxième méthode de décomposition de domaine, sur la base des idées proposées par Breikopf et Jean [16]. En se basant sur le partitionnement dual de l'échantillon proposé au chapitre précédent, on définit une méthode de type Schwarz additif avec recouvrement minimal. Cette méthode ne définit pas de problème d'interface, contrairement à la méthode NSCDD, mais fait intervenir des échanges entre sous-domaines. L'influence des sous-domaines voisins est alors prise en compte par des conditions aux limites additionnelles, de type impulsion.

Afin de comparer les comportements des méthodes NSCDD et Schwarz-NSCD, la section SECT.4 présente les résultats obtenus pour une simulation de dépôt gravitaire 2D, mis en regard de la solution NSCD (mono-domaine).

1 Développements théoriques de la méthode NSCDD

Dans cette section sont présentés les développements récents de la méthode DDM NSCD de type FETI, que l'on nommera par la suite NSCDD (NonSmooth Contact Domain Decomposition).

Formulation incrémentale du problème d'interface

Une simple reformulation de l'équation (1.48) permet d'interpréter le problème d'interface NSCDD comme un problème incrémental d'inconnues F_Γ (les multiplicateurs de Lagrange de type impulsion à l'interface) ayant pour second membre les sauts de vitesse des corps d'interface calculés à l'itération DDM courante.

En effet, à chaque pas de temps, le problème sous-structuré est résolu de façon itérative. Avec les notations de l'algorithme ALG.2 on peut, à l'itération DDM courante, définir l'incrément (ou la correction) d'impulsion d'interface :

$$\Delta F_\Gamma = \bar{F}_\Gamma - F_\Gamma.$$

La substitution du terme $\tilde{M}_E^{-1}(\bar{R}_E + R_E^d)$ dans l'équation (1.50) par son expression tirée de l'équation de la dynamique par sous-domaine (1.48) donne alors, en considérant ces équations dans le cadre du processus itératif défini par l'algorithme ALG.2 :

$$X\bar{F}_\Gamma = \sum_{E=1}^{N_{sd}} A_{\Gamma E} \tilde{M}_E^{-1} (\tilde{M}_E \bar{V}_E + A_{\Gamma E}^T F_\Gamma),$$

soit :

$$X\bar{F}_\Gamma = \sum_{E=1}^{N_{sd}} A_{\Gamma E} \bar{V}_E + X F_\Gamma,$$

d'où la formulation incrémentale du problème d'interface faisant intervenir le saut de vitesse de l'itération courante au membre de droite :

$$X\Delta F_\Gamma = \sum_{E=1}^{N_{sd}} A_{\Gamma E} \bar{V}_E. \quad (2.1)$$

Cette écriture du problème d'interface implique que la boucle DDM converge lorsque l'incrément ΔF_Γ tend vers 0, et donc le saut de vitesse entre les particules réalisant l'interface devient nul (vérification de la deuxième ligne de l'équation (1.48)).

1.1 Convergence d'un problème d'interface de référence

Afin de préciser les propriétés de ce problème d'interface, considérons le cas très simple de la chute d'une particule sur un plan, sous l'effet de son propre poids. La figure FIG.2.1 présente les deux pas de temps considérés ainsi que la solution analytique (obtenue pour un coefficient de restitution $e = 0$, c'est-à-dire un choc inélastique).

Dans le cas d'une sous-structuration de ce problème en deux sous-domaines (partitionnement arbitraire, cf. FIG.2.2), le corps est dupliqué de sorte que seule l'image de ce corps dans le sous-domaine n° 1 est susceptible d'entrer en contact avec le plan fixe. Pour le pas de temps $[t, t + \Delta t]$, avec F_T initialisé à 0, les différentes étapes de résolution sont détaillées dans les 3 paragraphes suivants. On a ici $\tilde{M}_1 = \tilde{M}_2 = M/2$, $X = 4/M$, $R_1^d = R_2^d = R^d/2$.

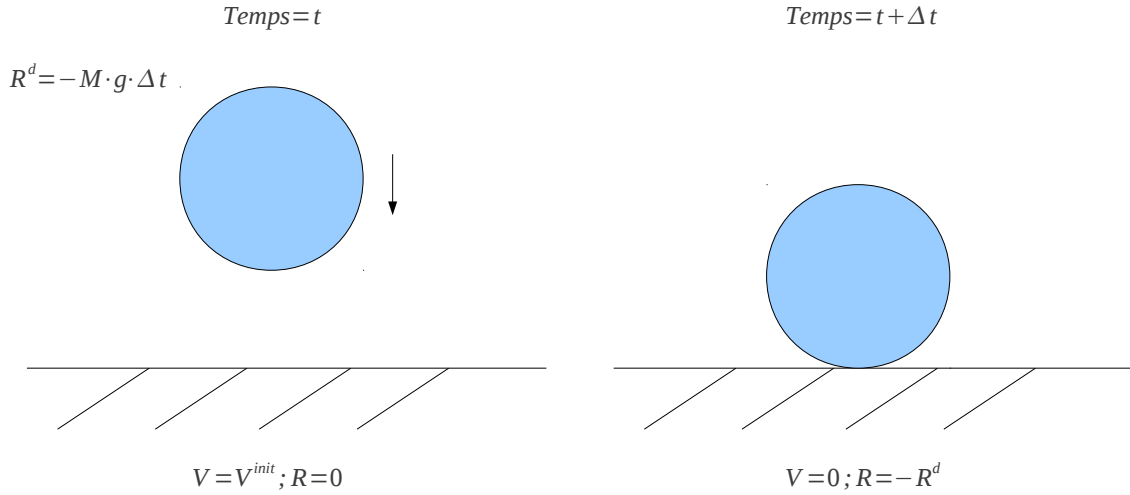


FIGURE 2.1 – “Bouncing ball” : modélisation et solution exacte du problème

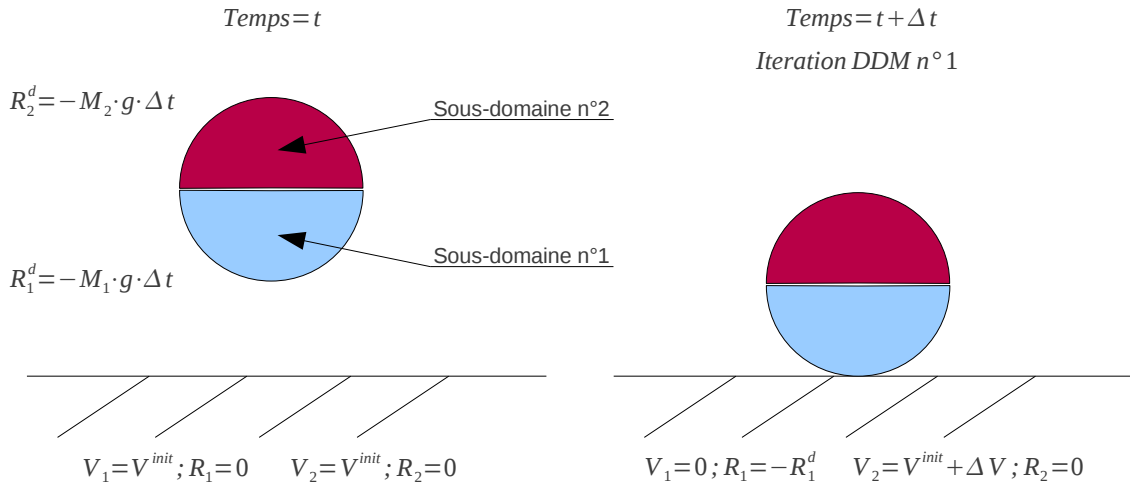


FIGURE 2.2 – “Bouncing ball” : Modélisation et solution sous-structurée

Itération DDM n° 1

- Sous-domaine n° 1 :

$$\tilde{M}_1 \bar{V}_1 = \bar{R}_1 + R_1^d.$$

De plus, comme $e = 0$ et Δt est choisi de sorte que la particule arrive en contact avec le plan fixe en $t + \Delta t$, on a

$$\bar{V}_1 = 0.$$

- Sous-domaine n° 2 :

$$\tilde{M}_2 \bar{V}_2 = \bar{R}_2 + R_2^d,$$

or, comme la particule ne supporte aucun contact, on a

$$\bar{R}_2 = 0.$$

- Problème d'interface :

$$X \Delta F_\Gamma = \bar{V}_2 - \bar{V}_1.$$

Itération DDM n° 2

- Sous-domaine n° 1 :

$$\tilde{M}_1 \bar{V}_1 - F_\Gamma = \bar{R}_1 + R_1^d, \quad \bar{V}_1 = 0$$

- Sous-domaine n° 2 :

$$\tilde{M}_2 \bar{V}_2 + F_\Gamma = \bar{R}_2 + R_2^d, \quad \bar{R}_2 = 0.$$

- Problème d'interface :

$$\begin{aligned} X \Delta F_\Gamma &= \bar{V}_2 - \bar{V}_1 \\ &= \frac{1}{\tilde{M}_2} (R_2^d - F_\Gamma), \end{aligned}$$

soit :

$$\boxed{\begin{aligned} \frac{4}{M} (\bar{F}_\Gamma - F_\Gamma) &= \frac{2}{M} \cdot (R_2^d - F_\Gamma), \\ \Delta F_\Gamma &= \frac{1}{2} \cdot (R_2^d - F_\Gamma), \end{aligned}}$$

et finalement :

$$\bar{F}_\Gamma = \frac{1}{2} (R_2^d + F_\Gamma). \quad (2.2)$$

Solution sous-structurée Dans ce cas très simple, on connaît la solution analytique du problème d'interface. Celui-ci est en effet résumé par une suite convergente ayant pour point fixe :

$$F_\Gamma^\infty = R_i^d = \frac{1}{2} \cdot R^d. \quad (2.3)$$

Ce qui donne la solution $s = (V_1, R_1, V_2, R_2, F_\Gamma)$ suivante, à convergence de la boucle DDM :

$$\boxed{V_1 = 0 \quad ; \quad R_1 = -2 \cdot R_1^d \quad ; \quad V_2 = 0 \quad ; \quad R_2 = 0 \quad ; \quad F_\Gamma = R_2^d.} \quad (2.4)$$

La solution bi domaines est donc, à convergence, égale à la solution mono-domaine. De plus, la convergence du problème d'interface suit une loi puissance vis-à-vis du nombre d'itérations de la boucle DDM (Figure 2.3).

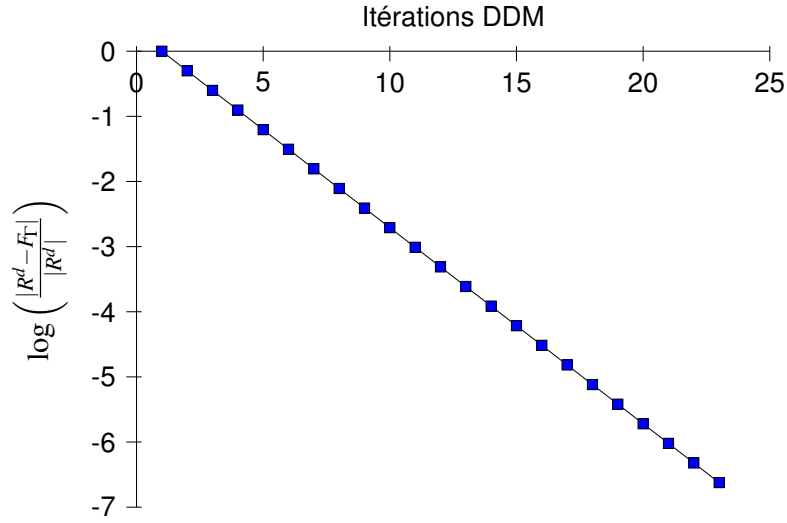


FIGURE 2.3 – Convergence de la solution du problème d'interface de référence

1.2 Analyse du problème d'interface NSCDD

La figure FIG.2.4 présente un échantillon (2D) de particules positionnées dans une boîte rectangulaire dont les parois sont constituées de clusters de disques. Une distribution des contacts en neuf sous-domaines (découpage en 3 intervalles du domaine suivant x et suivant y) est mise en œuvre dans la plateforme de calcul LMGC90. La figure FIG.2.4 permet alors de visualiser les particules d'interface (multiplicité supérieure à deux) et en particulier celles ayant une multiplicité égale à 3 ou 4.

1.2.1 Corps internes, de face et de coin

Pour les systèmes discrets, l'interface globale Γ est constituée des sauts de vitesses des corps supportant des contacts dans plus d'un sous-domaine. Le nombre de sous-domaines auquel un corps $\mathcal{S}_i$ est connecté et appelé sa multiplicité m_i . Comme pour les méthodes de décomposition de domaine classiques on a $m = \sum_E B_E^T B_E$ (B_E étant l'opérateur de passage des quantités globales aux quantités du sous-domaine E) la matrice diagonale dont les valeurs sont m_i pour les entrées correspondant au corps $\mathcal{S}_i$. En fonction de leur multiplicité,

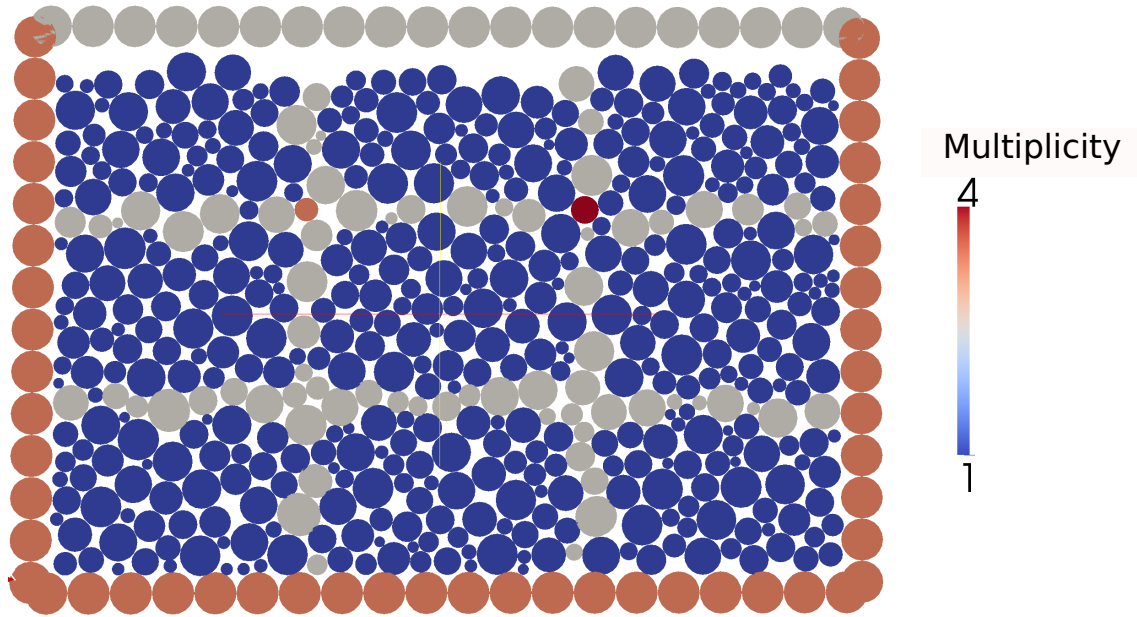


FIGURE 2.4 – Multiplicité des particules d'un échantillon de disques répartis en 9 sous-domaines

les corps sont nommés “corps internes” si $m_i = 1$ (autrement, il seront nommés “corps d’interface”), “corps de face” si $m_i = 2$ et “corps de coin” si $m_i > 2$. Contrairement au cas des milieux continus où nœuds de face, d’arête et de coin sont à distinguer (en 3D), les systèmes discrets considérés n’introduisent pas de distinction topologique entre corps d’arête et corps de coin.

1.2.2 Traitement des grains de coins

Les corps de coin sont formellement divisés en m_i parties (en pratique, seule la masse volumique est divisée et non la géométrie de la particule) et des liens sont introduits afin d’assurer le recollement de ces différentes parties (les impulsions associées à ces conditions de recollement sont alors stockées dans F_Γ). Un nombre suffisant de conditions de recollement doivent être définies pour chaque corps d’interface (face ou coin) afin de retrouver la solution du problème de référence (mono-domaine). Les différentes possibilités sont :

- ne pas considérer de conditions de recollement pour les corps de coin. Cette solution peut être mise en œuvre dans différentes méthodes de décomposition de domaine appliquées aux milieux continus, lorsque les champs d’interface sont définis sur les arêtes des éléments finis et non sur leurs nœuds [24, 15], car les nœuds de coin sont alors de mesure nulle. Dans le cas d’éléments discrets, considérés ici, cette option n’est pas envisageable car la continuité du champ solution ne sera pas assuré sur ces corps ;

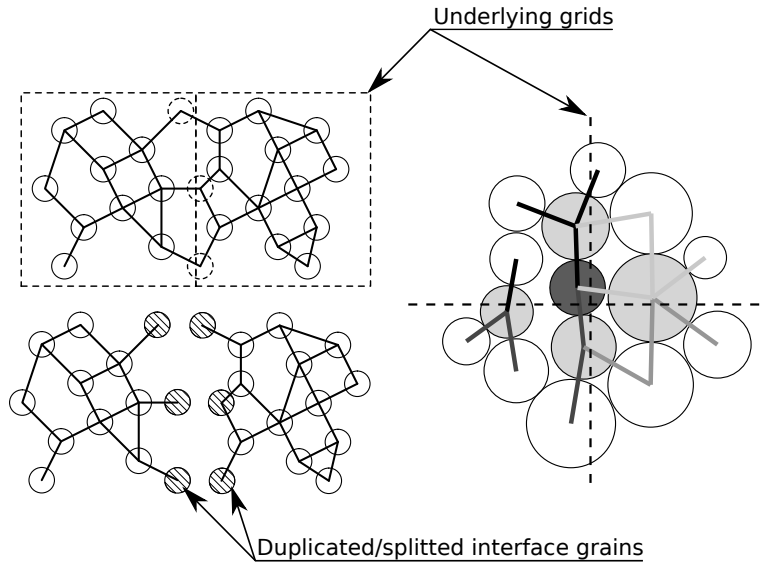


FIGURE 2.5 – Exemples de partitionnement en sous-domaines

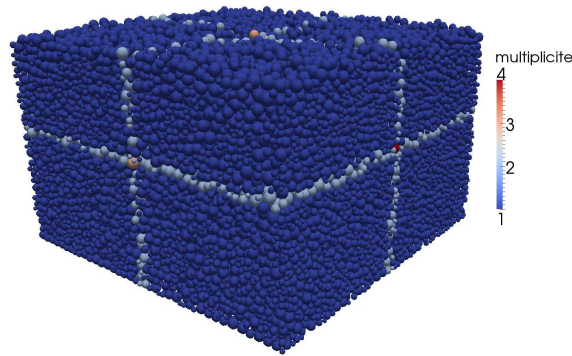


FIGURE 2.6 – Multiplicité des corps - échantillon de 55 000 sphères

- définir autant de conditions de recollement que le nombre de multiplicité du corps de coin considéré : $n_l^i = m_i$. Dans ce cas, les conditions de recollement sont légèrement sur-contraintes (seulement $m_i - 1$ liens suffisent à recoller m_i parties) ;
- considérer un nombre de liens plus important encore, comme cela est par exemple le cas pour les conditions de coins redondantes des méthodes FETI [71], le nombre maximal de liens indépendants permettant de relier m_i parties d'un corps étant $\frac{1}{2}m_i(m_i - 1)$.

Afin d'éviter que l'opérateur d'interface X ne soit singulier, pour permettre différentes procédures de résolution du problème d'interface, nous choisissons ici de considérer le nombre nécessaire et suffisant de conditions de recollement des corps de coin, c'est-à-dire $m_i - 1$ conditions seulement.

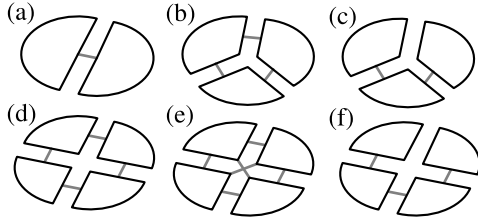


FIGURE 2.7 – Conditions de recollement des corps d’interface. (a) $m_i = 2$ et $n_l^i = m_i - 1 = 1$; (b) $m_i = 3$ et $n_l^i = m_i = \frac{1}{2}m_i(m_i - 1) = 3$; (c) $m_i = 3$ et $n_l^i = m_i - 1 = 2$; (d) $m_i = 4$ et $n_l^i = m_i$; (e) $m_i = 4$ et $n_l^i = \frac{1}{2}m_i(m_i - 1) = 6$; (f) $m_i = 4$ et $n_l^i = m_i - 1 = 3$. (Par simplicité, les corps ont été divisés géométriquement sur cette figure même si cette répartition se traduit par une partition de l’unité sur la masse volumique des différentes parties et non sur la géométrie des contacteurs des corps.)

1.2.3 Analyse de l’opérateur d’interface X

Les corps internes ($m_i = 1$) n’ont évidemment pas de contribution sur X . Lorsque seuls des corps de face sont à considérer ($m_i = 2$), il a été montré [6] que l’opérateur X est diagonal par bloc, c’est-à-dire que la résolution du problème d’interface pour chaque corps est découplée de celle des autres corps de l’échantillon et chaque bloc est au plus de taille (b, b) , où b est le nombre de degré de liberté pour chaque corps : $b = 3(D - 1)$ pour des corps rigides où $D = 2, 3$ est la dimension de l’espace physique considéré. Une des spécificité de la dynamique des corps rigides est : le problème d’interface ne condense pas d’information associée à la structure interne des sous-domaines. De plus, chaque bloc de X peut être diagonal si la matrice de masse généralisée M_i est exprimée dans le repère principal d’inertie du corps S_i . Dans ce cas résoudre le problème d’interface est immédiat. Les grains de coin modifient cependant la structure de cet opérateur d’interface. Bien qu’encore diagonal par bloc, chaque bloc (de taille $(n_l^i b, n_l^i b)$) associé au corps S_i relie les liens assurant le recollement des parties du corps.

Considérons la contribution du corps de coin S_i provenant des différents sous-domaines partageant ce corps ; celle-ci correspond à une matrice bloc de X définie par :

$$X_i = \sum_{E=1}^{N_{sd}} A_{\Gamma E}^i (\tilde{M}_E^i)^{-1} (A_{\Gamma E}^i)^T. \quad (2.5)$$

Comme les liens d’interface F_Γ sont définis uniquement entre parties d’un même grain de coin, le bloc X_i est entièrement découplé de tous les autres blocs de X . $\tilde{M}_E^i$ est la matrice de masse de la partie du corps S_i situé dans le sous-domaine E . Comme $\tilde{M}_E^i$ est symétrique définie positive et que la partition de l’unité choisie (cf. équation (1.46)) implique que $\tilde{M}_E^i = \tilde{M}_{E'}^i$ quels que soient les sous-domaines (E, E') interconnectés par l’intermédiaire du corps S_i , on peut omettre de considérer cette matrice dans la suite de notre analyse sans modifier la structure de l’opérateur d’interface X . De plus, les entrées

des matrices décrites dans cette sous-section correspondent à des blocs de taille (b, b) , c'est-à-dire l'ensemble des composantes cinématiques ou sthéniques d'un corps.

En posant une règle de construction arbitraire sur les signes de $A_{\Gamma E}^i$, et pour $n_l^i = m_i - 1$ liens de recollement, ce qui forme un graphe cyclique ouvert, le bloc X_i est une permutation du motif suivant :

$$X_i = \begin{bmatrix} 2 & -1 & & \\ -1 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & 2 & -1 \\ & & -1 & 2 \end{bmatrix}, \quad (2.6)$$

ce qui forme un bloc matriciel inversible. L'ajout d'un lien supplémentaire complète alors la connectivité des liens pour former une boucle, introduisant un sous bloc dans X_i avec pour motif

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 2 & -1 & & 1 \\ -1 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & 2 & -1 \\ & & -1 & 2 \\ \hline 1 & & & 2 \end{array} \right], \quad (2.7)$$

ce qui constitue alors une matrice singulière (la dernière ligne étant la somme de toutes les autres). Comme ceci est un mineur de X_i , cette dernière matrice sera singulière dès que $n_l^i > m_i - 1$.

Choix effectué pour la méthode NSCDD Le choix effectué pour le reste du manuscrit consiste à imposer $n_l^i = m_i - 1$ de façon systématique ainsi qu'une convention de signe (cf. paragraphe suivant pour plus de détails) fixée de sorte à retrouver le motif (2.6). Cette approche est générale car valable pour $D = 2, 3$ et indépendante de la géométrie des corps considérés. De plus, l'inversion des blocs X_i peut être effectuée une fois pour toute de façon analytique pour des valeurs de multiplicité raisonnables ($m_i < 9$ en pratique). Pour $m_i \geq 9$, l'appel à un solveur linéaire direct permet de faire cette inversion à la volée.

Le problème d'interface NSCDD est donc effectué :

- corps par corps, de façon indépendante ;
- dans le cas $m_i < 9$, le calcul $\Delta F_\Gamma = X_i^{-1} \sum_E A_{E\Gamma} \bar{V}_E$ se réduit à un produit matrice/vecteur par bloc et est environ 100 fois plus rapide que la résolution du système linéaire $X_i \Delta F_\Gamma = \sum_E A_{E\Gamma} \bar{V}_E$ par un algorithme de type Cholesky (de ce fait mis en œuvre uniquement dans le cas $m_i \geq 9$).

Exemple d'un corps de multiplicité 4 Dans ce paragraphe, nous allons montrer comment obtenir les résultats présentés de façon générale dans la sous-section précédente.

Imaginons une collection de cinq particules figure FIG.2.8 ayant en son centre un corps de multiplicité égale à 4. Plusieurs possibilités de liens entre les particules sont

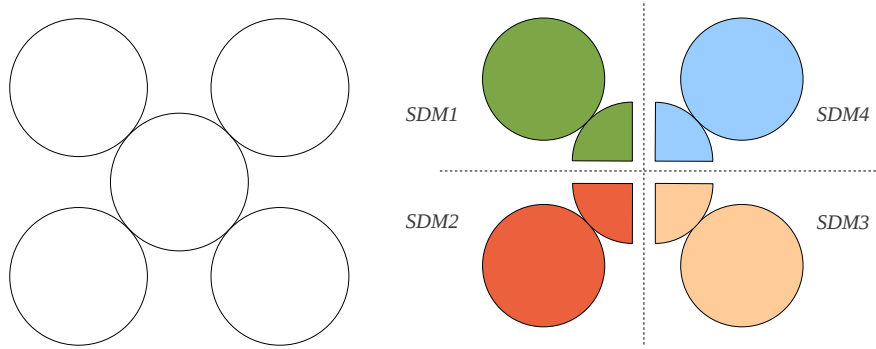


FIGURE 2.8 – Motif et sous-domaines considérés

alors possibles. Nous proposons d'étudier les combinaisons schématisées figure FIG.2.9. Chaque lien représente (en 2D) au maximum trois équations de recollement (deux translations et une rotation). Par simplicité on ne prendra en compte par la suite que les degrés de liberté de translation.

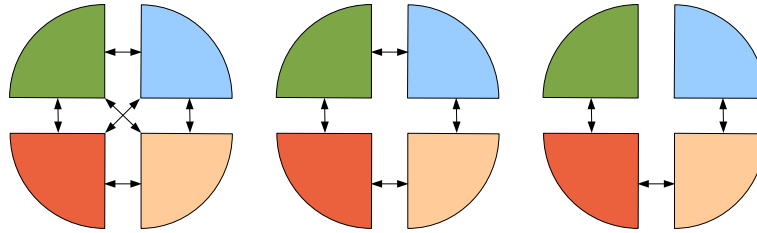


FIGURE 2.9 – Connectivités envisagées

Dans le cas d'une connectivité définie par quatre liens (image centrale), les matrices de passage des champs d'un sous-domaine sur l'interface sont construites telles que :

$$\sum_{E=1}^{N_{sd}} A_{\Gamma E} \bar{V}_E = \begin{bmatrix} (\bar{V}_1 - \bar{V}_2) \cdot x \\ (\bar{V}_1 - \bar{V}_2) \cdot y \\ (\bar{V}_2 - \bar{V}_3) \cdot x \\ (\bar{V}_2 - \bar{V}_3) \cdot y \\ (\bar{V}_3 - \bar{V}_4) \cdot x \\ (\bar{V}_3 - \bar{V}_4) \cdot y \\ (\bar{V}_1 - \bar{V}_4) \cdot x \\ (\bar{V}_1 - \bar{V}_4) \cdot y \end{bmatrix}.$$

On a alors :

$$A_{\Gamma 1} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad A_{\Gamma 2} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

$$A_{\Gamma 3} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad A_{\Gamma 4} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}.$$

Ce qui donne la matrice X :

$$X = mM^{-1} \begin{bmatrix} 2 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 2 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 2 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 2 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 2 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 2 \end{bmatrix},$$

avec m la multiplicité de la particule centrale et M sa masse totale.

Pour une connectivité définie par trois liens d'interface (FIG.2.9 à droite), chaque lien représentant le saut de vitesse généralisé entre deux représentants de la particule, on obtient :

$$A_{1\Gamma} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad A_{2\Gamma} = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \\ 0 & 0 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad A_{3\Gamma} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ -1 & 0 \\ 0 & -1 \\ 0 & 0 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad A_{4\Gamma} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ -1 & 0 \\ 0 & -1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

La matrice de masse généralisée étant supposée écrite dans le repère principal d'inertie de la particule, la matrice X est :

$$X = mM^{-1} \cdot \begin{bmatrix} 2 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 2 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 2 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 2 \end{bmatrix}.$$

Le phénomène de perte du caractère diagonal de la matrice X est valable dans tous les cas où au moins une particule possède une multiplicité supérieure à deux, y compris si le nombre de liens pris en compte n'entraîne pas de surdétermination. Dans le cas de l'exemple ci-dessus, la prise en compte de trois liens (schéma de droite de la figure 2.9) donne une matrice X non-diagonale mais inversible. Pour le cas à six liens (schéma de gauche de la figure 2.9), le phénomène de surdétermination est accentué.

1.3 Critères de convergence de la méthode NSCDD

De façon classique, l'évaluation du recollement d'interface est écrite sous la forme (critère sur la stabilité du réseau des inter-efforts) :

$$Z_\Gamma = \sqrt{\frac{\Delta F_\Gamma^T \Delta F_\Gamma}{\bar{F}_\Gamma^T \bar{F}_\Gamma}} \leq \varsigma, \quad (2.8)$$

avec $\bar{F}_\Gamma$ le vecteur des multiplicateurs de Lagrange calculé à la dernière itération NSCDD et ς une tolérance fixée par l'utilisateur. Cependant, comme $\bar{F}_\Gamma$ regroupe les inter-efforts et inter-moments, il semble plus cohérent de prendre en compte séparément les termes d'efforts et les termes de moments.

Il est possible de lever cette dernière ambiguïté en exprimant un critère de recollement en énergie cinétique,

$$\Delta I_\Gamma = \frac{\frac{1}{2} \left(\sum_{E=1}^{N_{sd}} A_{\Gamma E} V_E \right)^T \tilde{M}_E \left(\sum_{E=1}^{N_{sd}} A_{\Gamma E} V_E \right)}{n_l^\Gamma} \leq \zeta, \quad (2.9)$$

qui exprime que la moyenne (sur les n_l^Γ liens d'interface) des erreurs en énergie cinétique doit être inférieure à une fraction de l'énergie cinétique de référence. Dans le cas des milieux granulaires, une définition classique de cette référence est le nombre d'inertie caractérisant le régime d'écoulement du matériau granulaire [31].

De façon duale on peut écrire l'erreur de recollement (normalisée) en énergie complémentaire,

$$\Delta J_\Gamma = \sqrt{\frac{\Delta F_\Gamma^T \tilde{M}_E^{-1} \Delta F_\Gamma}{\bar{F}_\Gamma^T \tilde{M}_E^{-1} \bar{F}_\Gamma}} \leq \varsigma. \quad (2.10)$$

2 Extension aux solides déformables

Afin d'étendre l'approche de décomposition de domaine en dynamique des contacts au cas des solides déformables, nous présentons ci-dessous une tentative basée sur le formalisme co-rotationnel, mettant en jeu des solides soumis à de grands déplacements et de petites déformations.

2.1 Modélisation des corps et type de recollement entre sous-domaines

Considérant une modélisation de type HPP ou grandes déformations d'un milieu granulaire en présence de particules déformables, deux stratégies de décomposition de domaine peuvent être envisagées :

- partitionnement du maillage des corps d'interface : le recollement entre les parties de ces corps s'effectue alors sur les nœuds d'interface par des techniques classiques du type FETI [26], BDD [53] ou AS ("Additive Schwarz", [29]).
- duplication des corps d'interface (maillage complet) : on impose alors que la vitesse de l'ensemble des nœuds des deux maillages soient identiques. Une partition algébrique de la masse volumique est alors nécessaire pour assurer la cohérence de l'algorithme.

Dans le cas des milieux granulaires, une modélisation alternative est fournie par les approches de type co-rotationnel ou "floating frame". Celles-ci consistent à tenir compte du fait qu'un corps subissant de grands déplacements et de petites déformations peut être modélisé par un corps rigide en mouvement plus un solide se déformant par rapport au repère principal d'inertie du corps rigide. Cette vision semble prometteuse pour la modélisation de milieux granulaires, comportant des rotations finies des corps et des déformations localisées aux contacts. De plus, cette modélisation permet d'aborder la parallélisation des milieux granulaires comportant des corps élastiques via la méthode NSCDD.

2.2 Dynamique des contacts et co-rotationnel

L'approche co-rotationnelle consiste à décomposer le champ de vitesse des solides déformables en une partie rigide V_s , prenant en compte les possibles grands mouvements du solide et une partie déformable V_e , afin de maintenir une résolution type éléments finis dans le domaine des petites perturbations pour le calcul de cette dernière composante de la vitesse des corps.

Le champ de vitesse complet s'écrit :

$$V = R_s V_s + V_e, \quad (2.11)$$

où R_s est un opérateur de prolongation de la cinématique du solide rigide sur les nœuds du maillage. L'expression des degrés de liberté dans le repère d'inertie du solide permet d'obtenir des matrices de masse M et de rigidités K constantes.

La mécanique non régulière s'écrit :

$$MV + R_{int} - R = R^d, \quad (2.12)$$

avec l'impulsion due aux efforts intérieurs :

$$R_{int} = \int_{t_i}^{t_{i+1}} KU dt. \quad (2.13)$$

La formulation co-rotationnelle du problème de contact est la suivante : au pas de temps courant, trouver le couple (V, r) vérifiant, dans l'ordre :

- la dynamique réduite et les conditions de contact :

$$\begin{cases} \tilde{W}r - v = -\tilde{v}^d \\ \mathcal{R}(v, r) = 0 \end{cases}, \quad (2.14)$$

avec :

$$v = H^T(R_s V_s + V_e) \quad \text{et} \quad R = Hr, \quad \bar{R} = R_s^T Hr; \quad (2.15)$$

- la dynamique associée à la partie rigidifiante du mouvement des particules :

$$R_s^T(MR_s V_s + MV_e + R_{int} - R) = R_s^T R^d \quad (2.16)$$

$$\bar{M}V_s + R_s^T R_{int} + R_s^T MV_e - \bar{R} = \bar{R}^d \quad (2.17)$$

où $\bar{M} = R_s^T M R_s$, $\bar{R} = R_s^T R$ l'opérateur d'inertie classique de la partie rigide, et $\bar{R}^d = R_s^T R^d$.

Avec une matrice de rigidité constante, un terme de couplage devient

$$R_s^T R_{int} = R_s^T K \int_{t_i}^{t_{i+1}} U dt = 0$$

car $KR_s = 0$, et, afin d'assurer l'unicité de la solution à deux échelles, nous choisissons la condition d'orthogonalité entre les deux espaces : $R_s^T MV_e = 0$ ce qui supprime le second terme de couplage de (2.17), qui est dès lors identique à la dynamique de solides rigides ;

- la dynamique associée à la partie déformable du champs de vitesse des solides : cette dernière étape consiste à relier le déplacement U au champs de vitesse V . Une possibilité est de l'obtenir de deux sources : $U = U_s + U_e$, où U_s est un déplacement fini de solide rigide (permettant la mise à jour des rotations finies et du repère principal d'inertie), et U_e la composante complémentaire. U_s peut être obtenu à l'aide du schéma de Hughes-Winget [37] ou de la formule de Rodrigues alors que U_e peut être déterminé par un schéma d'intégration du type θ -méthode. Négligeant le résidu KU_s^- par la suite, les impulsions internes sont

$$R_{int} = hKU_e^- + h\theta[h(1 - \theta)KV_e^- + h\theta KV_e]$$

où le pas de temps est $h = t_{i+1} - t_i$. La dynamique est alors :

$$\hat{M}V_e - R = \hat{F}^d - MR_s V_s \quad (2.18)$$

où $\hat{F}^d$ est un membre de droite connu, et $\hat{M} = M + h^2 \theta^2 K$. Nous pouvons dès lors vérifier que la dynamique (2.18) fournit une solution satisfaisant la condition d'orthogonalité. En effet, en multipliant à gauche de l'équation (2.18) par R_s^T , nous pouvons aisément voir que $R_s^T M V_e = 0$.

2.3 Algorithme NSCDD en co-rotationnel

Envisageons maintenant la sous-structuration d'un échantillon de corps déformables dont l'évolution est modélisée par une formulation co-rotationnelle. Le raccord entre particules d'interface est envisagé sur leurs composantes rigides, réduites au centre d'inertie des corps : $V_{E'}^S = V_E^S$. La dynamique non-régulière devient :

$$M_E V_E + R_E^{\text{int}} - R_E = F_E^d - D_E^e A_{\Gamma E}^T F_\Gamma, \quad (2.19)$$

$D_E^e A_{\Gamma E}^T F_\Gamma$ étant une extension du multiplicateur de Lagrange à l'ensemble des degrés de liberté du sous-domaine E .

Introduisant la fonction-test $V^* = R_E^s (V_E^s)^* + (V_E^e)^*$, la dynamique devient

$$M_E V_E^e + R_E^{\text{int}} + M_E R_E^s V_E^s - R_E = R_E^d - D_E^e A_{\Gamma E}^T F_\Gamma, \quad (2.20)$$

$$\bar{M}_E V_E^s + (R_E^s)^T R_E^{\text{int}} + (R_E^s)^T M_E V_e - \bar{R}_E = \bar{R}_E^d - (R_E^s)^T D_E^e A_{\Gamma E}^T F_\Gamma. \quad (2.21)$$

Les termes de couplage disparaissent de la même façon que précédemment (sans décomposition de domaine), considérant la condition d'orthogonalité $(R_E^s)^T M_E V_E^e = 0$ qui s'écrit grain par grain de façon indépendante. Remarquons que si $(R_E^s)^T D_E^e \neq I_d$ il y a contradiction, car $A_{\Gamma E}^T F_\Gamma$ est, par définition, le multiplicateur de Lagrange associé au recollement d'interface sur la partie rigide des sous-domaines, définit au centre d'inertie. Pour obtenir $(R_E^s)^T D_E^e = I_d$, une solution consiste à imposer que l'opérateur de prolongation D_E^e soit nul pour l'ensemble des lignes correspondant aux degrés de liberté des nœuds du maillage élément fini.

Une fois déterminé V_E^s , la dynamique associée à la composante "déformable" de la vitesse s'écrit :

$$M_E V_E^e + R_E^{\text{int}} - R_E = R_E^d - D_E^e A_{\Gamma E}^T F_\Gamma - M_E R_E^s V_E^s$$

ce qui vérifie bien l'équation d'orthogonalité $(R_E^s)^T M_E V_E^e = 0$. En effet, pré-multipliant (2.20) par $(R_E^s)^T$, nous obtenons :

$$(R_E^s)^T M_E V_E^e - \bar{R}_E = -\bar{M}_E V_E^s - (R_E^s)^T R_E^{\text{int}} + \bar{R}_E^d - (R_E^s)^T D_E^e A_{\Gamma E}^T F_\Gamma. \quad (2.22)$$

Ayant au préalable résolu (2.21), la condition d'orthogonalité est donc automatiquement vérifiée.

L'équation d'interface sur les vitesses V_E^s est formulée de sorte à être le plus proche possible des équations de l'algorithme NSCDD pour les corps rigides :

$$\sum_E A_{\Gamma E} V_E^s = 0. \quad (2.23)$$

Au pas de temps courant, le problème devient : trouver le triplet $(V_E = R_E^s V_E^s + V_E^e, r_E, F_\Gamma)$ vérifiant, dans l'ordre :

- la dynamique réduite et les conditions de contact :

$$\begin{cases} \tilde{W}_E r_E - v_E = -\tilde{v}_E^d - f_E^\Gamma \\ \mathcal{R}(v_E, r_E) = 0 \end{cases}, \quad (2.24)$$

avec $f_E^\Gamma = H^T \tilde{M}^{-1} D_E^e A_{\Gamma E}^T F_\Gamma$, D_E^e étant un opérateur de prolongation à composante nulle pour les lignes correspondant aux degrés de libertés des nœuds ;

- la dynamique associée à la partie rigidifiante du mouvement des corps :

$$\bar{M}_E V_E^s + A_{\Gamma E}^T F_\Gamma = \bar{R}_E + \bar{F}_E^d; \quad (2.25)$$

- la dynamique associée à la partie déformable du champs de vitesse :

$$\hat{M}_E V_E^e - R_E = \hat{R}_E^d - M_E R_E^s V_E^s - D_E^e A_{\Gamma E}^T F_\Gamma, \quad (2.26)$$

avec $\hat{R}_E^d$ un membre de droite connu et $\hat{M}_E = M_E + h^2 \theta^2 K_E$;

- le recollement à l'interface, sur la partie rigide du champs de vitesse :

$$\sum_E A_{\Gamma E} V_E^s = 0. \quad (2.27)$$

Prenant en compte l'expression de V_E^s issue de (2.26), l'équation (2.27) devient :

$$\sum_E A_{\Gamma E} \bar{M}_E^{-1} A_{\Gamma E}^T F_\Gamma = \sum_E A_{\Gamma E} \bar{M}_E^{-1} (\bar{R}_E + \bar{F}_E^d). \quad (2.28)$$

2.3.1 Discussion

Du point de vue numérique, les performances peuvent être très intéressantes car la taille du problème d'interface est identique au cas de solides rigides alors que le problème à résoudre dans chaque sous-domaine est considérablement augmenté. La déformation des corps permet de plus de limiter le nombre d'itérations à convergence vis-à-vis d'une simulation comprenant uniquement des corps rigides. Par manque de temps, cette extension de la méthode NSCDD n'a pas été implémentée dans le code de calcul LMGC90,

d'où l'absence de résultats numériques permettant d'enrichir cette étude. Car si les gains attendus sont importants, il est nécessaire de vérifier que la solution physique obtenue par une telle méthode numérique ne perturbe pas de façon inacceptable la solution vis-à-vis d'une solution séquentielle.

Cette approche peut de plus présenter un intérêt en terme de couplage de modèles. Le couplage de modèle entre des sous-domaines contenant des corps déformables (en corotationnel) et des sous-domaines contenant des corps rigides est en effet immédiat. Dans cette éventualité, l'équation d'interface (2.28) reste inchangée et seule l'équation (2.26) est retirée de l'algorithme pour les sous-domaines contenant uniquement des solides rigides.

3 Méthode de décomposition de domaine de type Schwarz additif

Nous allons présenter dans cette section une seconde méthode de décomposition de domaine, alternative à la méthode NSCDD, pour la dynamique des contacts de particules rigides.

3.1 Formulation historique

Les principaux concepts de cette méthode de décomposition de domaine pour les milieux granulaires ont été introduits par P. Breitenkopf et M. Jean [16]. L'idée principale en est :

“Ce sont les contacts, et leurs réactions inconnues, qui sont affectées aux différents processeurs. Les informations sont échangées entre processeurs via les torseurs exercés sur chaque grain par les réactions.”

Une fois superposée une grille (définissant des “boîtes”) à l'échantillon complet “les candidats au contact sont affectés aux boîtes. Cette opération permet d'opérer une partition de l'ensemble des contacts aux différentes boîtes.”

De ces idées générales nous allons développer par la suite une méthode de décomposition de domaine s'apparentant à une méthode de Schwarz additif avec recouvrement minimal.

3.2 Méthode de Schwarz-NSCD

B_E étant opérateur de passage des quantités globales aux quantités du sous-domaine E , défini par le partitionnement dual (FIG.1.11), prenons la restriction des équations de la dynamique formulées en vitesse (1.8) par sous-domaine comme,

$$B_E(MV) = B_E(R + R^d). \quad (2.29)$$

La matrice des paramètres d'inertie par sous-domaine (ici sans partition de l'unité) s'écrit :

$$M_E = B_E M B_E^T, \quad (2.30)$$

et comme, par construction, $V_E = B_E V$, le membre de gauche de l'équation (2.29) est :

$$B_E (M V) = B_E M V = B_E M B_E^T B_E V = M_E B_E V = M_E V_E \quad (2.31)$$

$B_E B_E^T$ étant la matrice identité de taille $N_E^{Sddl} \times N_E^{Sddl}$ (N_E^{Sddl} est le nombre de degrés de liberté des corps du sous-domaine E).

De même, l'impulsion imposée R^d , provenant des vitesses des corps et des forces extérieures agissant sur les corps, dépend uniquement de quantités définies à l'échelle du sous-domaine E :

$$B_E R^d = R_E^d. \quad (2.32)$$

Le couplage entre sous-domaines intervient alors par l'intermédiaire des impulsions de contact. En effet, pour les corps d'interface supportant des contacts dans plus d'un sous-domaine, l'impulsion assemblée est

$$R = \sum_{E^*=1}^{N_{sd}} B_{E^*}^T H_{E^*} r_{E^*}.$$

Lors de la sélection par B_E de la composante relative au sous-domaine E , $B_E R$ se décompose en un terme local et un terme de couplage :

$$B_E R = H_E r_E + R_E^{ddm}, \quad \text{avec} \quad R_E^{ddm} = \sum_{E^* \neq E} B_E B_{E^*}^T R_{E^*}, \quad (2.33)$$

$B_E B_{E^*}^T$ définissant un opérateur booléen de passage des quantités de E^* appartenant aussi au sous-domaine E .

Dynamique par sous-domaines La dynamique globale par sous-domaine devient alors :

$$M_E V_E - H_E r_E = R_E^d + R_E^{ddm}. \quad (2.34)$$

Le terme R_E^{ddm} est à considérer dans le cadre d'un algorithme de Schwarz additif comme une condition aux limites en impulsion, connu en début d'itération, ayant pour valeur les impulsions des sous-domaines interconnectés en fin d'itération DDM précédente.

Dynamique locale aux contacts La dynamique réduite aux contacts est alors simplement modifiée par cette nouvelle impulsion imposée au second membre :

$$\left. \begin{aligned} W_E r_E - v_E &= -v_E^d - v_E^{ddm} \\ \mathcal{R}(v_E, r_E) &= 0 \end{aligned} \right\} E = 1, \dots, N_{sd}, \quad (2.35)$$

avec $v_E^{ddm} = H_E^T M_E^{-1} R_E^{ddm}$.

Comme on peut le constater, cette méthode ne fait pas intervenir de nouvelles inconnues d'interface, mais seulement des échanges entre processeurs. Les impulsions, agissant sur les corps d'interface d'un sous-domaine, associées à des contacts de sous-domaines interconnectés, sont considérées comme des conditions aux limites. On ne fait donc pas intervenir de problème de recollement global comme c'est le cas pour la méthode NSCDD. Cette structure algorithmique est à rapprocher des méthodes de décomposition de domaines de type Schwarz additif [52]. Cette méthode sera nommée Schwarz-NSCD par la suite.

Algorithme de Schwarz-NSCD La méthode de décomposition de domaine Schwarz-NSCD ainsi définie peut être mise en œuvre comme présenté dans l'algorithme ALG.3. Contrairement à la méthode NSCDD, la procédure itérative de calcul des impulsions de contact ne comporte qu'une seule étape car aucun problème d'interface n'intervient ici. Le dialogue entre sous-domaines est en effet réalisé par échange des torseurs d'impulsion des corps d'interface.

Algorithm 3 Itérations de l'algorithme Schwarz-NSCD

while (critère de convergence non satisfait) **do**

Par sous-domaine, pour $E = 1, \dots, N_{sd}$

Évaluation de $R_E = H_E r_E$ pour envoi aux sous-domaines interconnectés

Évaluation de $v_E^{ddm} = H_E^T M_E^{-1} \sum_{E^* \neq E} B_{EE^*} R_{E^*}$

Calcul de $\bar{r}_E$ avec n_{GS} itérations Gauss-Seidel non-linéaire sur :

$$\begin{cases} W_E \bar{r}_E - \bar{v}_E = -v_E^d - v_E^{ddm} \\ \mathcal{R}(\bar{v}_E, \bar{r}_E) = 0 \end{cases}$$

Mise à jour : $r_E \leftarrow \bar{r}_E$

end while

3.3 Analyse d'une itération de Schwarz-NSCD

Pour cette étude on fixe le nombre d'itérations NLGS à $n_{GS} = 1$, par analogie avec les résultats obtenus pour la méthode NSCDD ainsi que par simplicité. Prenant pour convention les indices α, β comme indices des contacts du sous-domaine E , l'itération $k+1$ de Gauss-Seidel non linéaire s'écrit alors :

$$v_\alpha^{k+1} = v_\alpha^d + v_\alpha^{ddm} + W_{\alpha\alpha} r_\alpha^{k+1} + \sum_{\beta < \alpha} W_{\alpha\beta} r_\beta^{k+1} + \sum_{\beta > \alpha} W_{\alpha\beta} r_\beta^k \text{ et } \mathcal{R}(r_\alpha^{k+1}, v_\alpha^{k+1}) = 0. \quad (2.36)$$

Or, si i est l'indice (dans la numérotation globale de l'échantillon) du grain d'interface associé à un contact α , et γ_{E^*} les indices des contacts du sous-domaine E^* interconnecté

avec E par l'intermédiaire du grain i , le terme v_α^{ddm} peut être développé comme :

$$\begin{aligned} v_\alpha^{ddm} &= H_\alpha^T M_i^{-1} \sum_{E^* \neq E} R_{E^*}^i \\ &= H_\alpha^T M_i^{-1} \sum_{E^* \neq E} \sum_{\gamma_{E^*}} H_{\gamma_{E^*}} r_{\gamma_{E^*}}^k \\ &= \sum_{E^* \neq E} \sum_{\gamma_{E^*}} W_{\alpha \gamma_{E^*}} r_{\gamma_{E^*}}^k. \end{aligned} \quad (2.37)$$

En injectant cette dernière formulation dans (2.36) nous obtenons :

$$v_\alpha^{k+1} = v_\alpha^d + W_{\alpha\alpha} r_\alpha^{k+1} + \sum_{\beta < \alpha} W_{\alpha\beta} r_\beta^{k+1} + \sum_{\beta > \alpha} W_{\alpha\beta} r_\beta^k + \sum_{E^* \neq E} \sum_{\gamma_{E^*}} W_{\alpha \gamma_{E^*}} r_{\gamma_{E^*}}^k. \quad (2.38)$$

Sans la sous-structuration, une partie des contacts γ_{E^*} aurait été traitée comme déjà actualisée et donc les valeurs en $k+1$ auraient été prises en compte. Ce phénomène montre clairement le caractère mixte Gauss-Seidel/Jacobi de l'algorithme itératif obtenu.

4 Comparaison des méthodes NSCDD et Schwarz-NSCD

Nous présentons dans cette section deux cas-tests afin de comparer les méthodes NSCDD et Schwarz-NSCD en regard d'une simulation mono-domaine.

4.1 Dépôt gravitaire 2D

Afin de comparer les comportements des méthodes NSCDD et Schwarz-NSCD une simulation de dépôt gravitaire d'un milieu granulaire 2D de petite dimension est réalisée. Les paramètres de cette simulation sont résumés dans le tableau TAB.2.1. La norme de convergence “*Quad*” (1.16) est un critère de stabilité énergétique du réseau de contact prenant en compte la norme 2 usuelle, que l'on peut donc évaluer aussi bien pour la méthode séquentielle que pour les deux méthodes de décomposition de domaines discutées. Ici, la norme de convergence sur l'interface du problème NSCDD n'est pas prise en compte, afin d'avoir un critère d'arrêt unique pour les trois méthodes. La stratégie de résolution (du solveur NLGS) “*SDL*” (Stored Delassus Loop) consiste à calculer et stocker les blocs extra-diagonaux de l'opérateur de Delassus en début de pas de temps, contrairement à la stratégie nommée “*ELG*” (Exchange Local Global) qui n'assemble pas ces matrices.

Afin de comparer ces deux méthodes à une référence fiable, la simulation de référence NSCD est réalisée à l'aide du code de calcul LMGC90 (version stable 2012) et peut donc être considérée comme une solution de référence.

On constate (TAB.2.2) que le nombre d'itérations des méthodes de décomposition de domaine est plus important que pour la méthode NSCD mono-domaine. En effet, comme indiqué dans la section 3.3 la méthode de Schwarz-NSCD revient à une méthode hybride Gauss-Seidel/Jacobi, ce qui implique un nombre d'itérations à convergence plus élevé qu'une méthode de Gauss-Seidel (dans le cas de la dynamique des contacts). Cependant,

Nombre de pas de temps	Nb_time_step	$= 500$
Pas de temps	Δt	$= 5 \cdot 10^{-3} s$
Norme de convergence	$Norm$	$Quad$
Tolérance	Tol	10^{-4}
Stratégie NLGS	$Strat$	SDL

TABLE 2.1 – Paramètres numériques de la simulation de dépôt gravitaire 2D

	NSCD	NSCDD	SCHWARZ
Nombre total d'itérations	86500	122400	110500
Interpénétration moyenne	$3,49 \cdot 10^{-6}$	$2,61 \cdot 10^{-7}$	$4,35 \cdot 10^{-6}$
Interpénétration maximale	$7,36 \cdot 10^{-5}$	$7,45 \cdot 10^{-6}$	$6,31 \cdot 10^{-5}$

TABLE 2.2 – Nombre d'itérations totales, interpénétration moyenne et maximale pour les trois méthodes testées

cette augmentation du nombre d'itérations est ici amplifié par le très faible nombre de corps par sous-domaine. En effet, le nombre de corps d'interface est proportionnellement important vis-à-vis du nombre total de corps de la simulation (cf. FIG.2.11 ou FIG.2.12).

Cette simulation montre que le problème est résolu de façon similaire par les trois méthodes. Bien que les champs de vitesse FIG.2.10 ne soient pas identiques les trois échantillons sont dans un état de quasi équilibre en fin de simulation. De plus, les réseaux de forces FIG.2.11 et FIG.2.12 représentent une même physique. Le fait que de petites perturbations des trois solutions interviennent dans un cas aussi simple indique avec force la non unicité de la solution des équations de la dynamique locale aux contacts : une très légère variation des paramètres numériques d'une simulation pouvant mener à une réorganisation du réseau de contact, par exemple.

4.2 Cisaillement avec conditions périodiques

Considérons maintenant le cisaillement d'un échantillon granulaire, réalisé à l'aide de disques positionnés à la base de l'échantillon possédant une vitesse imposée v_x et d'une paroi supérieure transmettant la pression p (suivant $-y$). Une condition de périodicité suivant x est de plus mise en œuvre afin d'assurer la redistribution des grains au cours du processus (FIG.2.13).

Dans le contexte d'une décomposition en sous-domaines, la condition de périodicité est traduite naturellement par une interface supplémentaire. Dans le cas d'une découpe 2×1 (deux intervalles suivant x , un suivant y) la modélisation comporte alors deux interfaces, comme représenté FIG.2.14.

Les résultats obtenus en termes de nombre d'itérations et d'interpénétrations moyenne et maximale sont présentés FIG.2.15. Le nombre d'itérations pour la méthode NSCDD est ici légèrement supérieur à celui des méthodes NSCD et Schwarz-NSCD, alors que la méthode Schwarz-NSCD présente des valeurs d'interpénétration moyenne légèrement plus élevées que les deux autres méthodes.

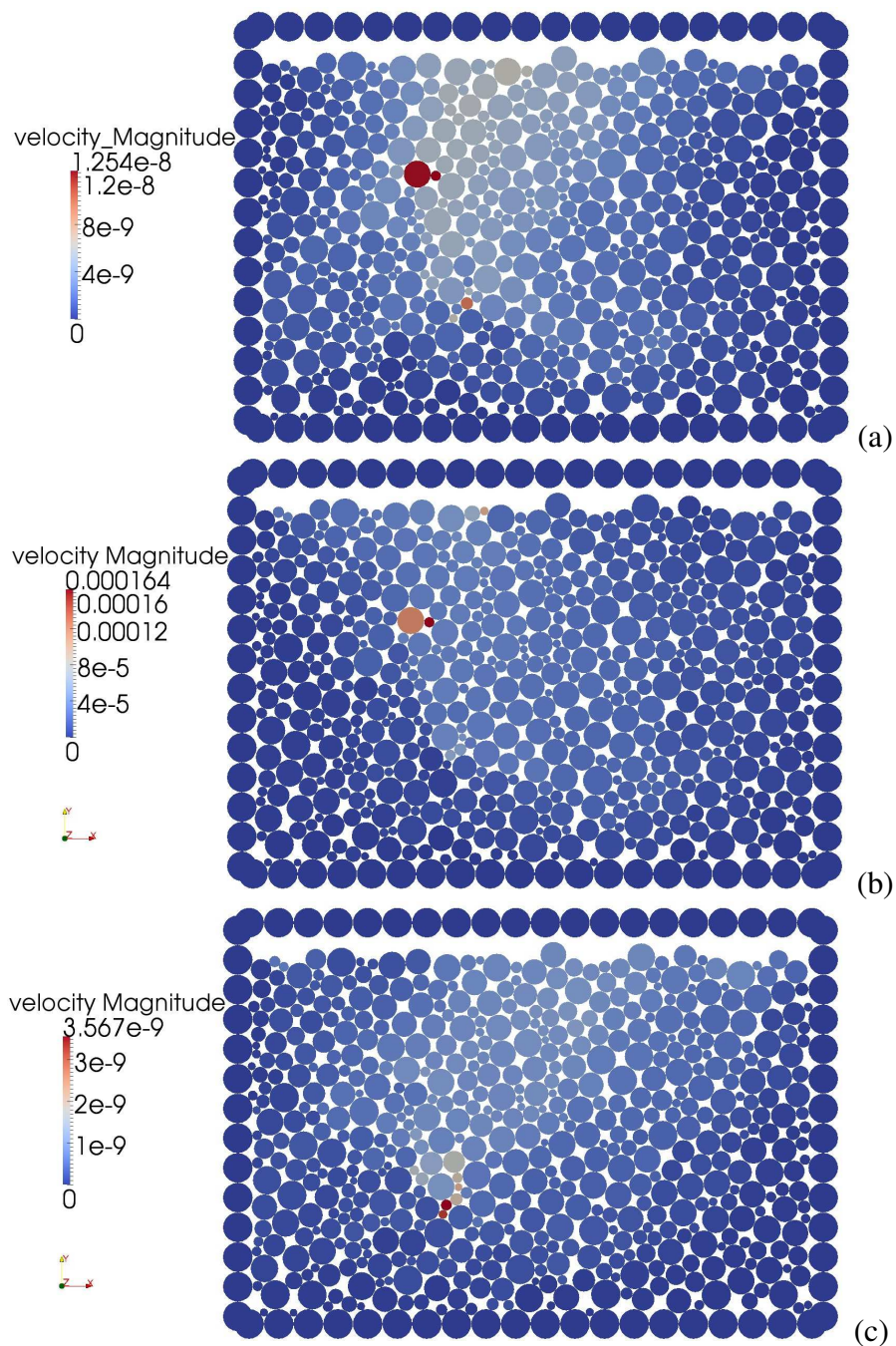


FIGURE 2.10 – Vitesse des corps en fin de dépôt gravitaire : (a) NSCD ; (b) NSCDD ; (c) Schwarz-NSCD

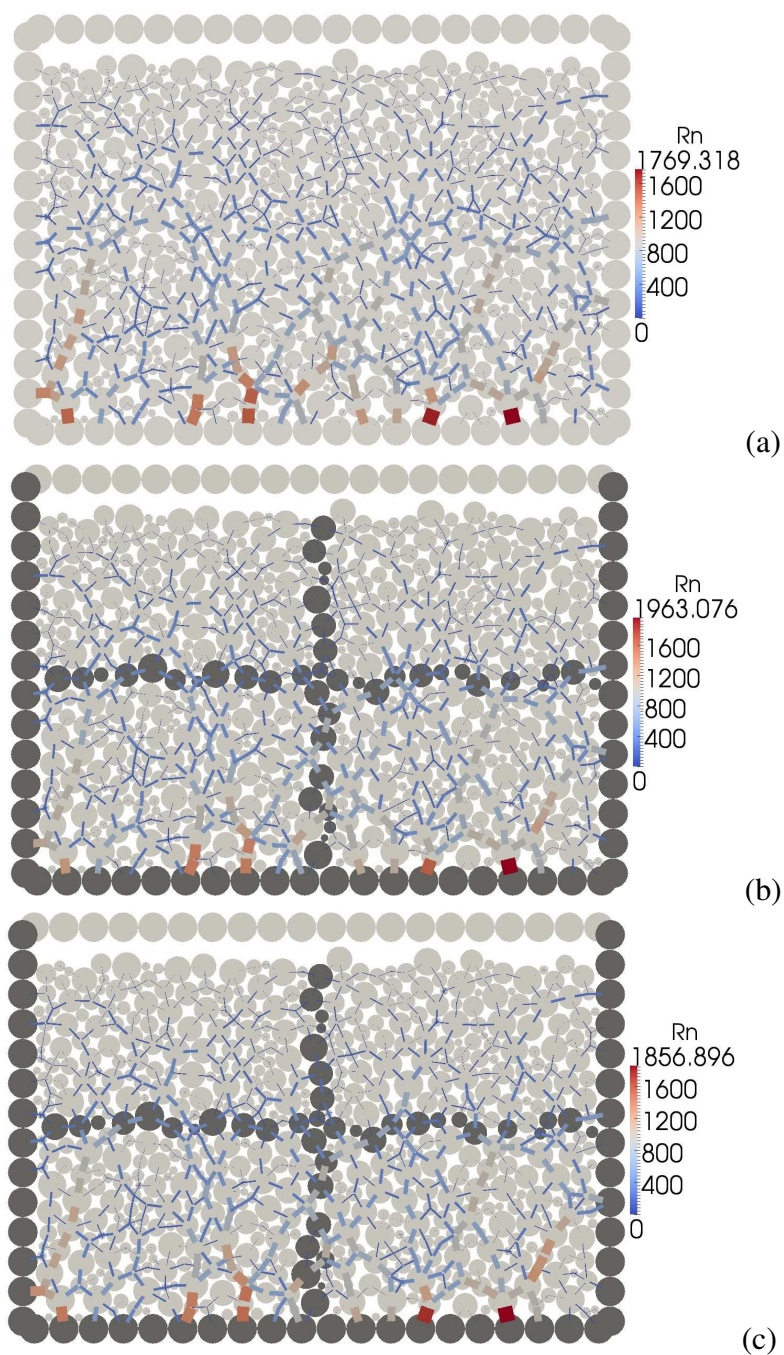


FIGURE 2.11 – Impulsions normales aux contacts et multiplicités des corps codée en niveau de gris : (a) NSCD ; (b) NSCDD ; (c) Schwarz-NSCD

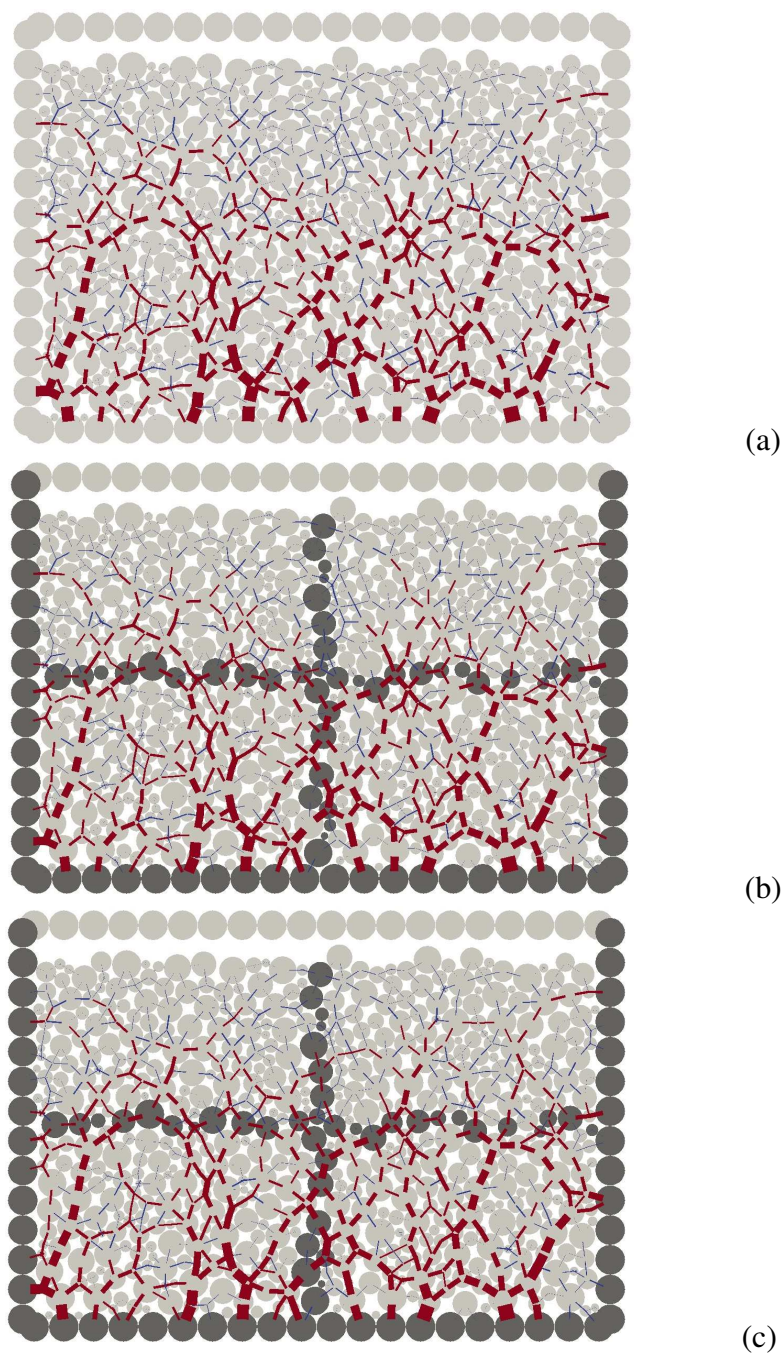


FIGURE 2.12 – Réseau de forces fortes (rouge) et faibles (bleu) aux contacts et multiplicités des corps codée en niveau de gris : (a) NSCD ; (b) NSCDD ; (c) Schwarz-NSCD

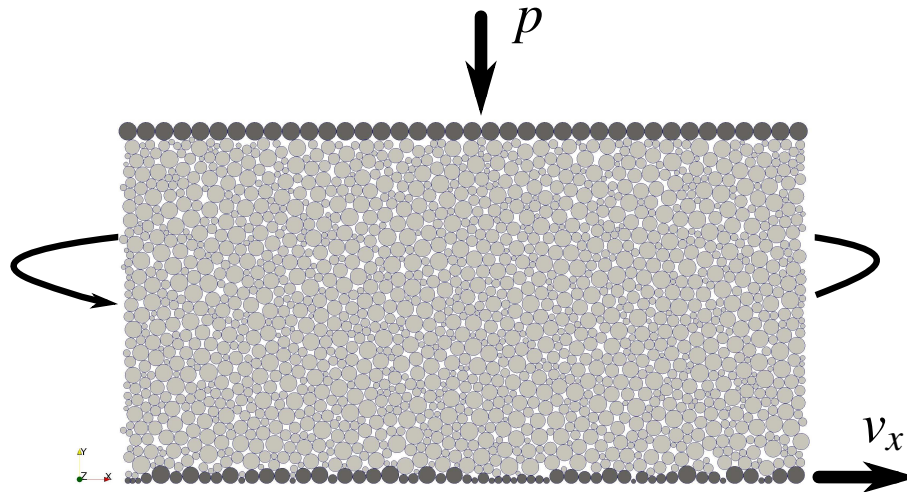


FIGURE 2.13 – Test de cisaillement : géométrie de l'échantillon et conditions aux limites

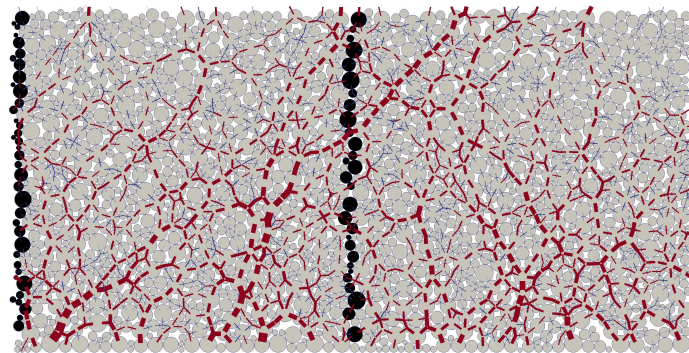


FIGURE 2.14 – Échantillon cisailé. Chaînes de forces (rouge : forces fortes, bleu : forces faibles) et multiplicité des grains (gris : $m = 1$, noir : $m = 2$).

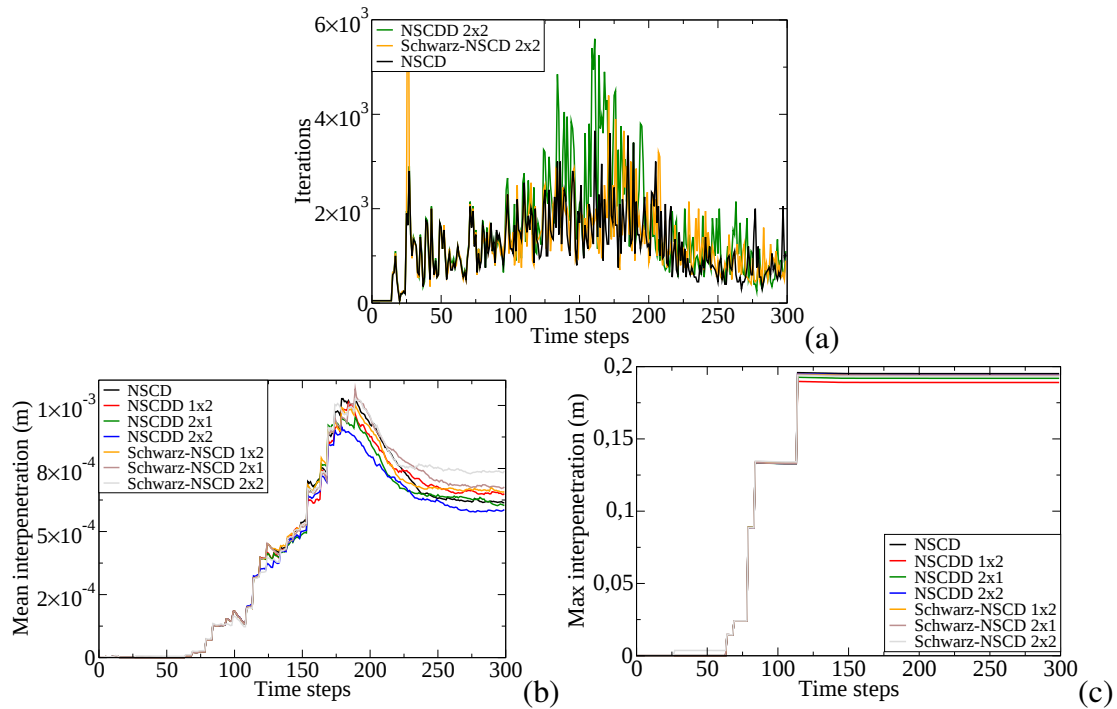


FIGURE 2.15 – Essai de cisaillement. (a) : itérations à convergence. (b) et (c) : interpénétrations moyenne et maximale au cours du processus.

Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons détaillé les principaux développements théoriques apportés à la méthode NSCDD, dont une tentative d’extension aux milieux déformables qui constitue un sujet d’étude ouvert. Nous avons ensuite développé la méthode de Schwarz-NSCD, basée sur des concepts proches des travaux de Breitenkopf et Jean [16]. Cette méthode s’apparente à une méthode de Schwarz additif avec recouvrement minimal, avec un algorithme mixte Jacobi/Gauss-Seidel non linéaire pour la résolution des impulsions de contact. Enfin, une comparaison des méthodes NSCD (séquentielle), NSCDD et Schwarz-NSCD, sur une simulation de dépôt gravitaire 2D, indique un comportement voisin des deux méthodes de décomposition de domaines discutées (nombre d’itérations à convergence, interpénétrations, réseaux de contacts). Cependant, on constate que l’*indétermination*, caractéristique des problèmes multi-contacts en présence de frottement, ne permet pas d’établir un critère de convergence des méthodes DDM vis-à-vis d’une simulation séquentielle de “référence”. La validation mécanique de ces méthodes est alors en question. Nous allons tenter, dans le chapitre suivant, d’apporter une réponse à ce problème de *validation* de la méthode NSCDD.

Chapitre 3

Validation de la méthode NSCDD sur la physique des milieux granulaires

Dans ce troisième chapitre, la robustesse de la méthode NSCDD est étudiée vis-à-vis du comportement global et micro-mécanique d'un échantillon granulaire 2D soumis à une compression biaxiale. L'analyse des temps de simulation de cette étude, pour une implémentation multi-domaines séquentielle, permet d'en analyser les gains à attendre d'une implémentation parallèle.

Sommaire

1	Influence de la méthode NSCDD : cas d'un essai biaxial	64
1.1	Simulation d'un essai biaxial	64
1.2	Comportement macroscopique	65
1.3	Analyse micro-mécanique	68
2	Performance de la méthode NSCDD en implémentation séquentielle . .	73
2.1	Implémentation séquentielle multi-domaines	73
2.2	Analyse des coûts par étape de calcul	74

Introduction

Du fait de la multiplicité de la solution des problèmes granulaires denses, les *critères* de convergence s'interprètent, en dynamique des contacts, comme des *indicateurs* de convergence. Attendre d'une solution DDM une convergence "point à point" vers une solution séquentielle de "référence" serait donc illusoire. En effet, si une méthode NLGS est supposée pour la résolution séquentielle du problème de référence, un simple changement dans l'ordre de parcours des contacts entraîne une modification significative de la solution obtenue. Or les méthodes de décomposition de domaine impliquent, en général, une telle modification de l'ordre de parcours. La problématique de *validation* des méthodes de décomposition de domaine ne peut donc être posée en terme de superposition "point à point" entre la solution calculée et une solution de référence unique.

Cependant, la communauté des milieux granulaires a développé des outils d'analyse du comportement global et micro-mécanique de tels milieux. La solution obtenue par une méthode numérique peut non seulement être comparée à l'expérience, mais encore à des caractéristiques fondamentales de la physique des milieux granulaires. Il est donc nécessaire de montrer que les méthodes de décomposition de domaine n'introduisent pas d'erreur marquée par rapport à cette physique. Pour ce faire, nous allons étudier l'influence de la méthode NSCDD pour un chargement typique (essai biaxial) d'un échantillon granulaire 2D.

1 Influence de la méthode NSCDD : cas d'un essai biaxial

L'objectif de cette section est de tester la robustesse de la méthode NSCDD vis-à-vis de la physique des milieux granulaires. Pour ce faire, nous définissons, dans un premier temps, l'échantillon granulaire considéré et comparons la réponse macroscopique sous cisaillement pour différentes décompositions. La microstructure (i.e. l'organisation spatiale des particules et de leurs contacts) est analysée dans un second temps en fonction du nombre de sous-domaines.

1.1 Simulation d'un essai biaxial

Un échantillon composé de 12000 disques est premièrement construit par un algorithme de dépôt basé sur des règles géométriques introduites par Voivret [80]. Les particules sont déposées une à une. Chaque nouvelle particule est placée à la position la plus basse possible sur la surface libre de l'échantillon en fonction de son diamètre. Cette procédure permet de construire un échantillon 2D tel que chaque particule est supportée par deux particules sous-jacentes et supporte une ou deux autres particules. Afin d'éviter la formation d'un empilement ordonné, une faible polydispersité sur le diamètre des disques est introduite.

Une fois le dépôt réalisé, l'échantillon est compacté par une compression isotrope à l'intérieur d'un rectangle de dimensions $l_0 \times h_0$, dans lequel les murs de gauche et du bas

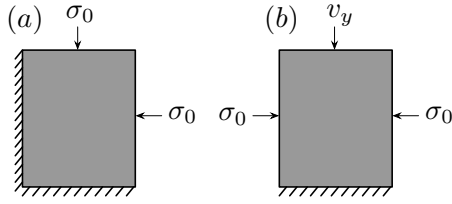


FIGURE 3.1 – Conditions aux limites pour les compressions (a) isotropique et (b) biaxiale.

sont fixes, et les murs de droite et du haut sont soumis à une pression de confinement σ_0 . La gravité g et le coefficient de friction aux contacts μ entre particules et avec les murs sont fixés à zéro durant la compression de sorte à éviter les gradients de force et obtenir un échantillon granulaire dense et isotrope (FIG.3.1(a)). Les échantillons isotropes sont alors soumis à une compression verticale imposée par le déplacement du mur supérieur avec une vitesse de descente constante v_y pour une pression de confinement σ_0 imposée sur les parois latérales (FIG.3.1(b)). Le coefficient de frottement μ entre particules est fixé à 0.35 et à zéro avec les parois. Comme nous nous sommes intéressés à un comportement quasi-statique, la vitesse de cisaillement doit être telle que l'énergie cinétique induite par le cisaillement soit négligeable comparée à la pression de confinement. Cette condition est classiquement formulée en terme de *nombre d'inertie* défini comme en [31],

$$I = \begin{cases} \dot{\epsilon} \sqrt{\frac{m}{p}} & \text{en 2D,} \\ \dot{\epsilon} \sqrt{\frac{m}{pd}} & \text{en 3D,} \end{cases} \quad (3.1)$$

où $\dot{\epsilon} = \dot{y}/y$ est le taux de déformation, m est la masse moyenne d'une particule, d est le diamètre moyen et p est la pression moyenne (définie comme la force par unité de largeur dans le cas 2D). L'état quasi-statique est caractérisé par la condition $I \ll 1$; dans les simulations suivantes, I est inférieur à 10^{-4} .

Cette simulation est répétée 5 fois, en variant le nombre de sous-domaines entre 0 (correspondant à la simulation séquentielle de référence) jusqu'à 4 (notés par la suite de S0 à S4). La figure 3.2(a) représente les décompositions choisies dans la configuration initiale. La figure 3.2(b) est un zoom sur le cas S4 pour illustrer l'organisation des particules.

1.2 Comportement macroscopique

Dans cette section, nous considérons le comportement de l'échantillon en termes de contrainte-déformation et de changement de volume en fonction du nombre de sous-domaines. Il est alors nécessaire d'évaluer le tenseur de contraintes et d'évaluer la compacité durant l'essai à partir des résultats de la simulation à l'échelle microscopique.

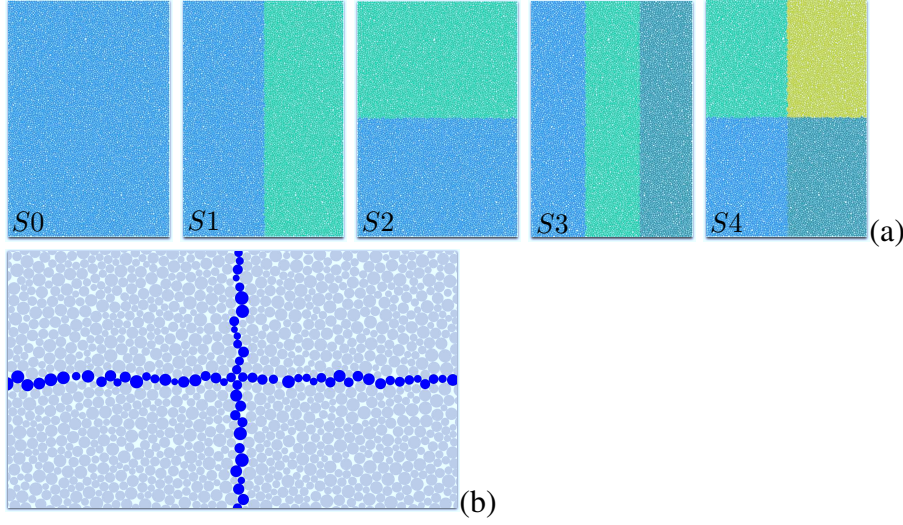


FIGURE 3.2 – Exemples de décomposition à l'état initial (a) et zoom à l'intersection des quatre sous-domaines pour le cas $S4$ (b). La multiplicité est (b) : 1 pour les particules grises et 2 pour les particules noires.

1.2.1 Définition des paramètres macroscopiques étudiés

Pour les milieux granulaires, l'expression du *tenseur des contraintes* σ dans le volume V est une moyenne arithmétique faisant intervenir le *vecteur branche* ℓ^α joignant les centres de deux particules voisines, et le vecteur des efforts de contact f^α au contact α . Il est donné par [59, 77] :

$$\sigma = \frac{1}{V} \sum_{\alpha \in V} f^\alpha (\ell^\alpha)^T \quad (3.2)$$

Pour un chargement biaxial avec compression verticale, on a $\sigma_1 \geq \sigma_2$, où les σ_k sont les contraintes principales. La contrainte moyenne est $p = (\sigma_1 + \sigma_2)/2$, et le déviateur de contrainte est $q = (\sigma_1 - \sigma_2)/2$. Considérant le modèle de Mohr-Coulomb, la *résistance au cisaillement* d'un matériau granulaire sec peut être liée à l'*angle de frottement interne* φ comme suit [57] :

$$\sin \varphi = \frac{q}{p} = \frac{\sigma_1 - \sigma_2}{\sigma_1 + \sigma_2}. \quad (3.3)$$

La déformation macroscopique verticale ε_1 est la valeur cumulée définie comme :

$$\varepsilon_1 = \int_{h_0}^h \frac{dh'}{h'} = \ln \left(1 + \frac{\Delta h}{h_0} \right) \quad (3.4)$$

où h_0 est la hauteur initiale et $\Delta h = h_0 - h$ est le déplacement vertical cumulé.

1.2.2 Résistance au cisaillement et compacité

La figure 3.3 représente l'angle de frottement interne $\sin \varphi$ en fonction de la déformation verticale ε_1 pour toutes les décompositions. Le saut observé à $\varepsilon_1 = 0$ reflète à la fois

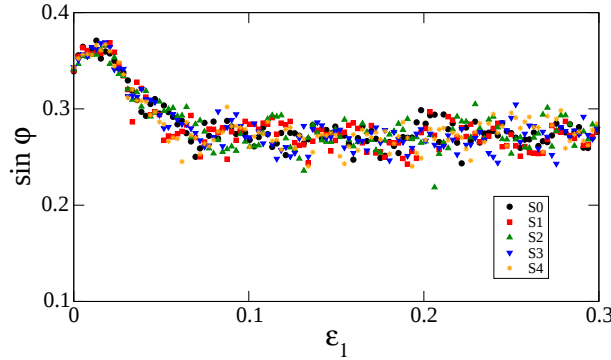


FIGURE 3.3 – Angle de frottement interne $\sin \phi$ en fonction de la déformation verticale ε_1 .

la rigidité des particules et la grande compacité initiale des échantillons. Dans tous les cas, la résistance au cisaillement passe par un maximum $(q/p)^{\text{peak}} \sim 0.38$ avant une étape de relaxation et de stabilisation autour de $(q/p)^* \sim 0.28$ correspondant à un *état* qualifié de *résiduel* en mécanique des sols [57]. On peut constater que, fluctuations mises à part, toutes les courbes se regroupent autour d'une même courbe moyenne.

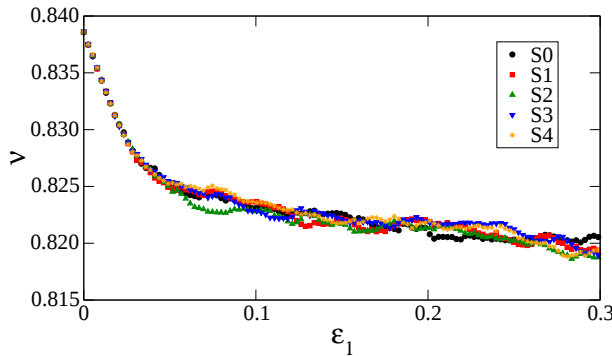


FIGURE 3.4 – Compacité v en fonction de la déformation verticale ε_1 .

La figure 3.4 montre la variation de la compacité $v = V_p/V$ en fonction de ε_1 pour les différentes décompositions, où V_p est le volume (la surface en 2D) occupée par les particules. La compacité décroît dans un premier temps de $v_0 \simeq 0.84$ à 0.825. Il est remarquable que, durant cette phase la compacité est rigoureusement égale pour tous les échantillons. Pour des déformations plus importantes, la compacité décroît bien plus lentement et, aux fluctuations près, sature autour d'une même courbe. En effet, pour de plus grandes déformations, la dilatation est localisée dans les bandes de cisaillement apparaissant et disparaissant au travers du réseau de contacts déterminant la saturation de v . Cela est bien illustré figure 3.5 où deux cartes de vitesses de rotation des particules sont représentées à $\varepsilon_1 = 0.2$ pour les cas $S0$ et $S3$. Nous voyons clairement que les topologies des bandes de cisaillement sont différentes même si, en moyenne, la compacité est identique. En fait, le phénomène de localisation mène à de multiples solutions physiquement admis-

sibles, et il a déjà été montré que la formation des bandes de cisaillement est fortement dépendante des détails des paramètres numériques des simulations (intervalle de temps, type de solveur, nombre d'itérations, etc.) [68].

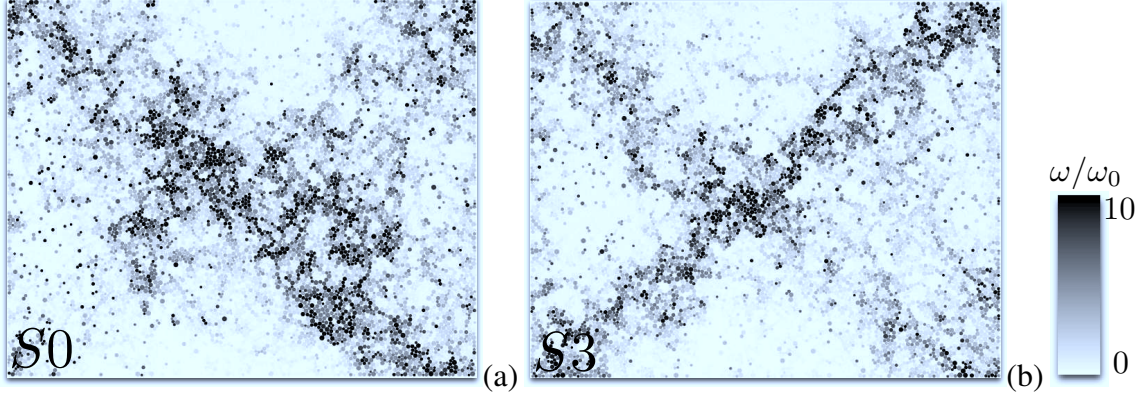


FIGURE 3.5 – Cartographie des vitesses de rotation normalisées pour les cas S0 (a) et S3 (b), à $\varepsilon_1 = 0.2$.

Dans cette section nous avons montré que la réponse macroscopique d'un matériau granulaire cisailé est indépendante du nombre de sous-domaines choisi. Cependant, un matériau granulaire est un exemple typique de matériau multi-échelle : le comportement macroscopique résulte des propriétés moyennes d'une collection de particules en interactions au travers d'un réseau de contacts. Cela est clairement illustré dans le cas de particules allongées où la résistance au cisaillement résiduelle croît linéairement avec l'élongation des corps [11]. En revanche, pour des formes de particules polyédriques ou non-convexes, la résistance au cisaillement résiduelle (définie comme la valeur de q/p après stabilisation, dans notre cas $(q/p)^* \sim 0.28$) croît dans un premier temps et sature lorsque le degré d'irrégularité ou de non-convexité est augmenté [10, 75]. Un autre effet surprenant est que la résistance au cisaillement résiduelle est indépendante de la polydispersité [81]. Cette large variété de comportement trouve ces origines à l'échelle des particules et des propriétés des contacts. Il est donc nécessaire de tester la robustesse de la méthode de décomposition de domaine en termes de microstructure du milieu granulaire.

1.3 Analyse micro-mécanique

La microstructure granulaire (texture granulaire), i.e. l'organisation spatiale des particules et de leurs contacts, est contrôlée par leurs exclusions stériques et les conditions d'équilibre des forces [79]. La forte non-homogénéité des forces de contact est une caractéristique bien connue des milieux granulaires. La figure 3.6 représente les forces de contact pour les cas S2 et S4 à l'état résiduel. Pour un même niveau de contraintes, les réseaux des forces sous-jacents sont différents, bien que la non-homogénéité globale semble être préservée. Cela est dû au fait que la résolution des forces de contact est réalisée domaine par domaine, ainsi qu'à la pluralité des solutions locales d'un milieu granulaire

en présence de frottement. Il convient cependant de vérifier, par des analyses statistiques, que la décomposition de domaine n'introduit pas de biais dans les caractéristiques des réseaux de contacts et des forces, obtenues par des analyses statistiques. D'autant que les notions d'anisotropie et de distribution des réseaux développées plus loin conditionnent la résistance au cisaillement d'un milieu granulaire. Par la suite, nous allons considérer deux aspects de cette micro-structure : (i) la moyenne angulaire sur les orientations des contacts et des forces, et (ii) la distribution des forces normales.

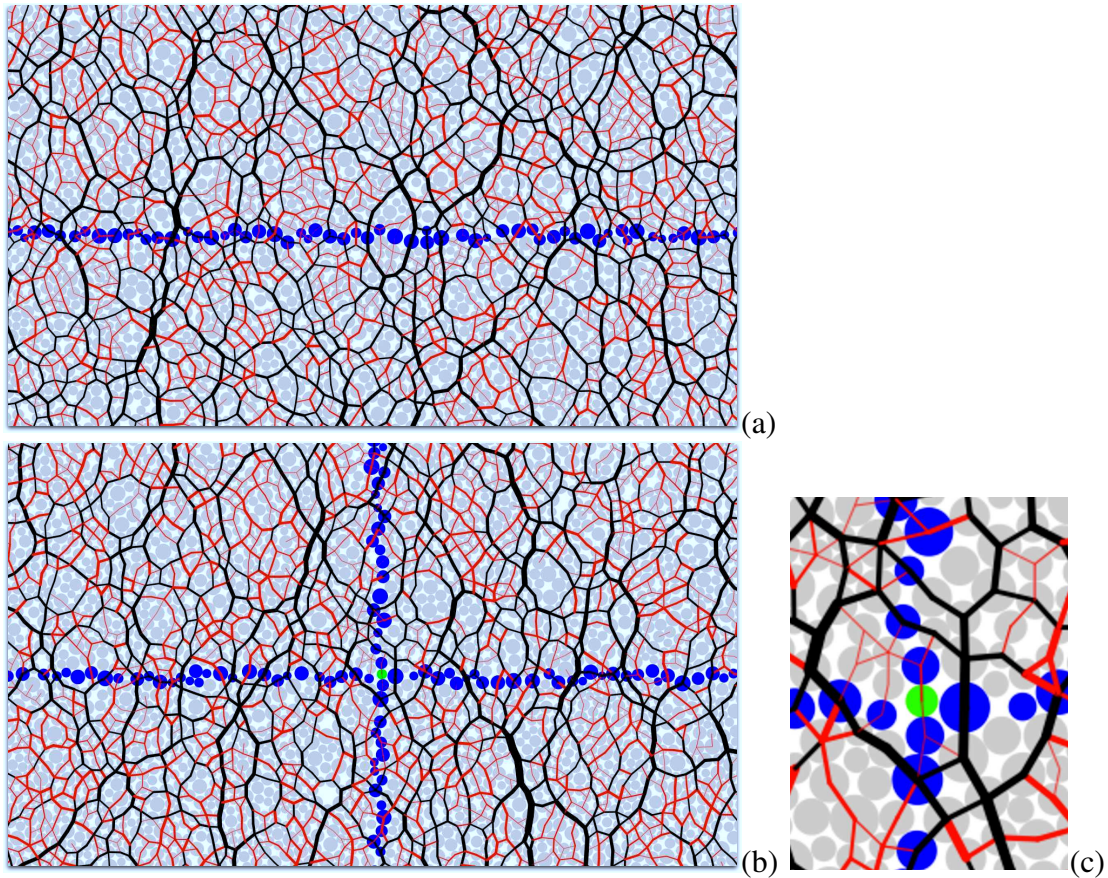


FIGURE 3.6 – Cartographie des chaînes de forces sur une portion des échantillons $S2$ (a) et $S4$ (b), à $\epsilon_1 = 0.2$; (c) est un zoom à l'intersection des sous-domaines de $S4$. L'épaisseur des lignes est proportionnelle à la valeur de la force normale. Les forces fortes ($f_n > \langle f_n \rangle$) sont en noir et les forces faibles ($f_n < \langle f_n \rangle$) en gris. La multiplicité est : 1 pour une particule gris clair, 2 pour une particule bleue, 3 pour une particule verte. Mise en évidence (c) de "cellules" de contacts faibles entourées de contacts forts, non perturbées par la décomposition (intersection des sous-domaines).

1.3.1 Anisotropie des contacts et des forces

Une approche classique est de considérer la distribution de probabilité des forces normales de contact n , qui est usuellement, non-uniforme. En 2D, le vecteur unitaire n est décrit par un seul angle θ . La fonction de densité de probabilité $P(\theta)$ des normales de contact fournit des données statistiques détaillées sur la texture du milieu granulaire. De la même manière, en exprimant le vecteur force dans le *repère de contact* local (n, t) , où t est un vecteur unitaire orthonormal orienté suivant la direction tangentielle, nous pouvons déterminer les distributions angulaires $\langle f_n \rangle(\theta)$ et $\langle f_t \rangle(\theta)$ des forces normales et tangentielles, respectivement. Les fonctions ci-dessus décrivent l'état général de l'échantillon. Sous cisaillement, l'organisation de l'échantillon est telle que ces fonctions peuvent être approchées par leurs développements de Fourier [73, 49, 66, 11] :

$$\begin{cases} P_\theta(\theta) & \simeq \frac{1}{2\pi} \{1 + a_c \cos 2(\theta - \theta_c)\} \\ \langle f_n \rangle(\theta) & \simeq \langle f \rangle \{1 + a_{fn} \cos 2(\theta - \theta_{fn})\} \\ \langle f_t \rangle(\theta) & \simeq \langle f \rangle a_{ft} \sin 2(\theta - \theta_{ft}) \end{cases} \quad (3.5)$$

où a_c , a_{fn} , et a_{ft} sont les paramètres d'anisotropie alors que θ_c , θ_{fn} , et θ_{ft} représentent les directions privilégiées correspondantes. Dans un état cisailé les directions privilégiées tendent à s'aligner sur les directions de contraintes principales (i.e. $\theta_c = \theta_{fn} = \theta_{ft} = \theta_\sigma$). En pratique, les valeurs de tous les paramètres d'anisotropie peuvent être évaluées par les tenseurs de fabrique généralisés et de force présentés dans [67, 11].

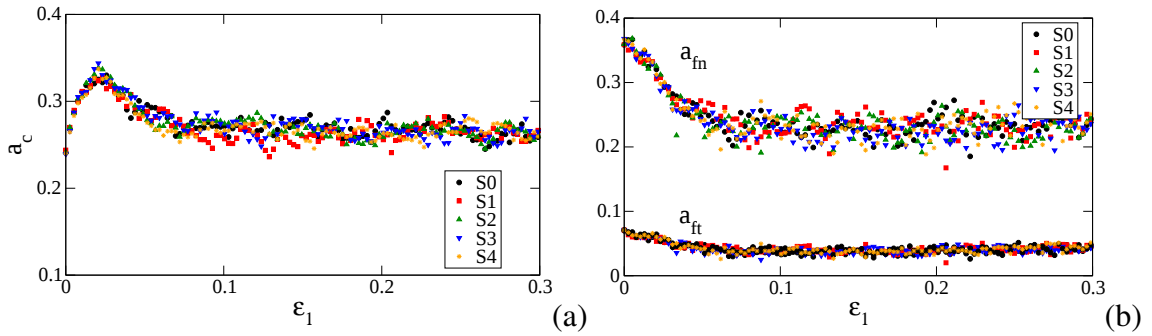


FIGURE 3.7 – Anisotropie des contacts (a) et anisotropie des forces normales et tangentielles (b) en fonction de la déformation verticale ϵ_1 pour les décompositions testées.

La figure 3.7 représente les variations de ces paramètres d'anisotropie en fonction de ϵ_1 pour les différents partitionnements en sous-domaines. Les fluctuations mises à part, toutes les courbes se joignent aussi sur une même courbe. On peut constater que a_c suit la même tendance que la résistance au cisaillement, croît premièrement jusqu'à une valeur maximale égale à $\simeq 0.35$ puis décline vers un plateau à $\simeq 0.26$. En contraste, a_{fn} décroît de $\simeq 0.38$ à une valeur constante $\simeq 0.24$, alors que a_{ft} reste quasi constante vis-à-vis de la déformation.

Ces paramètres d'anisotropie sont très pertinents pour l'analyse de la micro-structure granulaire car ils permettent de montrer les origines géométriques et mécaniques de la résistance. En effet, on peut dériver de l'expression générale du tenseur des contraintes (3.3) la relation, entre l'*angle de frottement interne* et les coefficients d'anisotropie, suivante (une expression proposée pour la première fois par Rothenburg et Bathurst dans [73]) :

$$\sin \varphi \simeq \frac{1}{2}(a_c + a_{fn} + a_{ft}), \quad (3.6)$$

où les produits croisés entre les paramètres d'anisotropie ont été négligés. Il est très important de tester la validité de la relation (3.6) dans le cadre de simulations numériques en décomposition de domaine car cette équation révèle le lien entre les échelles microscopique et macroscopique du milieu granulaire. Nous comparons FIG.3.8 la variation de résistance au cisaillement normalisée ($\sin \varphi$, en trait plein) avec l'approximation harmonique issue de l'équation (3.6). On constate que les résultats sont en accord avec cette approximation harmonique et ce quel que soit le nombre de sous-domaines.

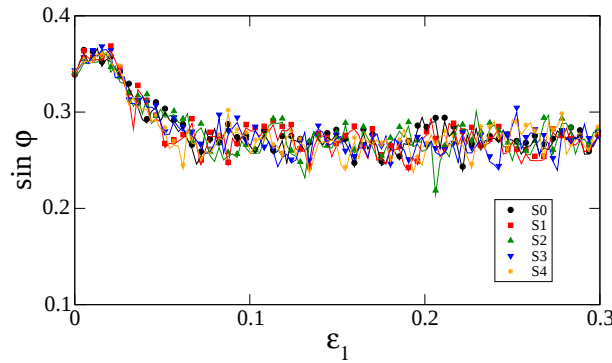


FIGURE 3.8 – Angle de frottement $\sin \varphi$ (symboles) et approximation harmonique (courbes) en fonction de la déformation verticale ε_1 pour les différentes décompositions testées.

1.3.2 Distribution des forces

La distribution des forces de contact a été étudiée expérimentalement et numériquement pour les échantillons constitués de disques, jonc, polygones et particules non-convexes en 2D aussi bien que pour des sphères, cylindres et polyèdres en 3D [65, 19, 62, 9, 70, 12, 13]. Les travaux sur ce sujet montrent que la fonction de densité de probabilité (pdf) des forces normales présente deux évolutions caractéristiques en-deçà et au-delà de la force normale moyenne $\langle f_n \rangle$. Les données sur les forces faibles regroupées par les différents auteurs indiquent une forte sensibilité de la pdf aux détails micro-mécaniques.

La fonction de densité de probabilité (pdf) des forces normales (normalisées par la force moyenne) $\langle f_n \rangle$ est représenté FIG.3.9 en échelles log-linéaire et log-log pour descente niveaux de déformations importants (les données sont cumulées sur plusieurs pas

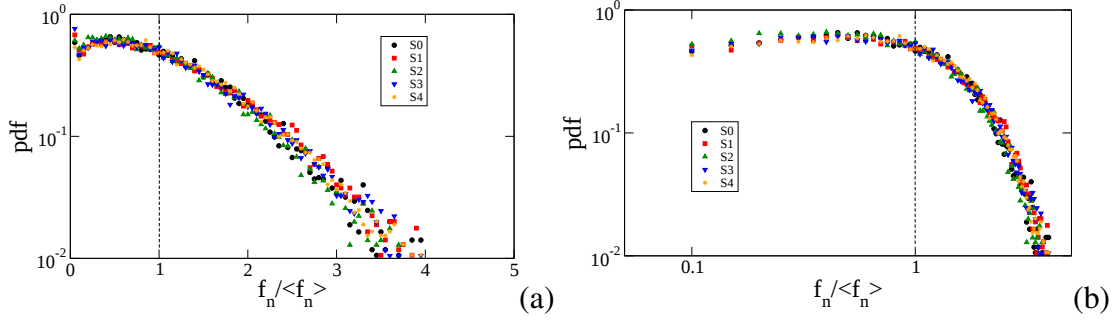


FIGURE 3.9 – Fonction de densité de probabilité des forces normales f_n , normalisées par la force moyenne $\langle f_n \rangle$ en log-linéaire (a) et log-log (b) représentées pour les différentes décompositions.

de temps de l'état résiduel) pour toutes les simulations. Comme observé dans la littérature [65, 19, 62, 9, 70, 12, 13], le nombre de forces fortes $\langle f_n \rangle$ décroît exponentiellement alors que le nombre de forces faibles varie comme une fonction puissance :

$$P(f_n) \propto \begin{cases} e^{-\alpha(1-f_n/\langle f_n \rangle)} & \text{pour } f_n > \langle f_n \rangle \\ (f_n/\langle f_n \rangle)^\beta & \text{pour } f_n < \langle f_n \rangle \end{cases} \quad (3.7)$$

où α et β sont les exposants. Comme on peut le constater, les pdf des forces pour les différents échantillons se rejoignent sur une même courbe donnée par (3.7). Cela montre que les caractéristiques microscopiques des chaînes de distribution de forces dans le milieu granulaire ne sont pas affectées par le nombre de sous-domaines utilisé pour la parallélisation du solveur de contact.

L'organisation du réseau de forces de contact a été analysé par Radjaï et al. aux moyens de simulations en dynamique des contacts pour des échantillons de disques et de sphères [67]. Le résultat fondamental de cette étude est que le réseau de contact peut être décomposé de façon claire en deux sous-réseaux nommés réseaux “faible” et “fort” possédant des propriétés mécaniques distinctes et complémentaires. Plus précisément, les plus fortes chaînes de forces sont soutenues par de nombreux contacts faibles, de sorte que la résistance au cisaillement est presque totalement prise en charge par le réseau de contacts forts. Cela est bien illustré FIG.3.6 où les forces fortes sont reportées en noir et les forces faibles en rouge. Nous constatons que les forces fortes sont majoritairement verticales (suivant la direction de cisaillement principale) alors que les forces faibles sont, en moyenne, perpendiculaires à la direction de cisaillement. Les résultats fournissent une réponse quantitative de bonne qualité vis-à-vis de ces caractéristiques, sans influence marquée du nombre de sous-domaines.

2 Performance de la méthode NSCDD en implémentation séquentielle

Dans cette section nous nous proposons d'estimer le gain temporel optimal qu'il serait possible d'obtenir d'une implémentation avec architecture à mémoire distribuée. Le solveur NSCDD s'insère dans un schéma global de résolution temporelle d'un système multi-contact impliquant, outre la détermination des impulsions de contact à tout pas de temps, l'actualisation des vitesses et positions des particules et l'identification des particules en vis-à-vis. Le gain en temps de calcul attendu d'une approche de décomposition de domaine sur la simulation d'un processus complexe doit s'analyser au regard des différentes tâches accomplies par le simulateur. Dans une première sous-section, nous présentons l'implémentation discutée avant d'analyser les tendances numériques de la méthode de décomposition de domaine NSCDD.

2.1 Implémentation séquentielle multi-domaines

Une implémentation séquentielle multi-domaines de l'algorithme NSCDD est mise en œuvre dans la plateforme de calcul LMG90 afin d'étudier l'influence du partitionnement en sous-domaines sur l'essai biaxial présenté ci-dessus. Pour ce faire, la base de donnée séquentielle est dupliquée, autant de fois que de sous-domaines considérés, afin de simuler le comportement d'une simulation multi-processeur. Cette démarche, non optimale en terme de place mémoire, permet de mettre en œuvre la méthode NSCDD sans les difficultés d'implémentation inhérentes aux échanges de messages associés à MPI, tout en identifiant les coûts des différentes phases de calcul et celles les plus intéressantes à paralléliser. Cette approche permet de séparer les problématiques de validation de la méthode sur la physique des milieux granulaires (étude ci-dessus) et d'implémentation avec échanges de messages (MPI).

Pour la simulation de l'essai biaxial nous avons choisi $n_{GS} = 1$ (cf. Algorithme 2), ce qui signifie qu'une itération NLGS dans les sous-domaines est toujours suivie d'une résolution d'interface, comme cela découle naturellement de l'étude menée par [40] sur l'influence du paramètre n_{GS} sur la convergence de l'algorithme NSCDD.

Le temps de simulation cumulé et les prises de temps pour les principales étapes de l'algorithme NSCDD, pour les échantillons $S0$, $S2$ et $S4$ sont donnés Table 3.1, pour l'essai biaxial, et réalisé jusqu'à $250 \cdot 10^3$ pas de temps.

Les différentes étapes sont surlignées en :

- blanc : étapes génériques de l'algorithme NSCD pouvant être parallélisées,
- gris-clair : étapes induites par la méthode de décomposition de domaine pouvant être parallélisées (routines intermédiaires entre les étapes génériques NSCD et les étapes spécifiques à la méthode NSCDD).
- gris-foncé : étapes de la méthode NSCDD devant être réalisées séquentiellement (si un schéma de communication centralisé est présumé) et impliquant des échanges de messages.

Main stages/Samples	S0		S2		S4	
	%	Elapsed time	%	Elapsed time	%	Elapsed time
Preprocessing						
Domain partitioning and rough detection	2 %	$4 \cdot 10^3 s$	2 %	$4 \cdot 10^3 s$	2 %	$5 \cdot 10^3 s$
Fine detection	5 %	$14 \cdot 10^3 s$	6 %	$14 \cdot 10^3 s$	8 %	$19 \cdot 10^3 s$
NLGS preprocessing	32 %	$83 \cdot 10^3 s$	25 %	$57 \cdot 10^3 s$	16 %	$41 \cdot 10^3 s$
NSCDD iterations						
Compute $\bar{v}_E^d(F_\Gamma)$	0 %	$0 \cdot 10^3 s$	4 %	$9 \cdot 10^3 s$	7 %	$17 \cdot 10^3 s$
NLGS iterations	50 %	$131 \cdot 10^3 s$	42 %	$101 \cdot 10^3 s$	40 %	$100 \cdot 10^3 s$
Compute $A_{\Gamma E} \bar{V}_E$	0 %	$0 \cdot 10^3 s$	9 %	$21 \cdot 10^3 s$	13 %	$33 \cdot 10^3 s$
Interface problem	0 %	$0 \cdot 10^3 s$	1 %	$2 \cdot 10^3 s$	2 %	$4 \cdot 10^3 s$
Check convergence	1 %	$2 \cdot 10^3 s$	1 %	$1 \cdot 10^3 s$	1 %	$1 \cdot 10^3 s$
Updates and outputs						
Update positions	9 %	$23 \cdot 10^3 s$	9 %	$21 \cdot 10^3 s$	10 %	$26 \cdot 10^3 s$
Write files	2 %	$6 \cdot 10^3 s$	2 %	$5 \cdot 10^3 s$	2 %	$5 \cdot 10^3 s$
Total	100 %	$262 \cdot 10^3 s$	100 %	$235 \cdot 10^3 s$	100 %	$251 \cdot 10^3 s$

TABLE 3.1 – Pourcentage et temps de simulation des principales étapes de l’algorithme NSCDD pour les différents échantillons S0, S2 et S4.

2.2 Analyse des coûts par étape de calcul

“Domain partitioning and rough detection” (cf Table 3.1). Comme présenté, le partitionnement en sous-domaines se fonde sur le graphe de contacts de l’échantillon. Plus précisément, les contacts potentiels sont ceux détectés grossièrement à l’aide d’une méthode des boîtes nommée “rough detection”. Le temps écoulé pour les différentes décompositions est du même ordre de grandeur, une augmentation modérée est cependant observée pour S4. Dans nos simulations cette étape est réalisée tous les 10 pas de temps, ce qui mène à une faible contribution au temps de simulation total.

	S0	S1	S2	S3	S4
Nombre total d’itérations NSCDD	$164 \cdot 10^5$	$164 \cdot 10^5$	$164 \cdot 10^5$	$166 \cdot 10^5$	$166 \cdot 10^5$
Nombre de corps d’interface	0	117	104	207	227
Nombre de $W_{\alpha\beta}$	$418 \cdot 10^3$	$380 \cdot 10^3$	$341 \cdot 10^3$	$366 \cdot 10^3$	$303 \cdot 10^3$

TABLE 3.2 – Nombre total d’itérations NSCDD, moyenne du nombre de corps d’interface et de bocks extra-diagonaux de l’opérateur de Delassus ($W_{\alpha\beta}$) sur $250 \cdot 10^3$ pas de temps pour les cas S0, S1, S2, S3 et S4.

“*Fine detection*” et “*Update positions*”. L’augmentation du temps de calcul associé à ces étapes découle du nombre de particules de l’échantillon, qui augmente avec le nombre de sous-domaines (n_{sd}) du fait de la duplication des corps d’interface, comme illustré au tableau TAB.3.2.

“*NLGS preprocessing*”. Cette routine stocke tous les termes extra-diagonaux de la matrice de Delassus ($W_{\alpha\beta}$, $\alpha \neq \beta$). Les temps associés décroissent avec le nombre de sous-domaines. En effet, la duplication des corps d’interface parmi les sous-domaines interconnectés réduit le nombre de contacts adjacents (et donc le nombre de $W_{\alpha\beta}$, cf. TAB.3.2 et FIG.3.10). Ce phénomène apporte aussi une explication au comportement similaire observé pour l’étape “*NLGS iterations*”.

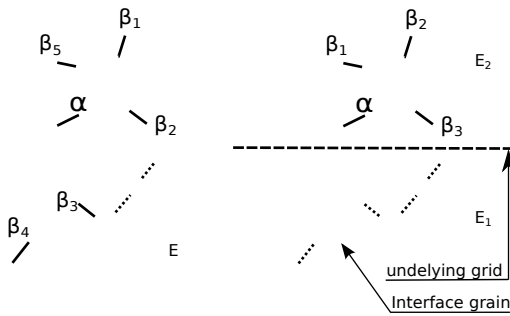


FIGURE 3.10 – Contacts adjacents (β_i) au contact α pour une représentation mono-domaine et bi domaines. Le contact α a 5 contacts adjacents en mono-domaine. Il n’y en a plus que 3 dans le sous-domaine supérieur si α est associé à un grain d’interface.

“*Compute $\bar{v}_E^d(F_\Gamma)$* ” et “*Compute $A_{\Gamma E} \bar{V}_E$* ”. Comme attendu, le temps de calcul croît régulièrement en fonction de la taille du problème d’interface.

“*Check Convergence*”. Un temps de calcul similaire est observé pour les différentes décompositions.

Les résultats numériques montrent que les étapes coûteuses en temps de calcul sont celles pouvant être parallélisées, alors que les étapes séquentielles ne représentent au plus que 5% du temps de simulation total de notre étude. De plus, et y compris pour une implémentation Séquentielle Multi-domaines, le temps de restitution peut être réduit pour une version sous structurée en comparaison d’une version générique séquentielle, malgré l’accroissement de la taille de l’interface (en termes d’inconnues et d’équations). Cela est notamment dû à la décroissance simultanée de la taille de W (de $418 \cdot 10^3$ à $303 \cdot 10^3$ $W_{\alpha\beta}$, cf. TAB.3.2). Cependant, le gain réel qu’il est possible d’obtenir d’une implémentation à mémoire distribuée *multi-processing* devrait tenir compte des surcoût potentiellement importants des échanges MPI entre processeurs.

Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons cherché à valider l'emploi de la méthode NSCDD (plus largement des méthodes de décomposition de domaine) sur la base de la physique des milieux granulaires denses. Bien que les réseaux d'efforts et les cartographies des vitesses obtenus pour les différentes décompositions présentent des différences marquées, nous avons montré que le comportement global et micro-mécanique de l'échantillon granulaire sous chargement biaxial est correctement représenté, de façon *unique* d'un point de vue *statistique*.

Afin de séparer les problématiques d'implémentation et de validation, une méthode séquentielle multi-domaines est mise en œuvre, permettant d'étudier les gains à attendre d'une implémentation distribuée avec échange de message. Un profilage précis des temps de calcul passés dans les différentes étapes de l'algorithme permet de montrer que les étapes coûteuses en temps de calcul sont celles pouvant être parallélisées, alors que les étapes séquentielles ne représentent au plus que 5% du temps de simulation total de l'étude ci-dessus. L'inconnue majeure, à cette étape de nos travaux, reste le coût des échanges de messages entre processus intervenants dans le cadre d'une implémentation en mémoire distribuée.

Chapitre 4

Structure algorithmique en mémoire distribuée

Dans ce quatrième chapitre, l'implémentation des méthodes NSCDD et Schwarz-NSCD, dans le logiciel LMGC90, est détaillée. La détection des contacts, spécifique aux méthodes DEM, est repensée en terme de parallélisation, et deux schémas de communication inter-processus, dédiés à la résolution de la dynamique sous-structurée au contact, sont discutés.

Sommaire

1	Logiciel de calcul LMGC90 et stratégie de parallélisation	78
1.1	Principales étapes d'un algorithme de dynamique des contacts . . .	79
1.2	Stratégies de parallélisation et LMGC90	80
2	Détection des contacts	82
2.1	Partitionnement basé sur les contacts grossiers vs partitionnement basé sur les contacts fins	83
2.2	Stratégies de partitionnement envisageables	85
3	Schémas de communication inter-processus	87
3.1	Schémas de communication <i>centralisé</i> (CCS) et <i>décentralisé</i> (DCS)	87
3.2	Comparaison des deux schémas	93

1 Logiciel de calcul LMGC90 et stratégie de parallélisation

La plate-forme de calcul LMGC90 [22] est un logiciel initié par M. Jean [43], puis réécrit par M. Jean et F. Dubois, sur la base des travaux théoriques communs de J.J. Moreau et M. Jean [44, 58, 60]. “Logiciel de Mécanique Gérant le Contact”, LMGC90 est depuis ses origines un cadre de développement étroitement relié à la recherche.

Ce logiciel est historiquement dédié aux méthodes de simulation par éléments discrets, en particulier pour les matériaux granulaires. Début 2013 les projets en cours de développement concernent entre autres, la fracture des massifs rocheux, la sollicitation de bâtiments sous séisme, la fissuration des milieux granulaires et des solides déformables, la modélisation des matériaux biologiques (poreux) et les écoulements multi-physiques. La diversité des modélisations mises en jeu implique une structure relativement complexe et en perpétuelle évolution de ce code de calcul. Une implémentation efficace de la dynamique des contacts (qui est et reste au cœur de ce projet logiciel) suppose une forte coloration du code pour le calcul intensif. Cette nécessité de performance cumulée à une large variété d’utilisation permet de comprendre les différents niveaux de langages mis en jeu. LMGC90 exploite en effet différents langages de programmation afin de répondre à deux objectifs : souplesse d’utilisation et efficacité. Cela se traduit par :

- un cœur de calcul, nommé *Core*, codé en Fortran (90 ou ultérieur selon les degrés de disponibilité des nouvelles normes) assurant une bonne rapidité d’exécution,
- une interface utilisateur Python permettant la construction modulable de fichiers de commandes adaptés aux besoins des utilisateurs,
- un ensemble de procédures C++ d’appel aux fonctions Fortran par les fichiers de commande Python (via l’ISO C binding) nommé *ChiPy*.

La multitude de type de corps — disque, jonc, ligne, polygone en 2D, sphère, cylindre, plan, polyèdre en 3D (pour ne considérer que les objets rigides !) — semble fournir une application typique de la programmation orientée objet avec polymorphisme dynamique. Cependant, les choix effectués par les développeurs de LMGC90 se justifient par la volonté de privilégier l’efficacité vis-à-vis d’une certaine esthétique de programmation. Cette volonté d’optimiser l’implémentation du code, en faisant appel à des bibliothèques externes performantes (BLAS, LAPACK, MUMPS, MATLIB) fait de ce logiciel une référence pour le calcul par éléments discrets complexes.

De façon générale, pour les applications visées en dynamique granulaire, les coûts de calcul et la durée des simulations sont élevés et relèvent de la famille du calcul hautes performances. Ces caractéristiques justifient pleinement les approches de parallélisation. Celles-ci ont un historique étendu, dont nous nous proposons de faire par la suite un bref, et sans doute incomplet, tour d’horizon. Pour ce faire, il est utile de préciser les principales étapes d’un algorithme de dynamique des contacts, tel que mis en œuvre dans LMGC90.

1.1 Principales étapes d'un algorithme de dynamique des contacts

L'algorithme NSCD sur un pas de temps est de type prédicteur-correcteur. Il peut être décomposé en trois étapes principales (illustrées FIG.4.1), comme suit :

- calcul d'une configuration x_{t_c} ($t_c \in]t_i, t_{i+1}]$) dans laquelle les contacts entre corps vont être détectés et pour laquelle on évalue les opérateurs H , H^T (cf. (1.13) et (1.9));
- évaluation de la vitesse libre aux contacts $v^d = H^T M^{-1} R^d$ et calcul des impulsions r par la méthode itérative NLGS ;
- calcul des vitesses $V = M^{-1}(R^d + Hr)$ et de la configuration x en fin de pas de temps, et contrôle de la qualité de la solution (e.g. en calculant l'interpénétration résiduelle).

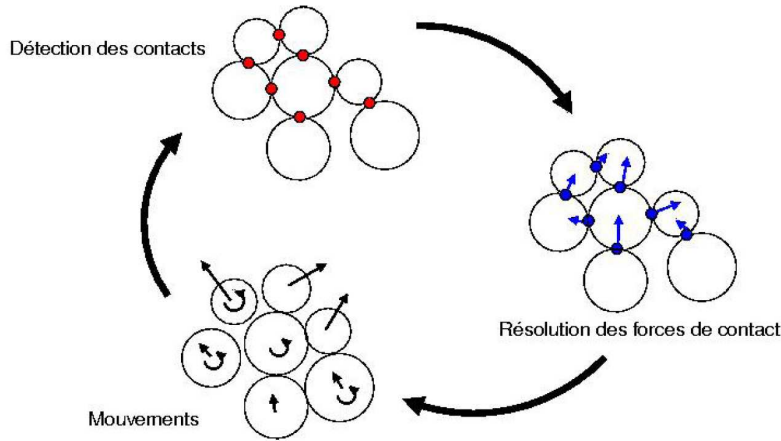


FIGURE 4.1 – Schématisation des trois phases principales de calcul pour une itération NSCD.

Pour une évolution sur $N_{\Delta t}$ pas de temps, on obtient alors l'algorithme ALG.4.

Algorithm 4 Algorithme NSCD

```

for  $i = 1, \dots, N_{\Delta t}$  do
  Détection des contacts
  while (critère de convergence non satisfait) do
    Résolution itérative de :
    
$$\begin{cases} Wr - v = -v^d \\ \mathcal{R}(v, r) = 0 \end{cases}$$

  end while
  Mise à jour des vitesses et positions des corps
end for

```

1.2 Stratégies de parallélisation et LMGC90

Parallélisation OpenMP Une première solution pour permettre une gestion parallèle du code, sur architecture à mémoire partagée, consiste à utiliser des directives OpenMP autour des boucles de calcul. Ainsi les boucles seront réalisées sur plusieurs “threads” simultanément. Cette technique ne nécessite pas de développement lourd et est assez paramétrable. Elle fonctionne comme la technique séquentielle si les opérations effectuées dans la boucle sont découplées.

De cette façon on peut paralléliser la boucle de résolution du contact. Même si les opérations ne sont pas strictement découplées cette technique fonctionne correctement [68].

```

(0) Evaluating all the matrices  $W_{\alpha\beta}$ 
  [
     $k = k + 1$  (NLGS iteration)
    !$OMP PARALLEL PRIVATE (...) SHARED (...) ...
    !$OMP DO ...
    [
       $\alpha = \alpha + 1$  (Contact index)
      (a) Evaluating the right-hand side
      
$$v_{n\,loc}^\alpha = v_{n\,free}^\alpha + \sum_{\beta < \alpha} W_{\alpha\beta} r^{k+1,\beta} + \sum_{\beta > \alpha} W_{\alpha\beta} r^{k,\beta}$$

      (b) Solving the local problem
    ]
    !$OMP ENDDO
    !$OMP END PARALLEL
    Convergence test for  $k = 0 \dots k_{max}$ 
  ]

```

Parallélisation DDM en mémoire partagée (OpenMP). Dans le cadre de la thèse de T.M.P. Hoang [7, 35, 33, 34, 36], la méthode de sous-structuration algébrique présentée CHAP.1 (section SECT.2.2.2) a été implémentée sous la forme d’une parallélisation du solveur de contact via des directives OpenMP. Contrairement à une parallélisation directe de la boucle sur les contacts du paragraphe précédent, la sous-structuration algébrique définit un ordre de parcours des contacts dans différents sous-domaines puis le passage aux interactions d’interface. Avec la localité des données et la synchronisation par l’interface, et pour une décomposition en sous-domaines donnée, les versions séquentielle et parallèle fournissent les mêmes solutions.

Parallélisation DDM en mémoire distribuée (MPI). Dans le cadre de la thèse de D. Iceta [38, 39, 40, 41, 42, 6], dont le présent travail constitue un prolongement, une première approche d’implémentation de décomposition de domaine en mémoire distribuée avec échanges de message MPI (Message Passing Interface [32]) a été réalisée.

Principaux enseignements des précédentes implémentations. La principale limite de cette première implémentation en mémoire distribuée tient aux nombreuses copies de tableaux effectuées de la couche Fortran à la couche Python, dans laquelle les échanges

MPI étaient gérés. Afin de tirer toutes les conclusions de ce travail précurseur, le module DDM actuel est positionné directement dans le *Core Fortran*, même si certains outils du langage Python permettraient de limiter les copies (en passant par des opérations sur des pointeurs de tableaux) tout en maintenant l'architecture précédente.

1.2.1 Structure générale du code parallèle proposé

La parallélisation du code de calcul a été, dès les débuts de ces travaux de thèse, conçue de façon globale, de la détection des contacts aux écritures des fichiers de sortie. Dans l'objectif de paralléliser le plus grand nombre possible d'opérations, il a été décidé, en plus des aspects de parallélisation du solveur (qui reste un point crucial) de rechercher une parallélisation poussée de la phase de détection des contacts entre particules, ainsi que du calcul des vitesses libres par sous-domaine. Afin d'explicitier la structure du programme envisagé, l'algorithme 5 présente les différentes étapes d'une simulation sur $N_{\Delta t}$ pas de temps. Le caractère séquentiel ou parallèle de chaque étape est alors mis en lumière. Les notations sont celles du chapitre 1.

Algorithm 5 Structure de l'algorithme NSCDD parallèle

```

for  $i = 1, \dots, N_{\Delta t}$  do {Boucle sur les pas de temps}
  En séquentiel — Possible nouvelle décomposition en sous-domaine
  En parallèle — Détection des contacts, évaluation des impulsions extérieures données  $R_E^d$  et calcul des vitesses données aux contacts  $v_E^d$ 
  while (critère de convergence non satisfait) do
    Étape 1 : En parallèle pour  $E = 1, \dots, N_{sd}$  :
      Calcul de la projection aux contacts des efforts d'interface  $v_E^\Gamma(F_\Gamma)$ 
      Calcul de des impulsions de contact  $\bar{r}_E$  avec  $n_{GS}$  itérations de Gauss-Seidel sur :

$$\begin{cases} \tilde{W}_E \bar{r}_E - \bar{v}_E = -v_E^d + v_E^\Gamma \\ \mathcal{R}(\bar{v}_E, \bar{r}_E) = 0 \end{cases}$$

      Mise à jour de  $r_E \leftarrow \bar{r}_E$ 
      Calcul de  $\bar{V}_E = M_E^{-1} (H_E \bar{r}_E + R_E^d - A_{\Gamma E}^T F_\Gamma)$ 
    Étape 2 : En séquentiel (peut être partiellement parallélisé) :
      Calcul des multiplicateurs de Lagrange  $\bar{F}_\Gamma$  :

$$X(\bar{F}_\Gamma - F_\Gamma) = \sum_{E=1}^{N_{sd}} A_{\Gamma E} \bar{V}_E$$

      Mise à jour de  $F_\Gamma \leftarrow \bar{F}_\Gamma$ 
  end while
  En parallèle — Évaluation de la vitesse  $V_E(R_E, R_E^d, F_\Gamma)$  et de la position des corps
end for

```

Dans le cas d'une résolution séquentielle du problème d'interface (ce qui par la suite

sera nommé “schéma de communication centralisé” – CCS), cet algorithme peut être représenté schématiquement par la figure 4.2.

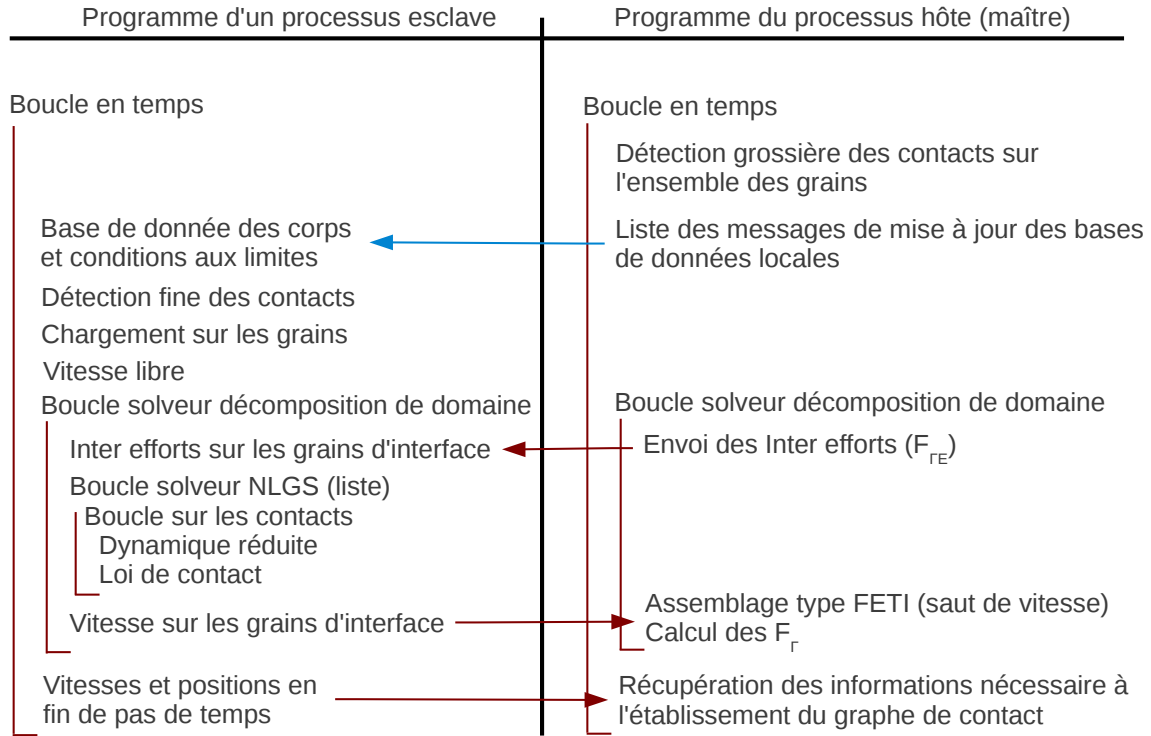


FIGURE 4.2 – Structure de l’algorithme parallèle souhaité, pour une résolution séquentielle du problème d’interface

La base de donnée, pour l’implémentation discutée ici, n’est que partiellement distribuée, dans le sens où chaque processeur possède l’ensemble des caractéristiques des corps, bien qu’il ne soit amené à ne travailler que sur une partie de ceux-ci, du moins pour une série de pas de temps. En effet, des migrations entre corps sont envisageables (et même fréquentes dans le cas des milieux granulaires). Néanmoins, la base de donnée (dynamique) associée aux contacts est entièrement distribuée, seul le sous-domaine ayant à traiter un contact en connaît l’existence et les caractéristiques. Pour des milieux granulaires denses, cette distribution de la base de données des contacts est très importante, car le nombre d’interactions est bien plus conséquent que le nombre de corps.

2 Détection des contacts

En début de pas, les positions et vitesses des corps sont connues. A l’aide de ces données on réalise une prédiction explicite de la configuration de contact x_{t_c} ($t_c \in [t_i, t_{i+1}]$) pour laquelle les contacts et leurs repères locaux doivent être évalués. La détection des

contacts est une tâche coûteuse — sa durée étant directement liée au nombre et à la complexité des formes des corps de l'échantillon. De façon classique, une solution efficace consiste à effectuer la détection en deux étapes ; une détection grossière (qui prédit un trop grand nombre de contacts potentiels, mais à faible coût) suivie d'une phase, nommée détection fine, d'élimination des contacts fictifs et d'évaluation du repère principal pour chaque contact α (opérateurs H_α et H_α^T).

2.1 Partitionnement basé sur les contacts grossiers vs partitionnement basé sur les contacts fins

Une fois la détection (fine ou grossière) réalisée, le graphe d'interaction est constitué de nœuds (les corps) et de segments (les contacts). On peut donc appliquer à ce graphe la méthode de partitionnement duale présentée SECT.2.2.1. Cependant, il n'est pas équivalent de réaliser le partitionnement en sous-domaines à partir du graphe de contact grossier ou fin. Les figures 4.3(a) et 4.3(b) montrent en effet que plusieurs cas pathologiques peuvent survenir dans le cas la première éventualité.

En effet, une fois le domaine partitionné, les données sont distribuées parmi les différents processeurs et la détection fine des contacts est réalisée en parallèle sur chaque base de donnée locale. En particulier, les corps d'interface prédits peuvent finalement ne pas appartenir à l'interface minimale (qui aurait été déterminée en se basant sur le graphe fin de contact).

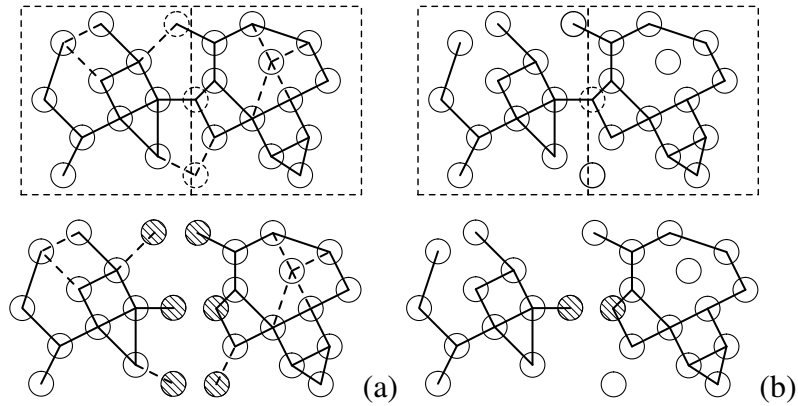


FIGURE 4.3 – Graphes de contacts grossier (a) et fin (b) et leurs partitionnements associés. Les disques hachurés représentent les corps d'interface $m_i > 1$; les lignes en pointillé correspondent aux contacts grossiers éliminés lors de la détection fine.

2.1.1 Étude des cas pathologiques

L'exemple de décomposition représenté figure 4.4 permet d'analyser l'impact de la suppression d'interactions au cours de la détection fine. Les particules référencées de 1 à 3 sur la figure 4.4 résument les trois cas particuliers envisageables.

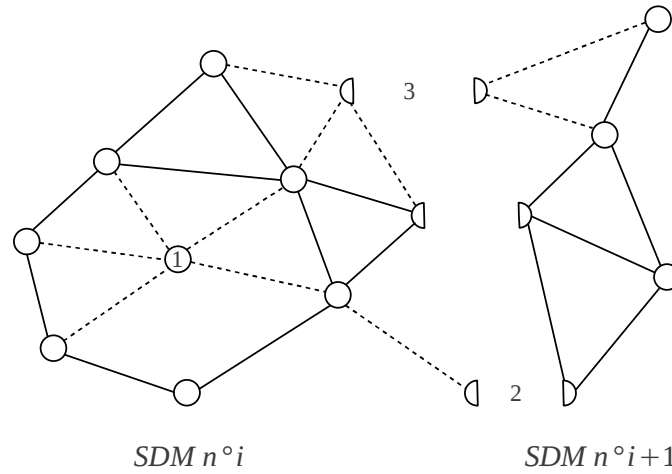


FIGURE 4.4 – Motif décomposé en deux sous-domaines possédant des liens fictifs

- 1 *Neutrino (corps ne supportant aucun contact) interne à un sous-domaine* : ce cas n'est pas problématique, car le traitement des neutrinos choisi consiste, dans tous les cas, à les faire participer au sous-domaine auquel appartient leur centre d'inertie.
- 2 *Demi-neutrino d'interface* : dans le cas d'un partitionnement s'appuyant sur une détection fine réalisée sur l'ensemble des corps, cette particule n'aurait appartenu qu'au sous-domaine $i + 1$. La multiplicité de la particule considérée est donc modifiée par les contacts fictifs détectés avec les particules du sous-domaine i . La conséquence de cette duplication factice est d'augmenter artificiellement la taille du problème d'interface. Cependant, le recollement d'interface de cette particule ne modifie pas, à convergence de la boucle DDM, la nature du problème traité. Dans le cas d'une multiplicité égale à 2 (cas envisagé sur la figure FIG.4.4), on retrouve le problème d'interface discuté CHAP.2 SECT.1.1 (disque chutant sur un plan). Pour une multiplicité supérieure à deux, on retombe dans les cas envisagés pour les particules appartenant à plus de deux sous-domaines.
- 3 *Neutrino d'interface* : comme dans le cas précédent, la multiplicité de la particule est augmentée de façon fictive, entraînant des échanges de message inutiles entre processeurs. Le problème d'interface est résolu exactement pour ce corps en une itération, et est sans effet sur les autres particules des sous-domaines contribuant à l'interface considérée.

Bien qu'augmentant (artificiellement) la taille du problème d'interface, et conduisant à un léger surcoût dans le cas 2, la présence de ces cas particuliers ne modifie pas le problème de référence.

2.2 Stratégies de partitionnement envisageables

Les différentes étapes associées au partitionnement d'un échantillon d'éléments discrets peuvent être résumées comme :

1. détection grossière des contacts ;
2. détection fine des contacts ;
3. création des listes de visibilité des corps (opérateurs B_E) et des listes de corps d'interface (opérateurs $A_{\Gamma E}$) pour chaque sous-domaine ;
4. distribution du résultat du partitionnement.

Les différentes combinaisons envisageables de ces étapes sont donc :

- (1) détection grossière séquentielle $\rightarrow$ (3) partitionnement sur la base du graphe de contact grossier $\rightarrow$ (4) distribution des opérateurs B_E , $A_{\Gamma E}$ pour chaque sous-domaine E ainsi que de la listes de paires de corps candidats au contact $\rightarrow$ (2) détection fine parallèle.

Avantages : détection fine parallélisée (construction distribuée des opérateurs H_E et H_E^T).

Inconvénients : interface non minimale, car basée sur le réseau de contacts grossiers ; distribution (par échange de messages) du résultat de la détection grossière (liste des paires de candidats au contact).

- (1) détection grossière séquentielle $\rightarrow$ (3) partitionnement sur la base du graphe de contact grossier $\rightarrow$ (4) distribution des opérateurs B_E , $A_{\Gamma E}$ pour chaque sous-domaine $E \rightarrow$ (1) détection grossière parallèle $\rightarrow$ (2) détection fine parallèle.

Avantages : permet d'éviter la distribution des résultats de l'étape de détection grossière ; détection fine parallèle.

Inconvénients : détection grossière redondante sur les seuls corps actifs du sous-domaine considéré (en parallèle) ; interface non minimale, car basée sur le réseau de contacts grossier.

- (1) détection grossière séquentielle $\rightarrow$ (2) détection fine séquentielle $\rightarrow$ (3) partitionnement sur la base du graphe de contact fin $\rightarrow$ (4) distribution des opérateurs B_E , $A_{\Gamma E}$ pour chaque sous-domaine E ainsi que de la listes de paires de corps candidats au contact et des opérateurs H_E et H_E^T .

Avantages : interface calculée minimale, car basée sur le réseau de contact fin, ce qui permet de réduire la taille des messages échangés lors des itérations DDM.

Inconvénients : détection grossière et fine séquentielles, potentiellement coûteuses (surtout pour des corps de formes complexes). De plus, les résultats de la détection grossière (liste des paires de candidats/antagonistes) et fine (opérateurs H_E et H_E^T) doivent être distribués par échanges de messages.

- (1) détection grossière séquentielle $\rightarrow$ (2) détection fine séquentielle $\rightarrow$ (3) partitionnement sur la base du graphe de contact fin $\rightarrow$ (4) distribution des opérateurs $B_E, A_{\Gamma E}$ pour chaque sous-domaine E ainsi que de la listes de paires de corps candidats au contact $\rightarrow$ (2) détection fine parallèle.

Avantages : permet d'éviter la répartition du résultat de (2).

Inconvénients : distribution du résultat de (1) ; étape (2) est alors redondante sur les seuls corps actifs du sous-domaine considéré, connaissant la liste de candidats potentiels aux contacts.

- (1) détection grossière séquentielle $\rightarrow$ (2) détection fine séquentielle $\rightarrow$ (3) partitionnement sur la base du graphe de contact fin $\rightarrow$ (4) distribution des opérateurs $B_E, A_{\Gamma E}$ pour chaque sous-domaine $E \rightarrow$ (1) détection grossière parallèle $\rightarrow$ (2) détection fine parallèle.

Avantages : permet d'éviter la répartition des résultats de (1) et (2) ; interface minimale.

Inconvénients : détection fine séquentielle et étapes 1 et 2 refaites sur les seuls corps actifs du sous-domaine considéré (en parallèle).

Combinaison	Parallélisation	Échanges	Interface
$1 \rightarrow 3 \rightarrow 4 \rightarrow 2$	+	-	-
$1 \rightarrow 3 \rightarrow 4 \rightarrow 1 \rightarrow 2$	+	+	-
$1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow 4$	-	- -	+
$1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow 4 \rightarrow 2$	-	-	+
$1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow 4 \rightarrow 1 \rightarrow 2$	-	+	+

TABLE 4.1 – Classification des différentes stratégie de partitionnement suivant les critères de parallélisation des détections grossières et fines, de taille des échanges de messages nécessaires entre processus afin de mettre à jour les bases de données locales et de taille des interfaces.

2.2.1 Choix effectués

Nous avons tout d'abord conçu la phase de partitionnement sous la forme : détection grossière $\rightarrow$ partitionnement $\rightarrow$ échanges $\rightarrow$ détection fine parallèle ($1 \rightarrow 3 \rightarrow 4 \rightarrow 2$). On constatera au chapitre suivant que cette stratégie est bien adaptée au cas des milieux granulaires denses et quasi-statiques, mais que, dans le cas d'écoulements dynamiques avec un coût faible du solveur de contact, la phase de partitionnement (et surtout de distribution des bases de données et de la liste des contacts grossiers) limite alors les performances de la méthode. Dans ce cas de figure, la solution ($1 \rightarrow 3 \rightarrow 4 \rightarrow 1 \rightarrow 2$) semble alors être un bon compromis. Il est à remarquer qu'une automatisation de la décomposition, via un partitionneur de graphes tel que ParMETIS [46], ne modifie pas les différentes possibilités

indiquées ici. Dans les exemples, notamment au chapitre suivant, la première approche est celle qui sera utilisée.

3 Schémas de communication inter-processus

La formulation du problème d'interface en terme d'interface globale Γ et de sous-domaines E s'écrit,

$$X \cdot \Delta F_\Gamma = \sum_{E=1}^{N_{sd}} A_{\Gamma E} \cdot \bar{V}_E \quad (4.1)$$

avec $X = \sum_{E=1}^{N_{sd}} A_{\Gamma E} \cdot \tilde{M}_E^{-1} \cdot A_{\Gamma E}^T$. Ce problème d'interface étant (potentiellement) résolu un grand nombre de fois par pas de temps (cf. ALG.2), il est nécessaire d'en optimiser la résolution ainsi que les échanges de messages associés. Cette optimisation est l'objectif des sections suivantes.

3.1 Schémas de communication *centralisé* (CCS) et *décentralisé* (DCS)

La résolution du problème d'interface étant à réaliser à chaque itération NSCDD, il est crucial d'avoir une formulation algorithmique minimisant les temps d'échange entre processus, afin d'obtenir une parallélisation de qualité de la méthode. Pour ce faire on peut chercher à réduire la taille de chaque message entre processus, c'est par exemple le cas si le partitionnement est basé sur la détection fine et définit une interface minimale entre sous-domaines, comme indiqué à la section précédente. De plus, pour une taille donnée de messages, nous allons voir que la structuration des échanges est un facteur de premier plan.

3.1.1 Schéma de communication *centralisé* – CCS

Une première approche consiste à interpréter le problème d'interface NSCDD comme un système linéaire global, liant l'ensemble des sous-domaines de la simulation. La construction d'un tel système nécessite alors des communications telles qu'un sous-domaine particulier (hôte) centralise l'ensemble des sauts d'interface et mette à jour les multiplicateurs F_Γ . En terme d'implémentation avec échange de messages, cette vision donne lieu à un schéma de communication de type *maître/esclave*. Pour ce schéma de communication, la figure FIG.4.5 présente la structure algorithmique globale de la méthode NSCDD. Les différentes étapes de résolution de l'équation (4.1) (échanges inclus) peuvent être synthétisées comme suit :

1. Le processus *maître* (ou *hôte*) reçoit des processus *esclaves* les vecteurs $B_{\Gamma E} \cdot V_E$, avec $B_{\Gamma E}$ une matrice booléenne (non-signée) sélectionnant parmi les vitesses V_E celles contribuant à l'interface locale Γ_E (restriction de l'interface globale Γ à la frontière du sous-domaine E).

2. Le processus *hôte* assemble les contributions des différents sous-domaines dans le vecteur des sauts de vitesse de l'interface globale Γ ,

$$\sum_{E=1}^{N_{sd}} A_{\Gamma E} \cdot \bar{V}_E = \sum_{E=1}^{N_{sd}} A_{\Gamma E} \cdot B_{\Gamma E} \cdot \bar{V}_E, \quad (4.2)$$

avec $A_{\Gamma E}$ une matrice booléenne signée assurant l'assemblage des sauts de vitesses de l'interface globale à partir des contributions de l'interface locale Γ_E .

3. Le processus *hôte* détermine la valeur des incréments d'inter-efforts ΔF_Γ , via la résolution du système (4.1).
4. Le processus *hôte* envoie à chaque sous-domaine E la contribution $A_{\Gamma E}^T \cdot \Delta F_\Gamma$ lui étant associée.
5. Les processus *esclaves* intègrent les inter-efforts dans le vecteur des efforts extérieurs,

$$F_E^{ext} = F_E^{ext} + B_{\Gamma E}^T \cdot A_{\Gamma E}^T \cdot \Delta F_\Gamma. \quad (4.3)$$

Ce schéma de résolution du problème d'interface met en évidence trois niveaux de structuration : les sous-domaines, les interfaces locales (définies comme les restrictions de l'interface globale à la frontière des différents sous-domaines) et l'interface globale. Le passage d'une structure à l'autre est alors assuré par les matrices d'assemblage / désassemblage $B_{\Gamma E}$, $A_{\Gamma E}$ et $A_{\Gamma E} (= A_{\Gamma E} \cdot B_{\Gamma E})$.

Ce schéma de communication atteint rapidement ses limites lorsque le nombre de sous-domaines et la taille de l'interface augmentent. Ce phénomène est particulièrement net pour de larges assemblées granulaires. Pour les cas 2D ou la modélisation de maçonnerie 3D, la durée des échanges entre processeurs reste acceptable (pour un nombre réduit de sous-domaines), car la taille des messages reste modérée. Cependant ce type de communication ne permet pas d'obtenir une *extensibilité* forte de la méthode. Pour s'affranchir de ces limites un second schéma de communication est introduit.

3.1.2 Schéma de communication décentralisé (DCS) & topologie quelconque

Nous allons construire un schéma de communication décentralisé, où la résolution du problème d'interface est effectuée à l'échelle d'un sous-domaine, et basé sur une connectivité *ad hoc*.

Problème d'interface local et intérêt de l'approche L'idée de ce schéma de communication consiste à s'affranchir du choix d'un processus *hôte* ayant pour rôle de centraliser toutes les informations nécessaires pour résoudre le problème d'interface, ainsi que d'en redistribuer le résultat. Différents schémas de communication existent dans la littérature afin de réaliser cet objectif, la plupart s'appuyant sur une topologie, par exemple une topologie cartésienne. En dynamique du contact, la taille des corps en présence (possibilité de "gros objets" traversant l'échantillon, de mur (cf. FIG.4.9), etc.), la redistribution permanente des interactions entre corps, etc., rend illusoire la définition d'une topologie de communication simple et permanente sur la totalité d'une simulation.

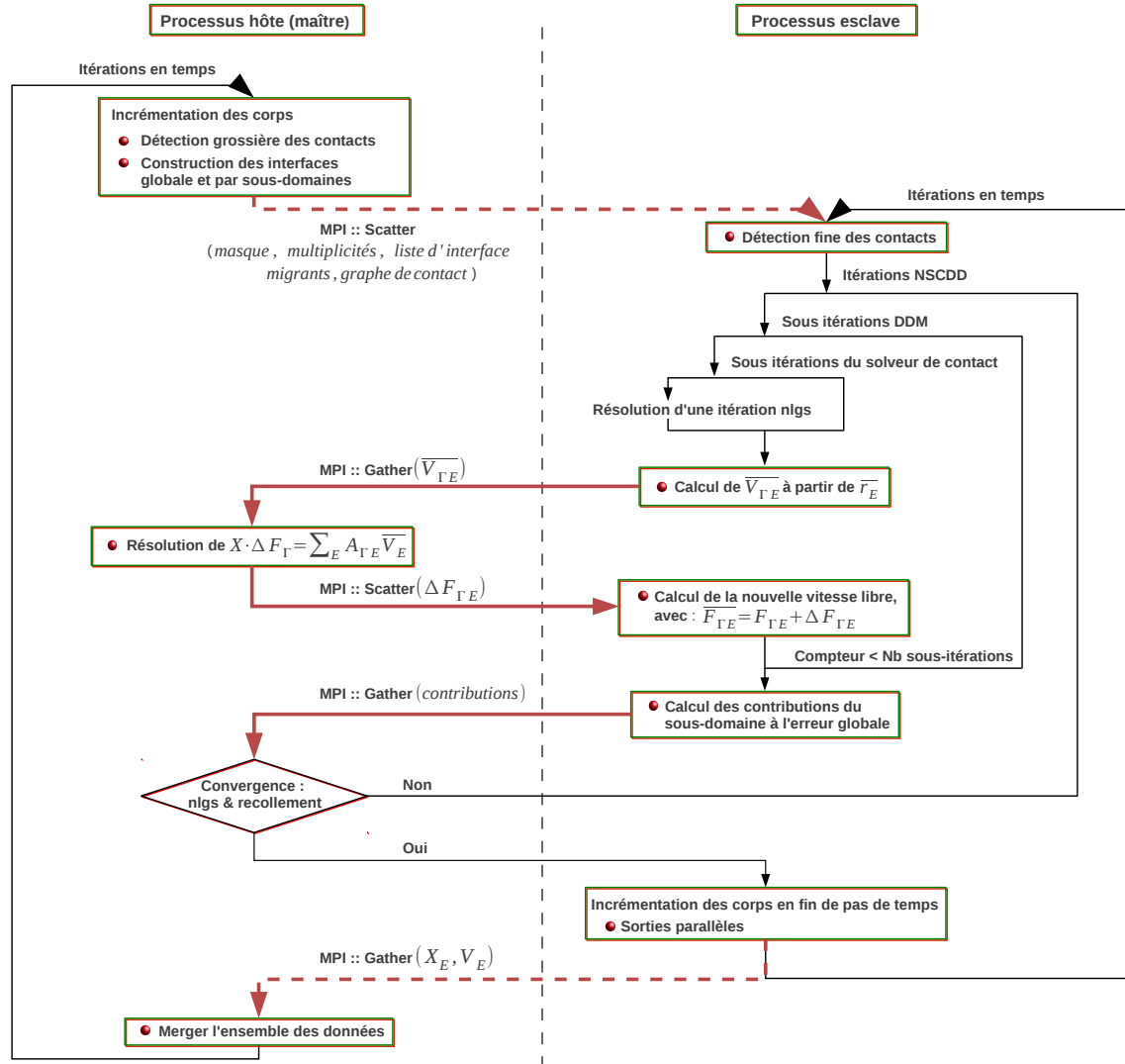


FIGURE 4.5 – Diagramme de résolution NSCDD avec schéma de communication maître/esclave pour la répartition en sous-domaines et la résolution du problème d'interface.

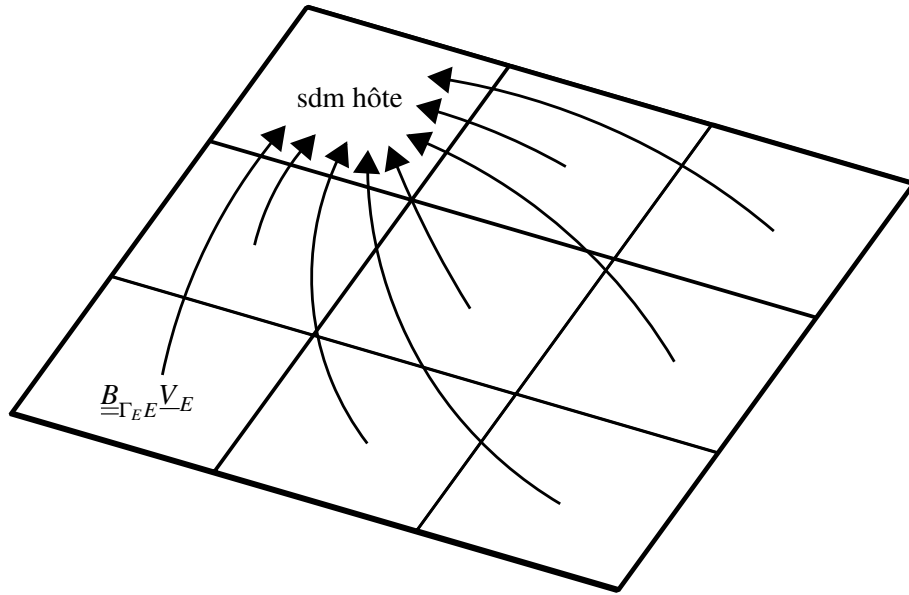


FIGURE 4.6 – Représentation des échanges de messages préparatoires à la résolution du problème d'interface global (équation (4.1)), pour un schéma de communication centralisé.

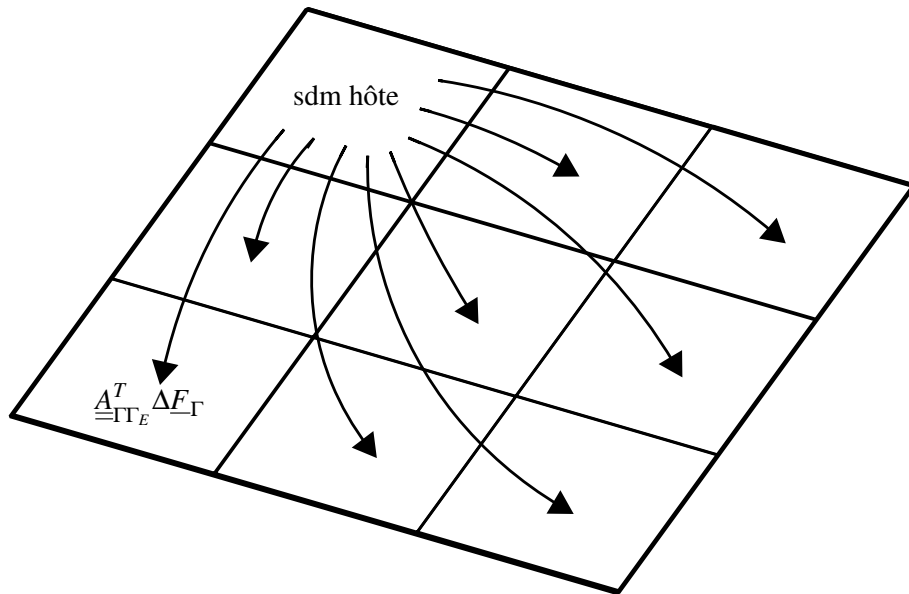


FIGURE 4.7 – Représentation des échanges de messages permettant de répartir le résultat du problème d'interface global aux différents processus *esclaves*, pour un schéma de communication centralisé.

L'opérateur d'interface X étant constitué de blocs indépendants et la structure de chaque bloc étant explicitement connue (cf. section 1.2.3), chaque processus E^* possède la base de donnée nécessaire à la construction de l'opérateur d'interface local $X_{\Gamma_{E^*}}$.

Pour chaque sous-domaine E^* , nous pouvons écrire le problème d'interface ne faisant intervenir que les multiplicateurs de Lagrange associés à l'interface locale Γ_{E^*} sous la forme,

$$\sum_{E=1}^{N_{sd}} A_{\Gamma_{E^*}E} \tilde{M}_E^{-1} A_{\Gamma_{E^*}E}^T \cdot \Delta F_{\Gamma_{E^*}} = \sum_{E=1}^{N_{sd}} A_{\Gamma_{E^*}E} \bar{V}_E \quad (4.4)$$

avec $A_{\Gamma_{E^*}E}$ une matrice booléenne signée assemblant les éléments du sous-domaine E intervenant dans Γ_{E^*} . La précédente sommation est formellement effectuée sur tous les sous-domaines même si, pour une particule donnée, seuls les sous-domaines dans lesquels la particule est affectée (sous-domaines voisins) doivent être considérés. De plus, comme chaque sous-domaine détermine entièrement les inter-efforts nécessaires pour mettre à jour les efforts extérieurs généralisés F_E^{ext} , une nouvelle itération NSCDD peut débuter sans autre échange.

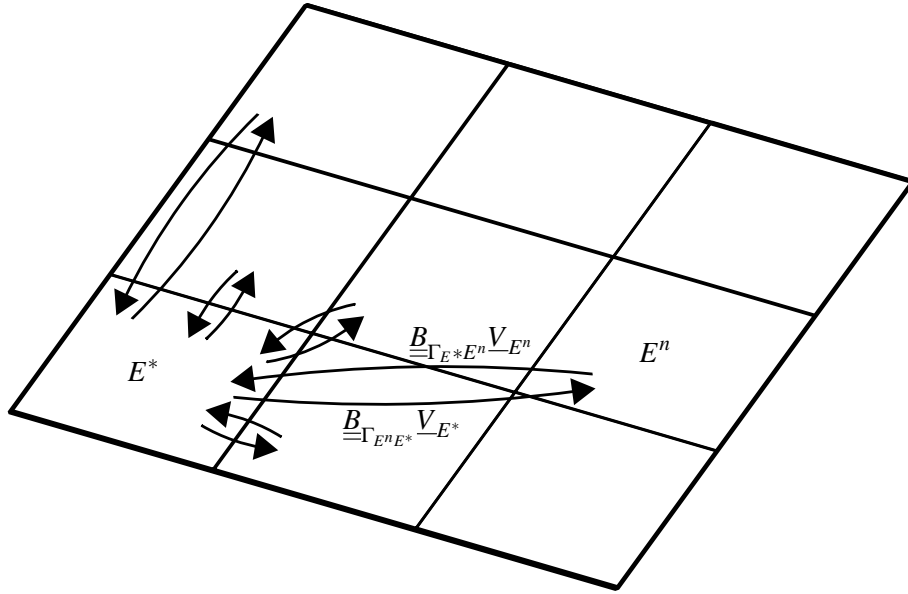


FIGURE 4.8 – Représentation des échanges de messages, faisant intervenir le sous-domaine E^* , préparatoires à la résolution des problèmes sur les interfaces locales (équation (4.4)).

Les principaux intérêts de ce schéma de communication sont de :

1. supprimer les goulots d'étranglement constitués par la réception puis l'envoi par un processus *hôte* de l'ensemble des données nécessaires et des résultats du problème d'interface global,
2. diminuer la taille des problèmes de recollement à résoudre,
3. supprimer les communications servant à distribuer les multiplicateurs de Lagrange,

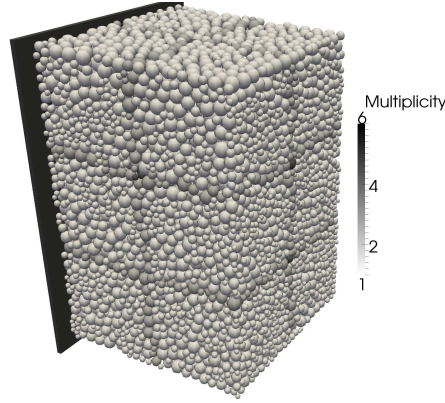


FIGURE 4.9 – Exemple d’un mur rigide supportant des contacts distants (sur une face d’un échantillon de 16000 sphères décomposé en 12 sous-domaines), impliqué dans le problème d’interface local de six sous-domaines.

4. permettre l’*extensibilité* forte de la méthode.

Équivalence d’un problème de recollement global et de la somme pondérée des problèmes locaux Remarquons que, par construction, $\cup \Gamma_E = \Gamma$. Cependant, le vecteur des multiplicateurs de Lagrange pour l’interface globale F_Γ n’est pas l’assemblage direct des F_{Γ_E} . La multiplicité des particules associées à chaque lien d’interface doit en effet être prise en compte en fonction de la répartition algébrique choisie. Formellement, ceci revient à une partition de l’unité telle que,

$$\sum_E B_{\Gamma E} D_E B_{\Gamma E}^T = \mathbb{I}_d, \quad (4.5)$$

avec $B_{\Gamma E}$ la matrice booléenne sélectionnant, parmi les éléments du sous-domaine E , ceux contribuant à l’interface Γ . D_E est alors une matrice carrée de dimension $(b * N_E^S, b * N_E^S)$ définie comme,

$$(D_E)_{kl} = \begin{cases} 0 & \text{si } k \neq l \\ 1/m_i & \text{si } k = l \end{cases}, \quad (4.6)$$

avec i l’indice d’une particule (de multiplicité m_i) dans la numérotation locale du sous-domaine E ; $b = 2 * (D - 1)$ pour des problèmes en dimension $D = 2, 3$ et N_E^S le nombre de particules du sous-domaine E .

On a alors l’expression du vecteur assemblé des multiplicateurs de Lagrange,

$$\Delta F_\Gamma = \sum_E B_{\Gamma E} D_E B_{\Gamma E}^T \Delta F_{\Gamma_E}, \quad (4.7)$$

avec $B_{\Gamma_E E}$ une matrice booléenne sélectionnant, parmi les éléments du sous-domaine E , ceux contribuant à l’interface Γ_E .

3.1.3 Erreur de recollement avec schéma décentralisé

Pour chaque processus E , une contribution à l'erreur de recollement est calculée une fois reçu des processus liés l'ensemble des vitesses des particules contribuant à l'interface locale Γ_E . Les critères envisagés section précédente se réécrivent donc comme une somme des contributions de chaque processus :

- Critère sur la stabilité du réseau des inter-efforts (c.f. section 2.2.3 du chapitre 1),

$$Z_\Gamma = \frac{\sum_E \left[\left(D_E B_{\Gamma_E E}^T \Delta F_{\Gamma_E} \right)^T \left(B_{\Gamma_E E}^T \Delta F_{\Gamma_E} \right) \right]}{\sum_E \left[\left(D_E B_{\Gamma_E E}^T \bar{F}_{\Gamma_E} \right)^T \left(B_{\Gamma_E E}^T \bar{F}_{\Gamma_E} \right) \right]} \leq \zeta, \quad (4.8)$$

- Critère d'erreur en énergie cinétique (c.f. section 1.3 du chapitre 2),

$$\Delta I_\Gamma = \frac{\sum_{E^*} \Delta I_\Gamma^{E^*}}{n_\Gamma^E} \leq \zeta, \quad (4.9)$$

avec :

$$\Delta I_\Gamma^{E^*} = \frac{1}{2} \left(D_{E^*} B_{\Gamma_{E^*} E^*}^T \sum_{E=1}^{N_{sd}} A_{\Gamma_{E^*} E^* E} V_E \right)^T \tilde{M}_{E^*} \left(B_{\Gamma_{E^*} E^*}^T \sum_{E=1}^{N_{sd}} A_{\Gamma_{E^*} E^* E} V_E \right).$$

3.2 Comparaison des deux schémas

Les performances des deux schémas de communication sont, dans un premier temps, étudiées sur deux échantillons granulaires de 6750 et 55000 sphères en compression isotrope, initialement disposées à l'aide d'un algorithme de minimisation du potentiel gravitationnel, sur une lame de calcul comportant 48 cœurs. Dans un second temps, on vérifie et précise les performances obtenues sur une plateforme de calcul haute performance.

3.2.1 Compactage d'un échantillon de 6750 sphères – AMD 48 cœurs

Nous allons étudier l'influence du schéma de communication choisi sur une simulation de compression isotrope d'un échantillon de 6750, que l'on peut considérer comme un échantillon de petite taille. Les paramètres numériques communs aux simulations sont :

- nombre de pas de temps : $N_{Time\ Steps} = 5000$,
- durée d'un pas de temps : $\Delta t = 10^{-2} s$,
- effort de chargement : $F_0 = 12 \cdot 10^3 N$,
- fréquence de la répartition en sous-domaines : $Freq_{Repart} = 10\ Time\ Steps$,
- fréquence d'écriture des fichiers de sortie : $Freq_{Out} = 1000\ Time\ Steps$,
- critère de convergence dans les sous-domaines : $Norm_{Type} = QM/16$,
- tolérance : $Tol = 1.6610^{-4}$.

Schéma de communication centralisé – CCS				
N_{sd}	Découpage : x,y,z	Temps CPU	Efficacité	Échanges de messages
1	$1 \times 1 \times 1$	68 113 s	1	0 %
3	$3 \times 1 \times 1$	42 001 s	0.54	23.1 %
4	$2 \times 2 \times 1$	33 183 s	0.51	29.4 %
8	$2 \times 2 \times 2$	22 395 s	0.38	47.1 %
Schéma de communication décentralisé – DCS				
N_{sd}	Découpage : x,y,z	Temps CPU	Efficacité	Échanges de messages
1	$1 \times 1 \times 1$	51 007 s	1	0 %
3	$3 \times 1 \times 1$	28 144 s	0.60	7.5 %
4	$2 \times 2 \times 1$	20 910 s	0.61	8.7 %
8	$2 \times 2 \times 2$	10 818 s	0.59	11.4 %

TABLE 4.2 – Temps CPU sur l’ensemble des 5000 pas de temps, *efficacité* et pourcentage du temps (cumulé sur tous les processus) passé dans les échanges inter-processus nécessaires à la résolution du recollement à l’interface.

Le tableau 4.2 donne alors une première indication du gain qu’il est possible d’obtenir par l’emploi du schéma de communication décentralisé par rapport au schéma centralisé. Dans le cas CCS, l’*efficacité* décroît rapidement en fonction du nombre de processus et le pourcentage de temps passé lors des échanges MPI atteint des valeurs proches de 50% pour 8 processus (égal au nombre de sous-domaines).

Remarque : après vérification, la seule différence pouvant expliquer que le temps CPU ne soit pas identique dans les cas mono-domaine CCS et DCS est relative aux conditions d’utilisation de la machine AMD 48 cœurs au moment où se sont exécutées les simulations : campagne de simulation CCS effectuée deux jours avant celle CCS. Le nombre de processus lancés (par d’autres utilisateurs) était alors plus important pour la première campagne que pour la seconde (donc moins de mémoire cache accessible, etc.). Cela ne met cependant pas en doute la tendance dégagée et la représentativité des efficacités et des pourcentages cumulés de temps passé dans les échanges “in loop”, comme nous allons le voir par la suite.

3.2.2 Compactage d’un échantillon de 55 000 sphères – AMD 48 cœurs

Considérons maintenant, pour une même architecture matérielle, un échantillon de 55 000 sphères soumises à un chargement similaire au cas précédent (compression isotrope), afin d’analyser l’influence de la taille de l’échantillon testé sur les performances respectives des schémas CCS et DCS. La figure 4.10 représente la décomposition en sous-domaines de l’échantillon pour le découpage $2 \times 2 \times 2$. Les paramètres numériques communs aux simulations sont :

- nombre de pas de temps : $N_{Time\ Steps} = 500$,
- durée d’un pas de temps : $\Delta t = 10^{-2}s$,
- effort de chargement : $F_0 = 60\ 10^3 N$,

- fréquence de la répartition en sous-domaines : $Freq_{Repart} = 10Time\ Steps$,
- fréquence d'écriture des fichiers de sortie : $Freq_{Out} = 250Time\ Steps$,
- critère de convergence dans les sous-domaines : $Norm_{Type} = QM/16$,
- tolérance : $Tol = 1.6610^{-4}$.

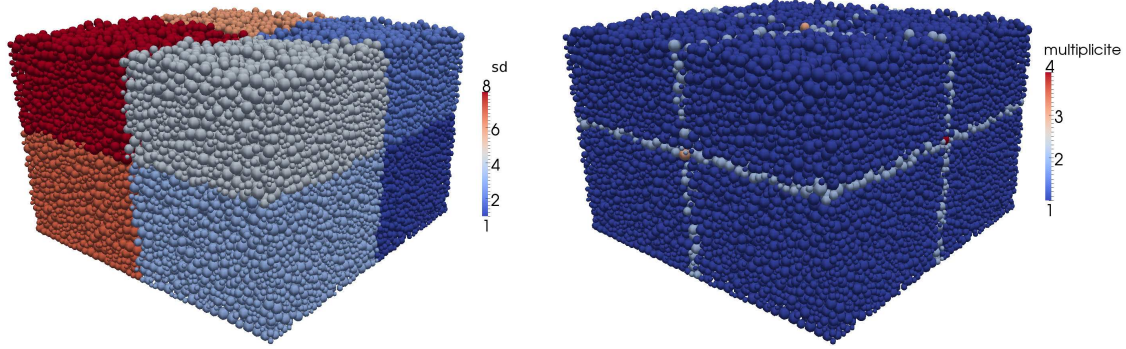


FIGURE 4.10 – Sous-structuration " $2 \times 2 \times 2$ " de l'échantillon et multiplicités des corps - configuration initiale.

Schéma de communication centralisé – CCS				
N_{sd}	Découpage : x,y,z	Temps CPU	Efficacité	Échanges de messages
1	$1 \times 1 \times 1$	7207 s	1	0 %
3	$3 \times 1 \times 1$	5526 s	0.44	31.3 %
4	$2 \times 2 \times 1$	4225 s	0.43	35.6 %
8	$2 \times 2 \times 2$	3985 s	0.23	58.3 %
Schéma de communication décentralisé – DCS				
N_{sd}	Découpage : x,y,z	Temps CPU	Efficacité	Échanges de messages
1	$1 \times 1 \times 1$	7068 s	1	0 %
3	$3 \times 1 \times 1$	3326 s	0.71	14.0 %
4	$2 \times 2 \times 1$	2222 s	0.80	9.1 %
8	$2 \times 2 \times 2$	1454 s	0.61	18.4 %

TABLE 4.3 – Temps CPU sur l'ensemble des 500 pas de temps, *efficacité* et pourcentage du temps (cumulé sur tous les processus) passé dans les échanges inter-processus nécessaires à la résolution du recollement à l'interface.

Le tableau 4.3 confirme les tendances de la section précédente en terme de pourcentage de temps de calcul passé lors des échanges entre processus pour les versions CCS et DCS. L'efficacité en CCS décroît ici encore rapidement en fonction du nombre de processus. Pour le cas DCS, les évolutions de l'*efficacité* et du pourcentage de temps passé lors des échanges entre processus n'est pas monotone vis-à-vis du nombre de processus. Ce phénomène est lié à l'équilibrage de charge entre les différents sous-domaines qui dé-

pend fortement de la grille de partitionnement ($n_x \times n_y \times n_z$) choisie et de la géométrie de l'échantillon considéré.

3.2.3 Échantillon de 16 000 sphères – plateforme de calcul HPC@LR

Afin de compléter l'étude de comparaison des deux schémas de communication proposés (CCS et DCS) nous présentons ici les tendances observées sur la plateforme de calcul HPC@LR. Ce centre de calcul haute performance présente, vis-à-vis de la machine AMD 48 cœurs dont les résultats précédents sont issus, l'avantage de communications optimisées tant du point de vue matériel que logiciel. De même que précédemment, nous étudions le pourcentage de temps pris par les communications MPI (uniquement celles mises en jeu lors de la résolution du problème d'interface, au Tableau TAB.4.4) par rapport au temps total des simulations respectives. Le test est constitué d'un échantillon de 16000 sphères soumises à une compression isotrope, sur 500 pas de temps (FIG. 4.11). Lorsque le nombre de sous-domaines croît pour un problème de taille constante, la taille du problème d'interface croît et la taille des problèmes locaux décroissent.

TABLE 4.4 – Comparaison du pourcentage de temps passé dans les échanges de message pour les versions centralisées (CCS) et décentralisées (DCS) de l'approche NSCDD ; compression isotrope d'un échantillon de 16000 sphères.

N_{sd}	Grille de partitionnement ($n_x \times n_y \times n_z$)	CCS	DCS
2	$1 \times 1 \times 2$	6 %	2 %
4	$1 \times 2 \times 2$	25 %	3 %
8	$2 \times 2 \times 2$	47 %	9 %
12	$2 \times 2 \times 3$	57 %	10 %
16	$2 \times 2 \times 4$	69 %	16 %

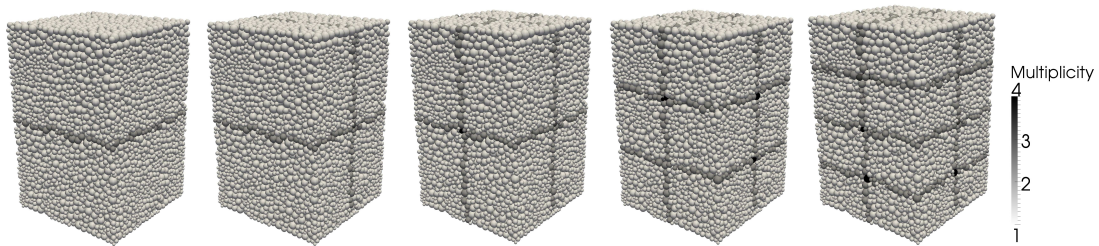


FIGURE 4.11 – Échantillons de 16000 sphères soumises à une compression isotrope ; décompositions en sous-domaines testées.

Les résultats présentés TAB. 4.4 indiquent clairement que les gains attendus de la version décentralisée par rapport à la version centralisée sont conséquents. En effet, les communications décentralisées, relatives à une topologie de communication quelconque, permettent de diminuer drastiquement les temps d'échanges MPI par rapport au schéma

CCS, de sorte que ces temps restent relativement faibles pour des décompositions raisonnables. Une règle heuristique pour les milieux granulaires 3D peut être de choisir un partitionnement tel que chaque sous-domaine contienne au moins 10^3 grains. Dans les sections suivantes, nous avons choisit d'étudier l'*extensibilité* de l'algorithme NSCDD-DCS.

Conclusion

Dans ce chapitre nous avons donné une vue d'ensemble de la problématique de parallélisation d'un code de calcul en dynamique des contacts. En particulier, les travaux menés depuis une dizaine d'années dans la plate forme de calcul LMGC90 ont été brièvement évoqués.

Dans ce travail, nous avons envisagé la parallélisation du code de calcul de façon globale, de la phase de détection des contacts à l'écriture des fichiers de sortie. Nous avons alors détaillé deux points-clés de l'algorithme : la parallélisation de la détection des contacts et les schémas de communication inter-processus lors des itérations DDM.

Différentes possibilités de parallélisation de la détection des contacts, avec leurs implications en terme d'échange de messages afin de mettre à jour les bases de données locales des différents processus, ont été envisagées. Nous verrons dans le chapitre suivant que la stratégie choisie se révèle performante pour des milieux granulaires denses, mais pénalisante lorsque la sollicitation de l'échantillon est très dynamique, du fait de nombreuses réorganisations des particules dans les différents sous-domaines.

La discussion sur les schémas de communication a permis de proposer deux alternatives : un schéma de communication centralisé, avec définition d'un processus *hôte* et impliquant des communications collectives, et un schéma de communication décentralisé, où chaque processus résout un problème d'interface local. Les premiers résultats de performance obtenus indiquent clairement que ce dernier schéma de communication s'avère être le plus performant.

Finalement, les développements algorithmiques présentés permettent d'étudier les performances de la méthode NSCDD sur des exemples de simulation 2D (disques) et 3D (sphères et polyèdres) variés.

Chapitre 5

Application aux milieux granulaires et aux ouvrages maçonnés

Dans ce cinquième chapitre, la méthode NSCDD est mise en œuvre pour simuler le comportement de milieux granulaires et d'ouvrages maçonnés. L'efficacité numérique de la méthode est notamment étudiée en fonction du caractère dynamique des phénomènes physiques simulés.

Sommaire

1	Simulations parallèles de milieux granulaires	100
1.1	Essai biaxial (2D)	101
1.2	Essai triaxial (3D)	102
2	Simulations de compression triaxiale de grande taille	103
2.1	Échantillon considéré	103
2.2	Validation mécanique	106
2.3	Performances pour différents états d'écoulement	109
3	Application aux ouvrages maçonnés	113
3.1	Structure R+1 et partitionnements	115
3.2	Mise sous poids propre d'une structure R+1	115
3.3	Tassement différentiel d'une structure R+1	116

Introduction

L'évaluation des performances de la Méthode NSCDD est étudiée tant pour des milieux granulaires que pour des maçonneries. Un comportement similaire étant observé pour la méthode de Schwarz-NSCD, cf. CHAP.2.SECT.4, les résultats de performance de cette méthode ne seront pas discutés dans ce chapitre. Ces deux types de structures (milieux granulaires et maçonneries) ont des caractéristiques bien distinctes. Alors que les milieux granulaires 3D contiennent des éléments répartis dans l'ensemble d'un volume, avec une organisation spatiale plus ou moins aléatoire, les structures maçonnées sont fréquemment constituées de panneaux et diaphragmes (planchers), soit un ensemble de sous-structures quasi-2D.

Dans tout ce chapitre, l'efficacité de la méthode est analysée vis-à-vis des quantités usuelles que sont :

- l'*accélération parallèle* S_p , qui est le rapport du temps de calcul de la version mono-processeur au temps de calcul de la version parallèle sur N_p processeurs, et le temps de restitution, qui est le temps de calcul perçu par le modélisateur,
- l'efficacité E_p , égale à N_p/S_p ,
- le nombre moyen d'itérations ou cumulé.

1 Simulations parallèles de milieux granulaires

Les simulations (et expérimentations) de milieux granulaires sont fréquemment analysées du point de vue du *nombre d'inertie* (cf. (3.1)). On peut classer les différentes "phases" d'un milieu granulaire par :

- $I < 10^{-3}$: le régime d'écoulement est dit quasi-statique, caractérisé par une énergie cinétique faible du système. Cela est fréquemment associé à un milieu dense, où le nombre de contacts par particule (le *nombre de coordination*) est élevé.
- $10^{-3} < I < 10^{-1}$: le régime d'écoulement est dit fluide. C'est par exemple le cas d'un échantillon cisailé avec une vitesse de cisaillement élevée pour une pression de confinement faible.
- $I > 10^{-1}$: on parle alors de gaz granulaire, piloté essentiellement par des chocs binaires.

Cette grande diversité de comportements fait de la mécanique des milieux granulaires une branche d'étude extrêmement riche, aux frontières de la mécanique des milieux continus (solides et fluides) et de la physique (théorie cinétique des gaz). Cependant, si les simulations par Éléments Finis (e.g. en élasto-plastique) permettent de modéliser les glissements de sols de façon globale, les phénomènes majeurs pilotant la dynamique granulaire, que sont la non-interpénétration et le frottement, ne sont accessibles qu'aux modélisations à l'échelle du grain. Cependant, il faut garder à l'esprit que de nombreuses méthodes DEM sont à considérer et ont chacune leurs domaines d'application privilégiés parmi ces états. Il est par exemple fréquemment considéré que la méthode NSCD est particulièrement adaptée aux milieux denses, en présence de nombreux contacts simultanés.

Nous verrons par la suite que cette caractéristique éclaire les résultats d'*extensibilité* de la méthode NSCDD.

Cette discussion sur les différents états d'écoulement des milieux granulaires permet encore de comprendre pour quelles raisons les essais biaxiaux (en 2D), triaxiaux (en 3D) et de cisaillement (2D et 3D) jouent un rôle clé dans les études tant expérimentales que numériques. En effet, ces essais considèrent des chargements élémentaires permettant de définir précisément la *nombre d'inertie* de l'expérimentation, ou de la simulation, considérée et ainsi d'étudier l'influence des changements de phases.

Considérons dans un premier temps deux tests d'*extensibilité* effectués sur une machine de calcul AMD 48 cœurs, qui permettent de dégager les premières tendances ainsi que d'indiquer les performances qu'un utilisateur peut obtenir sur ce type de machines, intermédiaire entre l'ordinateur personnel et le centre de calcul haute performance.

1.1 Essai biaxial (2D)

Nous proposons d'étudier les performances de la méthode NSCDD sur l'échantillon et le chargement discuté au chapitre 3 (cf. FIG.5.1).

La figure FIG.5.1(a) montre l'évolution de l'*accélération parallèle* en fonction du nombre de sous-domaines (égal au nombre de processeurs) pour les schémas de communication centralisé (CCS) et décentralisé (DCS). On constate que jusqu'à 6 sous-domaines, l'*accélération parallèle* n'est pas fortement modifiée pour les deux types de schémas. Pour 12 et 16 processeurs, les deux courbes divergent. La version CCS s'éloignant fortement de la droite d'*accélération parallèle* optimale (noté "Linear speedup"), alors que la version DCS reste parallèle à cette courbe optimale.

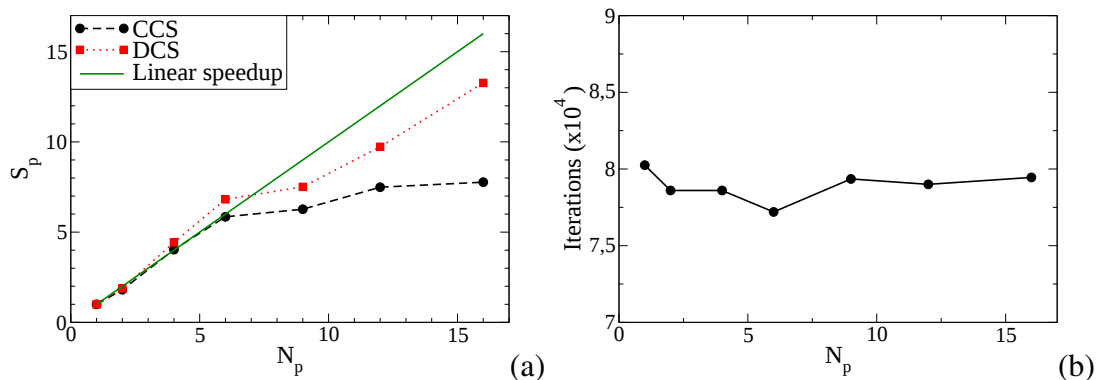


FIGURE 5.1 – (a) : *accélération parallèle* (S_p) et nombre d'itérations totales ; (b) : compression biaxiale d'un échantillon de 13 000 disques.

Dans le cas DCS, il est remarquable que la chute d'efficacité constatée entre 6 et 9 sous-domaines corresponde au passage de grilles de partitionnement telles que chaque sous-domaine ait une partie de sa frontière sur la frontière de l'échantillon complet à une grille de partitionnement avec un "sous-domaine flottant", pour reprendre une terminologie de type FETI. Un sous-domaine flottant, entièrement entouré par d'autres sous-

domaines, est en effet un cas limite où la taille de l'interface est maximale, introduisant un défaut de *load balancing*.

Comme déjà discuté au chapitre CHAP.3, le nombre d'itérations à convergence, présenté en fonction de N_p figure FIG.5.1(b), n'évolue pas de façon monotone vis-à-vis du nombre de sous-domaines. Ce nombre d'itérations étant bien évidemment égal pour les deux schéma de communication étudiés.

1.2 Essai triaxial (3D)

Dans le cas d'échantillons granulaires 3D le schéma CCS, en accord avec les résultats de la section SECT.3.2, présente une efficacité très faible et n'est donc pas reporté par la suite (à titre d'indication, l'*accélération parallèle* pour 16 sous-domaines est de l'ordre de 6, ce qui est très insatisfaisant).

Nous considérons un échantillon de 64 000 sphères en "Random Closed Packing" (RCP – état le plus dense d'un échantillon granulaire désordonné) soumis à une compression triaxiale (déplacement vers le bas de la paroi supérieure avec une vitesse constante et pression de confinement agissant sur les parois latérales, cf. FIG.5.3(b)). Ce cas de chargement est la configuration mécanique la plus sévère, à cause de la forte indétermination du problème, cumulée à un nombre d'inconnues de contacts maximal (6.5×10^5 en moyenne dans le cas présent) ; mais ce cas est aussi le plus intéressant du point de vue numérique, comme nous allons le montrer à la section suivante, ce qui est cohérent avec le domaine d'utilisation privilégié de la méthode NSCD.

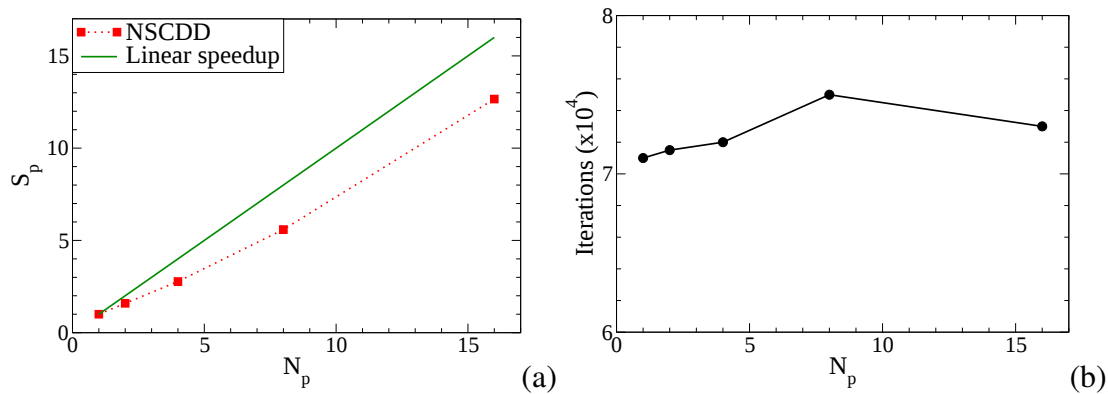


FIGURE 5.2 – *Accélération parallèle* (S_p) (a) nombre d'itérations moyen (b) ; échantillon de 64 000 sphères

La figure FIG.5.2 représente l'évolution de l'*accélération parallèle* en fonction du nombre de sous-domaines (égal au nombre de processeurs). Nous pouvons constater que l'algorithme NSCDD possède un bon comportement quantitatif, même si la configuration matérielle (machine AMD 48 cœurs) et l'optimisation de la librairie MPI ne sont pas optimales. En effet, ces résultats peuvent être légèrement améliorés par l'emploi d'un centre de calcul haute performance. Cependant, il est à remarquer que la relative petite

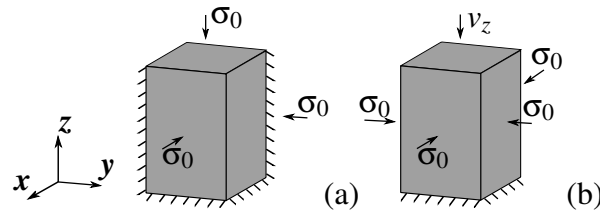


FIGURE 5.3 – Compression isotrope (a) et chargement triaxial (b)

taille de l'échantillon et le faible nombre de sous-domaines testés font de ce type de calcul une application raisonnable pour ce type de configuration matérielle.

Comme pour le cas 2D, le nombre d'itérations FIG.5.2(b) (ici moyenné sur l'ensemble de la simulation) est sensiblement constant pour les différentes décompositions testées. En pratique, les utilisateurs de la méthode NSCD acceptent fréquemment de ne pas converger à chaque pas de temps, ce qui impliquerait dans certains cas un nombre d'itérations prohibitif sans améliorer significativement la solution obtenue. Pour de telles pratiques, le nombre d'itérations sera alors piloté par l'utilisateur ce qui gomme les légères différences entre les nombres d'itérations mono et multi-processeurs.

2 Simulations de compression triaxiale de grande taille

2.1 Échantillon considéré

Phase de préparation. Un échantillon de $2 \cdot 10^5$ sphères est préparé en deux temps. Premièrement, une modèle de dépôt couche à couche tridimensionnel est réalisé en se basant sur des règles géométriques simples [80]. Les particules sont déposées séquentiellement sur une paroi inférieure. Chaque nouvelle particule est positionnée sur la surface libre de l'échantillon en fonction de son diamètre. Cette procédure permet la construction d'un échantillon dans lequel chaque particule supporte au moins trois contacts. Afin d'éviter la formation d'arches, une faible polydispersité sur les diamètres est introduite.

Une fois ce procédé géométrique effectué, la deuxième étape de la phase de préparation consiste en une compression isotrope à l'intérieur d'un parallélépipède rectangle de dimensions $L_0 \times l_0 \times h_0$ pour lequel trois parois sont fixes et les trois restantes sont soumises à une pression de confinement σ_0 . La gravité et le coefficient de frottement μ entre particules et avec les parois sont fixés à zéro durant la compression de sorte à éviter les gradients de forces et obtenir un échantillon dense (cf. Figure 5.3(a)).

Test triaxial. L'échantillon isotrope est alors soumis à un déplacement vertical de la paroi supérieure à vitesse constante v_z pour une pression de confinement σ_0 agissant sur les parois latérales (cf. Figure 5.3(b)). Le coefficient de frottement μ entre particules est fixé à 0.35 et à zéro avec les parois. Considérant ici un comportement quasi-statique, le taux de cisaillement doit être tel que l'énergie cinétique globale soit négligeable devant

la pression statique. Les composantes de la déformation cumulée ϵ_λ sont définies comme suit,

$$\epsilon_\lambda = \int_{\lambda_0}^{\lambda} \frac{d\lambda'}{\lambda'} = \ln \left(1 + \frac{\Delta\lambda}{\lambda_0} \right), \quad \lambda \in \{h, L, l\} \quad (5.1)$$

où h_0 , L_0 et l_0 sont les hauteur, largeur et profondeur initiales de la boîte englobante de la simulation et $\Delta h = h - h_0$, $\Delta L = L - L_0$ et $\Delta l = l - l_0$ sont les déplacements cumulés correspondants. La déformation volumique est alors :

$$\epsilon_q = \int_{V_0}^V \frac{dV'}{V'} = \ln \left(1 + \frac{\Delta V}{V_0} \right), \quad (5.2)$$

où V_0 est le volume initial et $\Delta V = V - V_0$ la variation totale de volume. La déformation de cisaillement cumulé est définie par :

$$\epsilon_q \equiv \epsilon_h - \epsilon_l. \quad (5.3)$$

Enfin, la compacité ρ est définie par $\rho = V_p/V$, avec V_p le volume occupé par les particules.

Partitionnement en sous-domaines. La simulation est réalisée pour les partitionnements définis figures FIG.5.4(a) (pour $\epsilon_q \in [0, 0.5]$, 96 sous-domaines) et FIG.5.4(b) (pour $\epsilon_q \in [0.5, 0.65]$, 100 sous-domaines). Cette modification du partitionnement est réalisée afin de prendre en compte l'évolution de "l'aspect ratio" de l'échantillon au cours de la simulation. En effet, la boîte englobante en début de simulation est telle que

$$h_0 \simeq \frac{3}{2}L_0, \quad (5.4)$$

et

$$L_0 \simeq l_0. \quad (5.5)$$

Les grilles de partitionnement (n_x, n_y, n_z) en sous-domaines respectives étant $(4, 4, 6)$ et $(5, 5, 4)$, comme on peut le deviner sur les figures FIG.5.4(a) et FIG.5.4(b). La figure FIG.5.4(c) permet de représenter la structure des particules de coins ($m_i > 2$) sous-jacente au partitionnement $(5, 5, 4)$.

2.1.1 Paramètres de contrôle

Nous contrôlons, d'une part, la qualité de la solution obtenue à chaque pas de temps vis-à-vis des critères de convergence sur le réseau de contact [17] et sur l'interface [40], et d'autre part les interpénétration moyenne et maximale : l'interpénétration moyenne restant inférieure à 0.02% du rayon de la plus petite sphère de l'échantillon et l'interpénétration maximale restant inférieure à 10% du rayon de la plus petite sphère.

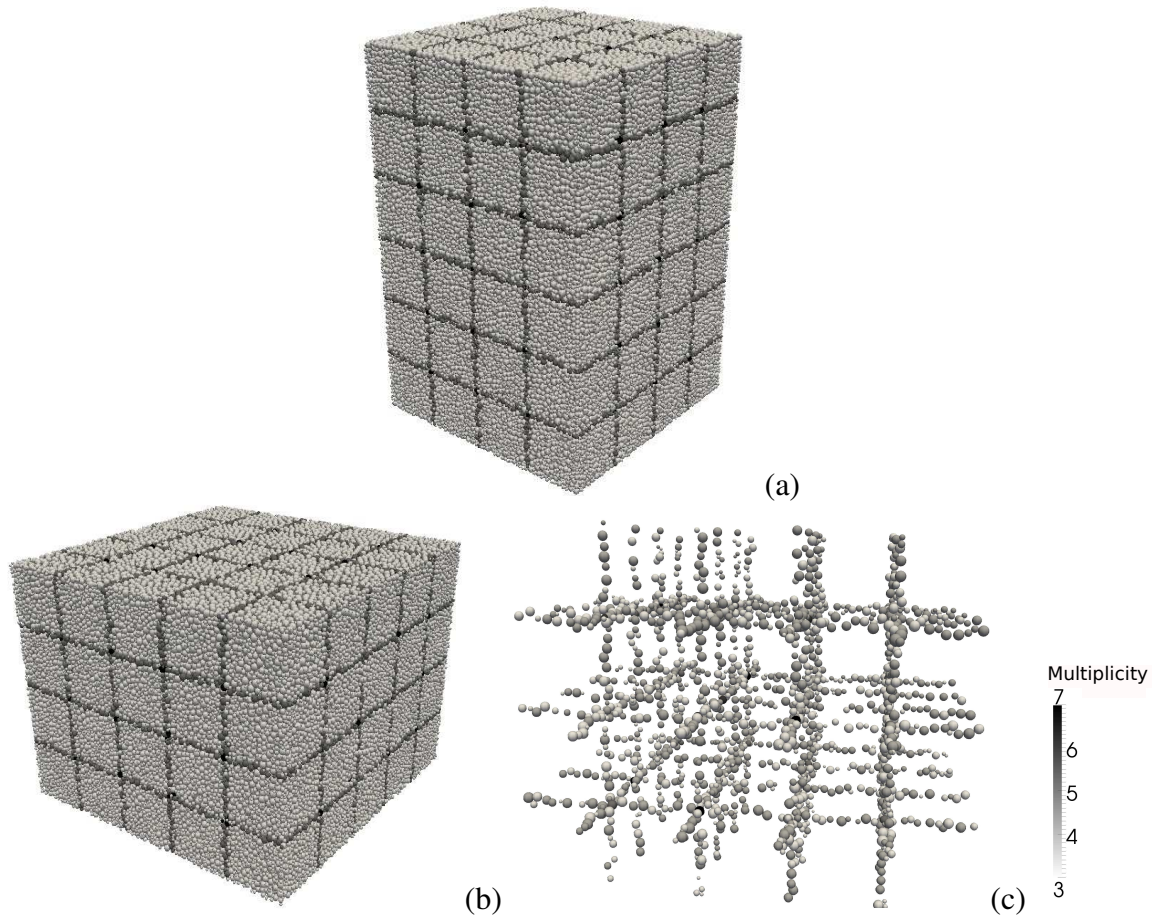


FIGURE 5.4 – Partitionnement en sous-domaines de l'échantillon à $\epsilon_q = 0$ (a) et $\epsilon_q = 0.7$ (b) et structure sous-jacente des grains de coins à $\epsilon_q = 0.7$ (c). Les échelles de gris (a) et (b) sont réduites à l'intervalle $[1, 4]$ et l'échelle (c) est réduite à l'intervalle $[3, 7]$; $m = 1$: grain interne ; $m = 2$: grain de face ; $m > 2$: grain de coin.

2.2 Validation mécanique

Sans chercher à détailler aussi précisément la validation mécanique de ce test de grande taille que celle effectuée au chapitre 3, nous allons présenter ici quelques éléments démontrant la bonne qualité de la simulation effectuée. En effet, tout l'intérêt d'une telle simulation, mobilisant une centaine de cœurs de calcul du centre HPC@LR, consiste à rendre réalisable une étude pratiquement inaccessible dans le cadre d'un calcul séquentiel. Il n'est donc pas possible de comparer les résultats complets de simulations mono-domaine et multi-domaines, comme cela est le cas au chapitre 3. Il n'en reste pas moins que les propriétés fondamentales d'un échantillon granulaire soumis à un chargement triaxial peuvent être vérifiées. Afin de compléter cette validation mécanique, nous comparons les résultats avec ceux obtenus pour un test triaxial d'un échantillon de 16000 sphères, ayant des caractéristiques strictement identiques : polydispersité, étapes de préparation, coefficient de frottement, pression de confinement, nombre d'inertie (ce qui permet de déterminer la vitesse de descente de la paroi supérieure), et rugosité des parois.

Résistance au cisaillement. Comme pour un milieu granulaire en dimension 2, l'expression du tenseur de contrainte σ dans le volume V est une moyenne arithmétique faisant intervenir le vecteur branche ℓ^α (joignant les centres de deux sphères voisines) et le vecteur des efforts de contact f^α associé au contact α . Il est donné par [59, 77],

$$\sigma = \frac{1}{V} \sum_{\alpha \in V} f^\alpha (\ell^\alpha)^T. \quad (5.6)$$

Pour un chargement triaxial avec compression verticale (suivant z), on a $\sigma_1 \geq \sigma_2 = \sigma_3$, où les σ_k sont les contraintes principales. La contrainte moyenne est alors $p = (\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3)/3$, et le déviateur de contrainte $q = (\sigma_1 - \sigma_3)/3$. Pour un système de particules rigides, l'état de contrainte est caractérisé par la contrainte moyenne p et la résistance au cisaillement normalisée q/p . L'angle de friction interne ϕ (contrairement au cas 2D où $\sin \phi_{2D} = q/p$) est défini par

$$\sin \phi = \frac{3q}{2p + q}. \quad (5.7)$$

La figure FIG.5.5 représente l'évolution de q/p pour les échantillons de 16000 et 200000 sphères en fonction de la déformation volumique ϵ_q . On constate que, dans les deux cas, la résistance au cisaillement passe par un maximum $(q/p)^{\text{peak}} \sim 0.28$ avant de relaxer sur plateau $(q/p)^* \sim 0.21$ correspondant à l'état classiquement nommé *résiduel* en mécanique des sols [57]. L'effet du nombre de particules se concrétise ici par le caractère lissé de l'évolution de la résistance au cisaillement de l'échantillon de grande taille par rapport à celui comportant 16000 particules. Durant l'augmentation ainsi que lors de la stabilisation de q/p , ce dernier cas fluctue en effet de façon bien plus importante que le cas à 200000 particules. Cependant, le fait d'obtenir des résultats similaires en moyenne, q/p étant une expression du premier moment du tenseur de contraintes, permet de valider le comportement macroscopique simulé ainsi que d'indiquer les gains sur la finesse d'ana-

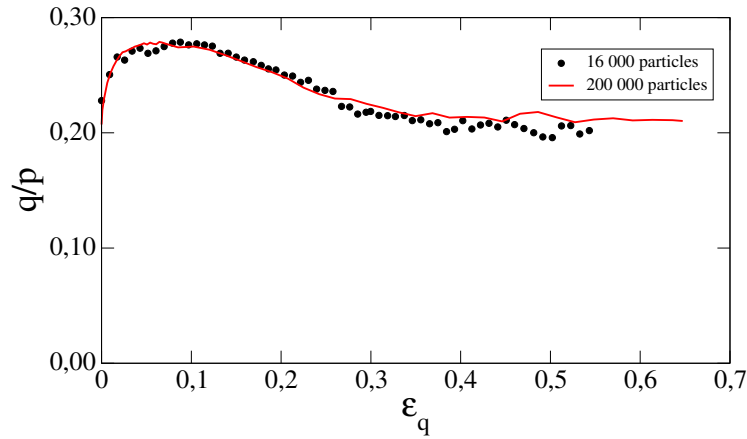


FIGURE 5.5 – Évolution du rapport q/p en fonction de la déformation volumique pour les échantillons de 200 000 et 16 000 sphères.

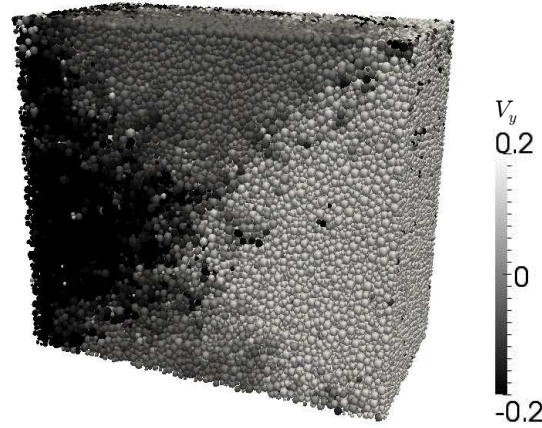


FIGURE 5.6 – Composante y des vitesses des particules à $\epsilon_q = 0.5$ pour une coupe transversale de l'échantillon de 200 000 sphères

lyse (moments d'ordre supérieur) que permet la simulation d'échantillons granulaires de grande taille.

La figure FIG.5.6 permet de mettre en évidence les bandes de cisaillement présentes au sein du milieu granulaire (pour $\epsilon = 0.5$). De plus on représente figure FIG.5.7 le réseau d'effort du système (pour $\epsilon = 0.5$). Il est plus délicat d'analyser ce réseau d'effort, par rapport au cas 2D. En effet, la structuration des chaînes de forces associées au réseau fort est plus complexe, en particulier pour un échantillon de grande taille comme celui-ci, composé de plus de $2 \cdot 10^6$ composantes de forces, ce qui implique une analyse statistique de ce réseau.

Distribution des forces Comme pour le cas 2D, la fonction de densité de probabilité (pdf) des forces normales présente deux caractéristiques du milieux granulaires : (i) la

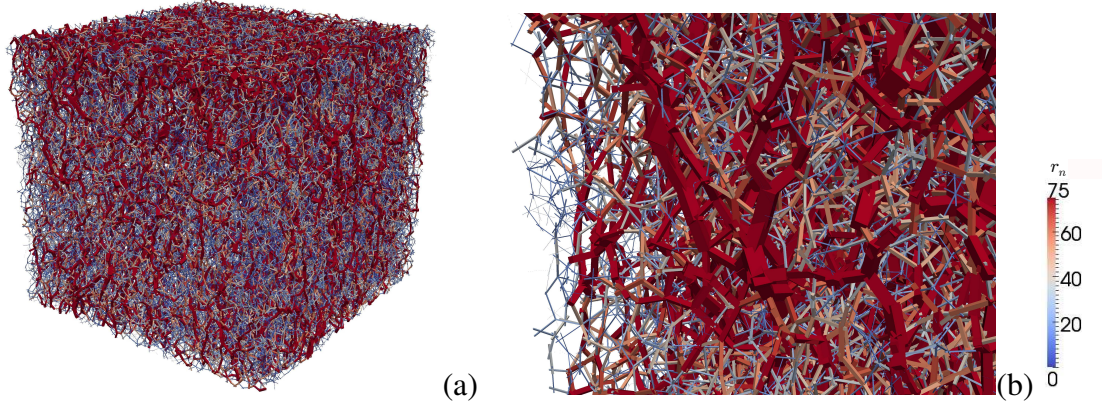


FIGURE 5.7 – Réseau des forces de contact à $\varepsilon_q = 0.5$; échantillon (200 000 sphères) complet (a) et zoom (b). Seules les composantes normales sont représentées.

pdf peut être globalement vue comme une fonction exponentielle décroissante pour les forces supérieures à la force moyenne, (ii) pour les forces faibles (inférieures à la force moyenne), la pdf ne décroît pas jusqu'à zéro lorsque les forces s'en approchent. Les données sur les forces faibles regroupées par les différents auteurs indiquent une forte sensibilité de la pdf aux détails micro-mécaniques.

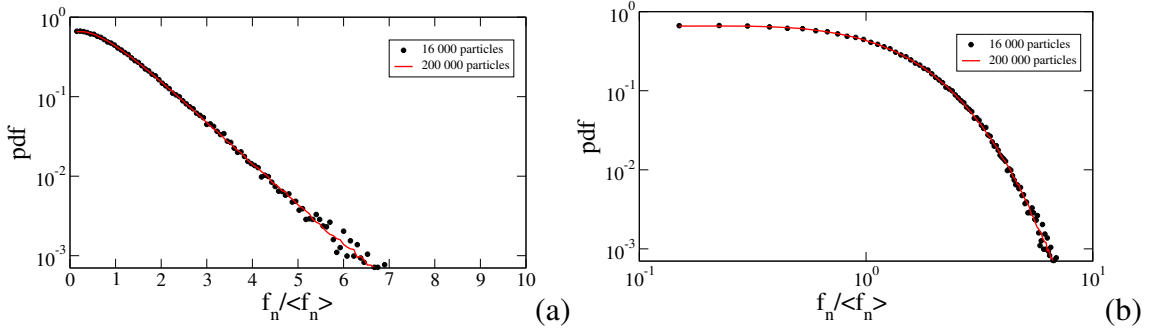


FIGURE 5.8 – Fonction de densité de probabilité des forces normales f_n , normalisées par la force moyenne $\langle f_n \rangle$ en log-linéaire (a) et log-log (b) représentées pour les différentes décompositions.

La fonction de densité de probabilité (pdf) des forces normales (normalisées par la force moyenne) $\langle f_n \rangle$ est représentée FIG.5.8 en échelles log-linéaire et log-log pour des niveaux de déformations importants (les données sont cumulées sur plusieurs pas de temps de l'état résiduel) pour toutes les simulations. Comme observé dans la littérature [65, 19, 62, 9, 70, 12, 13], le nombre de forces fortes $\langle f_n \rangle$ décroît exponentiellement alors que le nombre de forces faibles varie comme une fonction puissance :

$$P(f_n) \propto \begin{cases} e^{-\alpha(1-f_n/\langle f_n \rangle)} & \text{pour } f_n > \langle f_n \rangle \\ (f_n/\langle f_n \rangle)^\beta & \text{pour } f_n < \langle f_n \rangle \end{cases} \quad (5.8)$$

où α et β sont les exposants. On constate que pour les deux échantillons les pdf sont très proches. Pour les grandes valeurs de forces, une plus grande dispersion est observée pour l'échantillon de 16 000 sphères.

Nous pouvons conclure de cette étude que le partitionnement en sous-domaines et l'algorithme NSCDD ne perturbent ni le comportement global ni l'analyse statistique de la microstructure granulaire ; cela a été montré en 2D au chapitre CHAP.3 et illustré dans cette étude pour un cas 3D de grande taille. Dans le même temps, l'accroissement du nombre de particules permet de s'affranchir des effets des parois et d'améliorer la finesse des études statistiques des milieux granulaires. Cependant, une forte réduction des temps de calcul est nécessaire afin de rendre réaliste ce type d'étude de grande taille. A titre d'exemple, l'essai triaxial à 200 000 sphères seul (sans compter la phase de préparation, mais jusqu'à une déformation volumique de 70%) peut être estimé à environ une année, si effectué en séquentiel pour une machine performante avec un compilateur Fortran propriétaire optimisé ! Ceci donne toute la portée de l'analyse de performance suivante.

2.3 Performances pour différents états d'écoulement

Nous allons étudier l'*accélération parallèle* S_p (qui est le rapport du temps de calcul de la version séquentielle sur un seul processeur sur le temps de calcul en parallèle sur N_p processeurs) obtenu pour 3 états caractéristiques de l'échantillon durant la simulation (phase de préparation incluse). En effet, le temps de simulation mono-domaine étant trop conséquent (que ce soit pour simuler la phase de compression isotrope complète ou l'essai triaxial à proprement dit), il est nécessaire d'effectuer le calcul de l'*accélération parallèle* sur un nombre réduit d'itérations, au voisinage d'un état du système. Le choix de ces trois états est guidé tant par la nature du type d'écoulement auxquels ils correspondent que par des comportements très marqués sur le plan numérique.

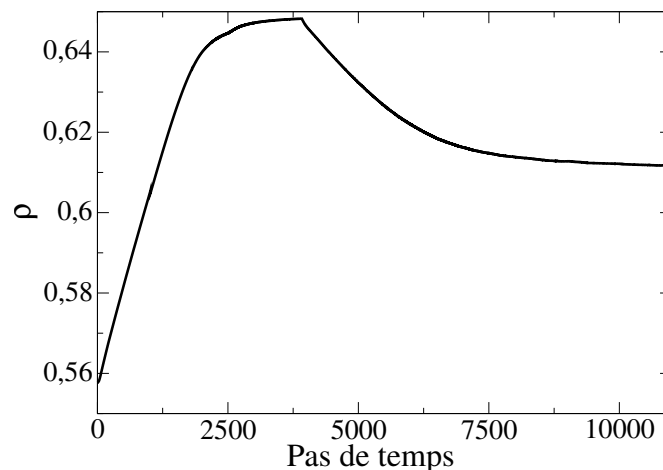


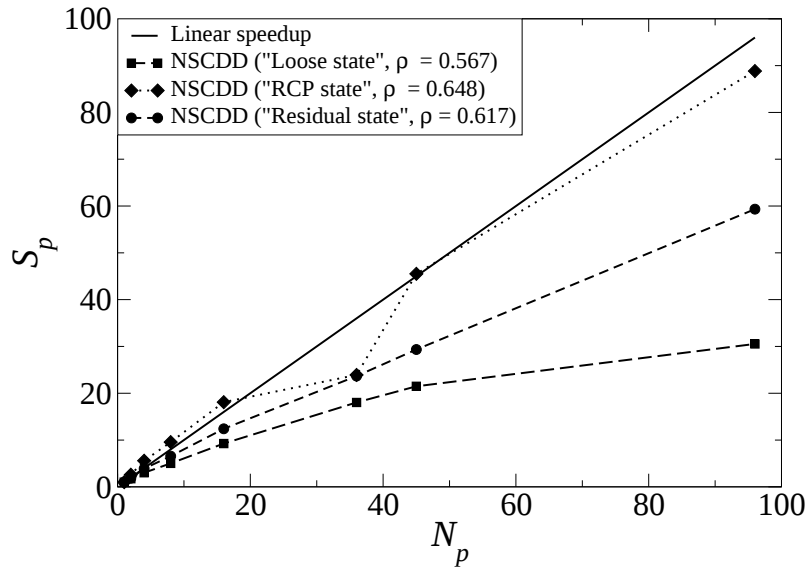
FIGURE 5.9 – Évolution de la compacité ρ lors des phases de préparation (compression isotrope, représentée en gris foncé) et de compression triaxiale (gris clair), en fonction du nombre de pas de temps cumulés, pour l'échantillon de 200 000 sphères.

Nous détaillons ci-dessous les états considérés. Le tableau TAB.5.1 précise le nombre de contacts, le nombre d'itérations à convergence et le nombre de corps migrants, en moyenne, au cours des portions de simulation au voisinage de chacun de ces états. La figure FIG.5.9 représente l'évolution de la compacité de l'échantillon pour les phases de compression isotrope et d'essai triaxial.

État	N_C	It_{NSCDD}	N_{MG}
“Lâche”	339957	701	38
“RCP”	669665	11978	24
“Résiduel”	567957	9993	29

TABLE 5.1 – Principales caractéristiques des trois états de l'échantillon utilisés pour l'étude de l'*accélération parallèle* ; N_C est le nombre moyen de contacts par pas de temps, It_{NSCDD} est le nombre moyen d'itérations NSCDD à convergence par pas de temps et N_{MG} est le nombre moyen de particules migrantes par pas de temps (i.e. le particules changeant de sous-domaine).

- “État lâche” ($\rho = 0.567$) : correspond à une configuration de l'échantillon obtenue par dépôt géométrique et soumis à un compactage isotrope. Cette configuration est importante car la compression isotrope est essentielle afin d'obtenir un échantillon en *random closed packing* (RCP). Cet état est caractérisé par un nombre de contacts actifs faible (TAB.5.1) comparé au nombre de particules. De plus, il est associé à des interactions sans frottement entre particules et un nombre modéré d'itérations à convergence (TAB.5.1) ; la dynamique réduite aux contacts est donc relativement peu coûteuse. Les chocs binaires jouent un rôle conséquent dans la dynamique de l'échantillon. On est alors en présence d'un matériau se comportant quasiment comme un gaz granulaire.
- “État RCP” ($\rho = 0.648$ dans notre cas) : état utilisé en début de compression triaxiale, où le nombre de contacts est maximal (TAB.5.1). Le confinement de l'échantillon combiné à une forte compacité et une condition imposée en vitesse sur la paroi supérieure entraînent un nombre d'itérations à convergence élevé (TAB.5.1). En effet, l'indétermination du système est alors très importante et amplifiée par le frottement entre particules. Nous verrons que cet état est en même temps le plus dur d'un point de vue mécanique et le plus intéressant d'un point de vue numérique.
- “État résiduel” (entre $\rho = 0.617$ et $\rho = 0.612$ dans notre cas) : correspond à la phase de stabilisation de la valeur de résistance au cisaillement (q/p) observée pour $\varepsilon_q > 0.35$ (FIG.5.5). Cet état résiduel est caractérisé par une compacité plus faible que l'état RCP, ce qui est principalement dû à la formation de bandes de cisaillement. Le nombre de contacts est alors sensiblement réduit par rapport à l'état RCP (TAB.5.1) et stable pour $\varepsilon_q > 0.35$.

FIGURE 5.10 – *Accélération parallèle* en fonction du nombre de processus

La figure FIG.5.10 représente l'évolution de l'*accélération parallèle* en fonction du nombre de processeurs (égal au nombre de sous-domaines). Les résultats obtenus dépendent fortement de l'état considéré de l'échantillon granulaire. Pour l'"état lâche" l'*accélération parallèle* diverge rapidement du comportement idéal (linéaire de pente 1), alors que pour les états "RCP" et "résiduel", l'*accélération parallèle* est sensiblement linéaire, mais avec des pentes différentes pour chacun des deux. Une valeur, pour l'état "RCP" et pour 36 processeurs s'écarte de cette droite, ce qui est une illustration de la variabilité de performance que l'on peut rencontrer sur un supercalculateur réel, en fonction de l'occupation machine, etc. Finalement l'*accélération parallèle* maximale atteinte est de 88 pour 96 processeurs, ce qui est tout à fait honorable. Ces résultats montrent que la méthode NSCDD est particulièrement bien adaptée aux milieux granulaires denses. Cette méthode hérite de ce point de vue des caractéristiques de la méthode NSCD.

Les résultats du tableau TAB.5.2 permettent d'indiquer les différences marquées entre les trois états analysés concernant la répartition des temps de calcul parmi les différentes étapes de l'algorithme. L'"état lâche" présente, en particulier, un fort contraste vis-à-vis des deux autres états : la phase de partitionnement en sous-domaines prend en effet une proportion importante (11%). Si l'on cumule les phases de partitionnement, détection des contacts et mise à jour des positions et vitesses, on obtient environ 23% du temps de calcul, ce qui est non négligeable devant le temps de résolution du solveur de contact (noté "Inloop 1"). Dans le même temps, le nombre de contacts N_C et le nombre d'itérations NSCDD It_{NSCDD} sont plus faibles et le nombre de corps migrants est plus important que pour les deux autres états (TAB.5.1). Il est donc important d'optimiser la méthode de parallélisation de la détection de contact, comme discuté SECT.2.2 du chapitre précédent. Il semble en effet préférable, dans le cas d'un milieu granulaire agité, de minimiser les échanges MPI associés à la distribution du résultat de partitionnement (temps d'échanges

État	Partitionnement	Détection	Inloop 1	Inloop 2	Mise à jour
“Lâche”	11.0%	2.6%	66.7%	10.7%	9%
“RCP”	4.4%	0.7%	76.7%	15.6%	3.9%
“Résiduel”	2.0%	0.2%	82.1%	12.5%	3.2%

TABLE 5.2 – Pourcentages des temps de calcul des principales étapes de l’algorithme NSCDD ; “Partitionnement” : regroupe les phases de collecte des positions et vitesses des corps, partitionnement (routine séquentielle), distribution des informations locales aux différents processeurs et traitement des particules migrantes ; “Détection” : phase de construction (en parallèle) des opérateurs H_E ; “Inloop 1” : résolution en parallèle des impulsions de contact (itérations de Gauss-Seidel et mise à jour des multiplicateurs d’interface) ; “Inloop 2” : échanges MPI entre processus durant la résolution itérative des inconnues de contacts et des quantités d’interface ; “Mise à jour” : mise à jour (en parallèle) des vitesses et positions des particules.

de messages prépondérants lors de la phase “Partitionnement” recensée TAB.5.2), quitte à refaire la détection grossière sous-domaine par sous-domaine (en parallèle), comme proposé au chapitre 4.

Les valeurs du tableau TAB.5.3 indiquent que le partitionnement géométrique proposé, basé sur une grille sous-jacente régulière, ne permet pas d’assurer un équilibrage des charges parfait. En effet, le nombre de particules appartenant à un sous-domaine varie jusqu’à 23%. Pour les quantités d’interface, ce phénomène est encore accentué, le nombre de particules d’interface par sous-domaines $N_E^{m>2}$ et le nombre de sous-domaines interconnectés, pour un sous-domaine donné N_E^{Isd} , varient jusqu’à 73.8% et 91.4% respectivement, ce qui implique de fortes fluctuations sur le pourcentage de temps de calcul des échanges MPI durant la phase de résolution itérative du contact. Néanmoins, les contacts, qui sont les inconnues principales des problèmes granulaires denses, sont bien distribués parmi les sous-domaines. Obtenir un bon équilibrage des charges tant pour les corps que pour les contacts est un objectif difficile si l’on considère un partitionnement géométrique simple (comme celui utilisé ici), mais peut être tenté en utilisant un outil automatique de partitionnement de graphe tel que ParMETIS [46]. D’autres approches d’équilibrage des charges ont aussi montré leur intérêt du point de vue de l’efficacité numérique, du moins pour des problèmes 2D [76]. Cependant, il est nécessaire de s’assurer que le partitionnement automatique en sous-domaines effectué en début de pas de temps n’implique pas de trop nombreuses migrations de particules d’un sous-domaine à l’autre. Cela serait par exemple le cas si, sans prendre en compte le partitionnement utilisé au pas précédent, l’outil de partitionnement automatique sélectionnait une nouvelle décomposition très différente de la précédente. De nombreux échanges entre processeurs seraient alors nécessaires afin de reconstituer pour chaque sous-domaine la base de donnée locale des corps actifs de ce sous-domaine.

	Min	Max	Pourcentage de variation
N_E^S	2086	2633	23.2%
N_E^C	6514	6795	4.2%
N_E^{Isd}	20	52	91.4%
$N_E^{m>2}$	445	965	73.8%
$T_{MPIExch}$	3.84%	26.7%	149%

TABLE 5.3 – Valeurs caractéristiques par sous-domaines (“État RCP”) ; N_E^S nombre de particules internes au sous-domaine E ; N_E^C nombre de contact du sous-domaine E ; N_E^{Isd} nombre de sous-domaines interconnectés à un sous-domaine E ; $N_E^{m>2}$ nombre de grains de coins ; $T_{MPIExch}$ pourcentage des temps d’échange MPI lors de la phase de résolution du contact ; minimum, maximum et pourcentage de variation.

Discussion Cette première étude poussée d’une simulation de grande taille sur le supercalculateur HPC@LR montre le potentiel de la méthode pour la simulation des milieux granulaires. Cependant, deux cas sont à distinguer :

- les milieux granulaires denses sous chargement quasi-statique : pour ce type de simulation, la méthode NSCDD implémentée dans la plate-forme de calcul donne de bons résultats. Des simulations réalistes peuvent donc être sérieusement envisagées pour des applications industrielles de grande taille ;
- les milieux granulaires lâches sous chargement dynamique : pour ce type de simulation, il semble que des optimisations soient nécessaires afin de tirer le meilleur parti de la méthode de décomposition de domaine, en particulier, une optimisation de la phase de partitionnement et de détection des contacts.

Cependant, si la physique des matériaux granulaires n’est pas perturbée par la décomposition en sous-domaines, il est nécessaire de rester vigilant sur les paramètres numériques choisis : pas de temps, critères d’erreur, etc. car l’augmentation du nombre de particules nécessite d’adapter ces paramètres (indépendamment de la décomposition utilisée).

3 Application aux ouvrages maçonnés

La méthode NSCDD, initialement développée pour la modélisation d’échantillons poly-disperses de disques (2D) ou de sphères (3D), a été étendue aux échantillons composés d’objets polyédriques afin de pouvoir être appliquée au calcul des structures maçonnées [23]. Une différence notable entre les maçonneries et les milieux granulaires provient de la faible migration d’objets entre sous-domaines (point positif) et de la proportion des grains d’interface ayant une forte multiplicité (point négatif).

Les structures maçonnées 3D peuvent en effet être considérées comme des assemblages de structures 2D ; ce qui explique pourquoi la proportion des corps d’interface de ces structures est relativement faible comparée à celle rencontrée pour les milieux granulaires 3D (TAB. 5.4).

Par ailleurs, la présence de corps de grande taille - utilisés pour la modélisation des

Description du test	% particules d'interface	% contacts d'interface
granulaire 2D (biaxial) 12×10^3 disques	4.4%	10.7%
maçonnerie 3D 13×10^3 polyèdres	4.6%	10.2%
granulaire 3D (triaxial) 50×10^3 sphères	7.9%	17.1%
granulaire 3D (triaxial) 90×10^3 sphères	9.1%	15.1%

TABLE 5.4 – Proportion des corps et des contacts d'interface pour des milieux granulaires et des structures maçonnées – cas 2D et 3D.

diaphragmes - par rapport à la dimension moyenne des blocs conduit à ce que la multiplicité associée à ces corps soit très élevée en comparaison de celle que l'on trouve pour des échantillons granulaires classiques.

Enfin, il est également important de préciser que la phase de répartition des corps dans les sous-domaines peut être réalisée beaucoup moins fréquemment dans le cas des maçonneries que des milieux granulaires, la configuration de contact dans ce type de structure étant stable.

L'extension de la méthode NSCDD aux maçonneries a nécessité des adaptations dans la mise en œuvre numérique de la méthode de détection grossière du contact [64]. La détection grossière du contact se déroule en deux étapes :

1. construction d'une liste de paires de contacteurs voisins par une méthode des boîtes utilisant la sphère englobante des contacteurs. Dans le cas des milieux granulaires, le réseau de contact occupe tout le volume de l'échantillon. Le domaine occupé par l'échantillon est découpé en boîtes qui *a priori* contiennent toutes une liste non vide de contacteurs. Dans le cas des maçonneries, le domaine englobant l'échantillon est globalement creux. Les boîtes situées à la périphérie du domaine concentrent la quasi-totalité des contacteurs, puisqu'elles intersectent l'enveloppe du bâtiment. Une nouvelle implémentation de la méthode des boîtes basée sur un stockage *sparse*, a donc été proposée. Les listes de contacteurs contenus dans les boîtes non vides sont stockées dans des listes chaînées plutôt que dans un tableau surdimensionné ;
2. élimination des paires de contacteurs si il n'y a pas d'intersection des "axis aligned bounding box" (AABB) ni de *shadow-overlap*. Dans un premier temps on vérifie que les "ombres" sur les axes des deux contacteurs potentiellement en contact s'intersectent. Si cela n'est pas le cas, on élimine le contact de la liste. Par la suite, on applique une méthode de *shadow-overlap* qui repose sur la recherche d'un vecteur tel que la projection des "ombres" des deux contacteurs potentiellement en contact sur celui-ci ne s'intersectent pas. Dans le cas des maçonneries, on cherche ce vecteur parmi les normales aux faces.

Dans le cas du contact entre sphères, et pour une distance d'alerte bien choisie, la liste de paires de contacteurs sélectionnée fournit quasiment le réseau de contact et un faible nombre de paires de contacteurs sera éliminée lors de l'étape de détection fine.

Dans le cas du contact entre polyèdres, l'anisotropie des contacteurs et la présence de contacteurs d'une taille bien plus élevée que la moyenne (typiquement les corps utilisés pour la modélisation des diaphragmes) imposent d'utiliser un filtrage supplémentaire.

Dans le cadre de la NSCDD, la mise à jour de la boîte englobant chaque contacteur polyédrique est réalisée en parallèle sur chaque processeur, lors de la mise à jour de la configuration de détection. Les boîtes englobantes sont ensuite envoyées sur un processeur hôte afin d'effectuer la détection grossière.

3.1 Structure R+1 et partitionnements

L'analyse des performances, en terme de parallélisation de l'algorithme NSCD, est quantifié par la suite à l'aide des quantités usuelles : l'*accélération parallèle* S_p , qui est le rapport du temps de calcul de la version mono-processeur au temps de calcul de la version parallèle sur N_p processeurs, et le temps de restitution, qui est le temps de calcul perçu par le modélisateur. Afin d'illustrer le comportement des deux approches de parallélisation, deux études sont effectuées sur une structure maçonnée de petite taille à deux étages, représentée FIG.5.11.

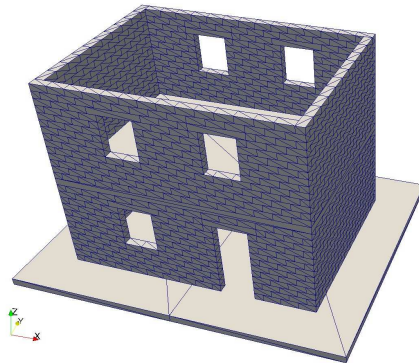


FIGURE 5.11 – Structure maçonnée R+1 utilisée pour les études numériques.

Pour les calculs menés en décomposition de domaine, il est nécessaire, en plus du nombre de processus, de définir une grille de partitionnement (n_x, n_y, n_z) . La figure FIG.5.12 présente les partitionnements étudiés par la suite.

3.2 Mise sous poids propre d'une structure R+1

Dans cette première étude, l'influence du nombre de processus (1, 2, 4 et 8) sur le temps de restitution (FIG.5.13), ainsi que sur l'*accélération parallèle*, est analysé pour un chargement de type mise sous poids propre (activation de la gravité).

Malgré un temps séquentiel plus faible de la version OpenMP, avec compilateur propriétaire Intel (Ifort), vis-à-vis de la version DDM-MPI, avec compilateur open-source (Gfortran), les temps de restitution pour 8 processus sont équivalents. Les *accélérations*

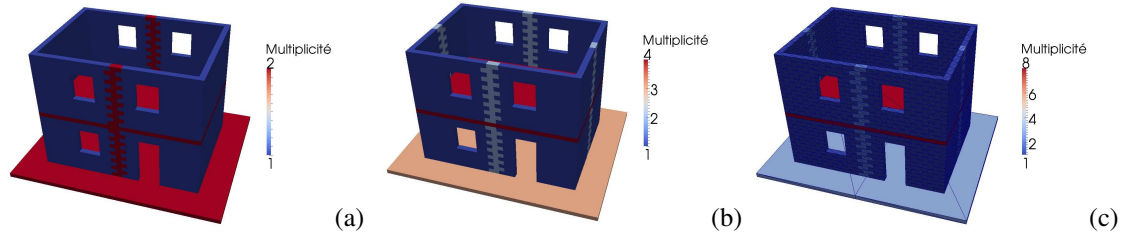


FIGURE 5.12 – Partitionnements proposés pour l'étude de la méthode NSCDD. Grilles de partitionnement (n_x, n_y, n_z) ; (a) 2 sous-domaines : (2, 1, 1); (b) 4 sous-domaines : (2, 2, 1); (c) 8 sous-domaines : (2, 2, 2).

parallèles des deux méthodes restent confondus jusqu'à 4 processus, puis divergent sensiblement pour 8 processus.

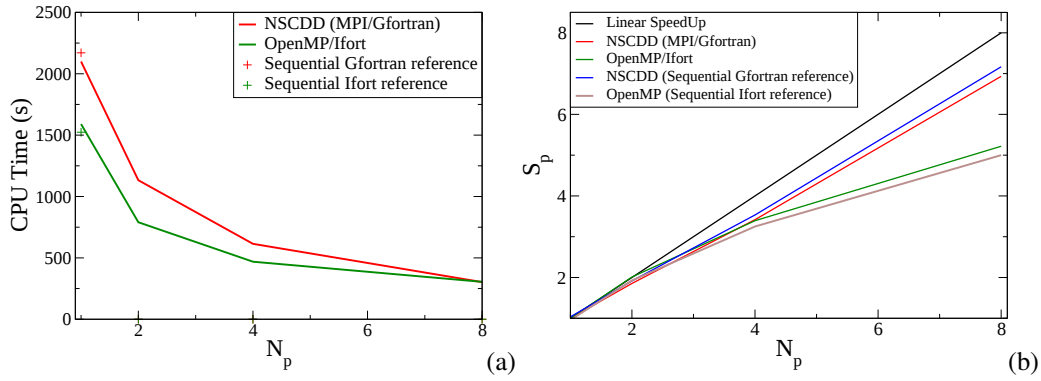


FIGURE 5.13 – (a) : temps de restitution en fonction du nombre de processus. (b) : mise en évidence du coût de la gestion du parallélisme (overhead), pour les approches OpenMP et MPI, sur les temps de restitution (Figure 5.13(a)) et calcul de l'*accélération parallèle* en prenant en compte une référence mono-domaine avec ou sans gestion du parallélisme (Figure 5.13(b)).

3.3 Tassement différentiel d'une structure R+1

Dans cette deuxième étude, l'influence du nombre de processus (égal au nombre de sous-domaines) sur l'*accélération parallèle* est analysé pour un chargement de type tassement différentiel, défini FIG.5.14(a) et FIG.5.14(b).

Le nombre d'itérations par pas de temps pour les différents partitionnements testés (FIG.5.15(a)) suit les mêmes tendances générales. Cependant, le nombre d'itérations moyen (cf. TAB.3.3) est sensiblement supérieur pour les structures décomposées en sous-domaines (de l'ordre de 20%).

Les interpénétrations maximale (FIG.5.16(a)) et moyenne (FIG.5.16(b)) présentent des différences modérées entre les versions mono-domaine et multi-domaines, ces valeurs

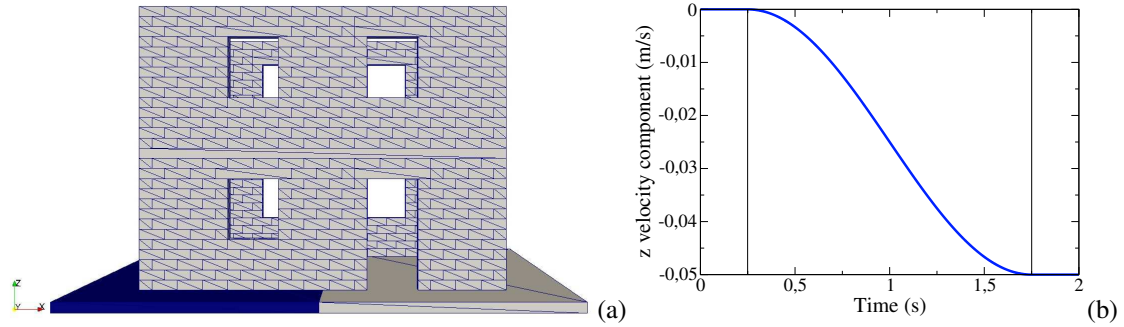


FIGURE 5.14 – Géométrie de la structure R+1 avec (en bleu foncé) la fondation pilotée en vitesse (a) ; profil de vitesse imposée en fonction du temps (b) : les deux zones gris foncé correspondent à la mise sous poids propre et à une vitesse de descente constante du plancher rigide, la zone gris clair représente un chargement de type tassement différentiel régularisé.

Grille de partitionnement	Moyenne des itérations par pas de temps
(1, 1, 1)	13 131
(2, 1, 1)	16 061
(2, 2, 1)	16 181
(2, 2, 2)	16 071

TABLE 5.5 – Nombres d'itérations moyens (sur l'ensemble de la simulation de tassement différentiel de la structure R+1) par pas de temps pour les différents partitionnements testés.

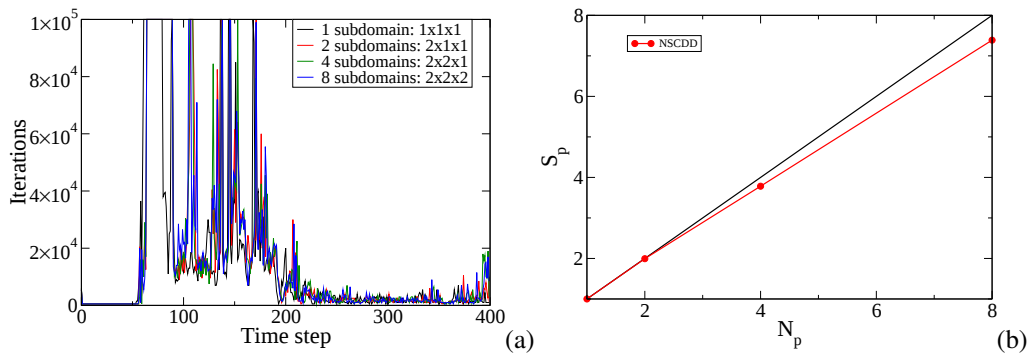


FIGURE 5.15 – Nombre d'itérations par pas de temps pour les différentes découpes en sous-domaines (1, 2, 4 et 8) (a) ; accélération parallèle en fonction du nombre de sous-domaines (b).

d'interpénétrations restant très faibles devant les dimensions des blocs de la structure maçonnée.

Le motif de fissuration en fin de calcul, sensiblement identique pour toutes les simu-

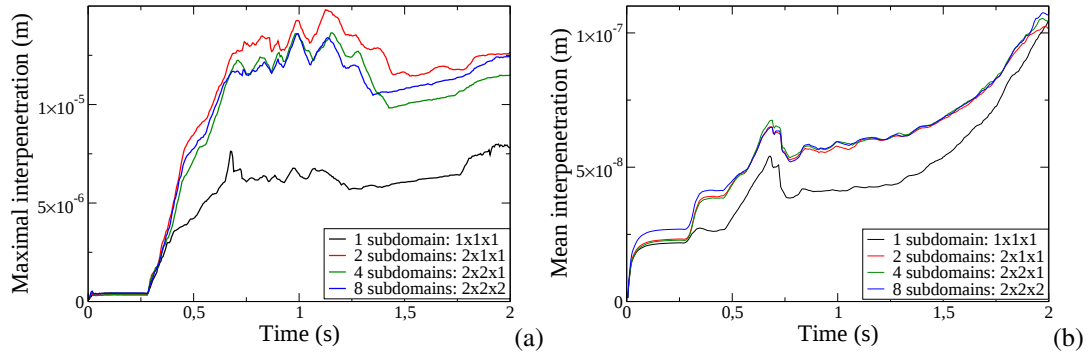


FIGURE 5.16 – Évolution des interpénéttrations maximale (a) et moyenne (b) au cours de la simulation pour les différentes découpes en sous-domaines.

lations réalisées, est présenté FIG.5.17. L'obtention d'un même profil de fissuration pour l'ensemble des partitionnements, couplé à une *accélération parallèle* quasi linéaire, permet de conclure à une bonne adaptation de la méthode de décomposition de domaine au calcul des maçonneries.

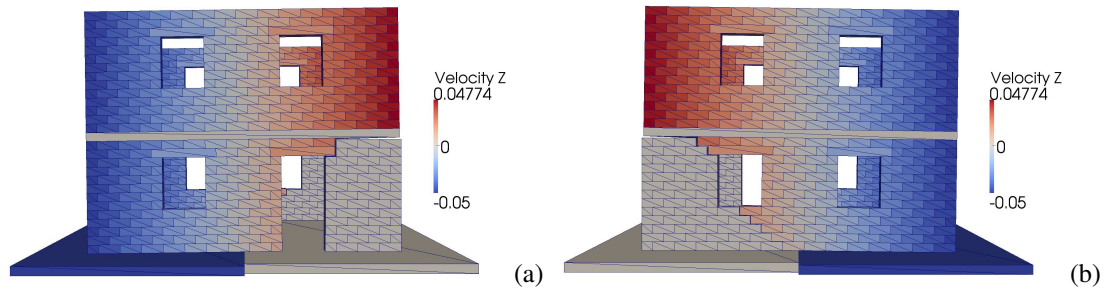


FIGURE 5.17 – Motifs de fissuration de la structure maçonnée en fin de tassement différentiel et vitesses des éléments discrets suivant z.

Discussion Les résultats présentés dans cette section pour une structure maçonnée R+1 sont très encourageants. Comme l'on pouvait s'y attendre, au vu des études menées sur les milieux granulaires, la stabilité du réseau de contact d'une maçonnerie permet une bonne efficacité de la méthode de décomposition de domaine. Contrairement aux analyses physiques utilisées pour vérifier la robustesse de la méthode, nous avons directement vérifié ici que les profils de fissuration calculés pour les versions mono-domaine et multi-domaines étaient identiques.

Conclusion

Nous avons présenté dans ce chapitre les premiers résultats d'efficacité de la méthode NSCDD, pour des simulations de milieux granulaires et de structures maçonnées. Ces résultats, obtenus dans un premier temps sur une machine comportant 48 cœurs, puis sur le centre de calcul HPC@LR, indiquent clairement que l'utilisation de cette méthode sur des exemples réalistes trouve tout son intérêt sur une architecture matérielle adaptée au calcul à mémoire distribué combinée à des bibliothèques d'échanges de messages efficaces.

L'implémentation de la méthode NSCDD dans la plate forme de calcul LMGC90 s'est alors montré performante, tant pour une simulation de milieu granulaire denses et de grande taille, que pour un tassement différentiel d'une petite structure maçonnée. Dans le cas de simulation quasi-statique, surtout si le réseau de contact évolue lentement, l'*accélération parallèle* obtenue se trouve être proche d'une *accélération parallèle* optimale. Pour un milieu granulaire agité (sous chargement dynamique), ou pour une compacité relativement faible devant celle correspondant à l'état de *random closed packing*, l'efficacité de la méthode est dégradée. Cela est dû à la nature de la méthode, issue de la dynamique des contact (NSCD), particulièrement adaptée aux milieux denses, en présence de nombreux contacts simultanés.

Plus généralement, les écoulements dynamiques de granulats semblent plus complexes à paralléliser du fait de la redistribution généralisée des contacts et des corps au cours du temps. Cependant, même pour les milieux granulaires denses, la méthode de décomposition de domaine proposée ne permet pas, en l'état, de diminuer le nombre d'itérations effectuées pour résoudre le problème contact : quelle que soit la méthode, le nombre d'itérations croît avec le nombre de particules. Dans le chapitre suivant, nous allons précisément tenter d'enrichir le modèle granulaire afin de supprimer cette tendance.

Chapitre 6

Enrichissement du problème d'interface

Dans ce sixième et dernier chapitre, nous proposons de revisiter les travaux initiés par [6] afin d'enrichir les algorithmes NSCDD et Schwarz-NSCD. Le constat de départ est la pauvreté du problème d'interface NSCDD ou des échanges de l'algorithme de Schwarz-NSCD. L'idée est de prendre en compte du réseau de contact sous-jacent, faisant émerger un comportement de structure à l'échantillon granulaire. L'enrichissement de la méthode NSCDD est alors privilégié et mène à une série d'algorithmes à deux DDM imbriquées via l'introduction d'une méthode de gradient conjugué parallèle pour la résolution du problème d'interface NSCDD enrichi. Un algorithme de résolution incomplète est finalement présenté.

Sommaire

1	Prise en compte du réseau de contact	122
1.1	Problème d'interface NSCDD enrichi	122
1.2	Schwarz-NSCD avec communications augmentées	123
1.3	Comparaison des méthodes de décomposition de domaine pour la dynamique des contacts	124
2	Stratégie de résolution à deux DDM imbriquées	126
2.1	Validation sur des cas-tests de petite dimension	128
2.2	Cas-test granulaire	133
3	Une approche multiéchelle en espace... et en temps	135
3.1	Algorithme de résolution incomplète	136
3.2	Premiers résultats et analyse	139

1 Prise en compte du réseau de contact

Les méthodes NSCDD et Schwarz-NSCD montrent de bonnes propriétés pour la parallélisation des calculs pour les de milieux granulaires denses. Il a été montré que le comportement global et micro-mécanique d'un essai granulaire typique (compactage biaxial) n'était pas influencé par le nombre de sous-domaines employés pour une simulation. De plus, le nombre d'itérations NLGS (pour une méthode séquentielle) ou DDM est sensiblement égal, ces méthodes de décomposition de domaine sont *extensibles* : la vitesse de convergence de ces algorithmes ne dépend pas, pour un échantillon comportant un nombre de corps conséquent, du nombre de sous-domaines. Cependant, lorsque le nombre de corps de l'échantillon croît fortement, le nombre d'itérations à convergence croît de même. Dans le premier cas, le problème linéaire est quasi-diagonal sans couplage entre interfaces d'un même sous-domaine. Dans le deuxième cas, les échanges entre sous-domaines ne concernent que la dynamique locale des grains d'interface. Les travaux initiés par Alart, Iceta et Dureisseix [6] tentent de surmonter cette difficulté par la prise en compte du treillis sous-jacent au milieu granulaire formé par le réseau des contacts.

Pour ce faire [6] propose d'introduire une direction de recherche tangente $(\tilde{r}_E, \tilde{v}_E)$, une fois obtenu les quantités (r_E, v_E) , satisfaisant les équations de la dynamique et vérifiant :

$$\begin{aligned}\tilde{R}_E &= H_E \tilde{r}_E \text{ et } \tilde{v}_E = H_E^T \tilde{V}_E, \\ (\tilde{r}_E - r_E) + l_E (\tilde{v}_E - v_E) &= 0,\end{aligned}\tag{6.1}$$

avec l_E un paramètre numérique de la méthode, homogène à une masse. Plus généralement, l_E peut être une matrice diagonale avec des coefficients associés aux contacts pour leurs composantes normale et tangentielle.

On va étudier plusieurs variantes se distinguant par l'*opérateur de compatibilité* utilisé dans la construction du problème d'interface enrichi. Le choix générique est l'opérateur de compatibilité H_E , par ailleurs également utilisé dans l'étape non-régulière par sous-domaine. L'étude asymptotique effectuée dans [6] démontre que le choix optimal – tout au moins dans le cas sans frottement – est l'opérateur noté G_E des contacts actifs à la solution, opérateur malheureusement inconnu a priori. Nous envisageons plus loin plusieurs alternatives d'opérateur G_E afin d'en analyser les performances. Nous pouvons ré-écrire la direction de recherche tangente $(\tilde{r}_E, \tilde{v}_E)$, sous la forme

$$\begin{aligned}\tilde{R}_E &= G_E \tilde{r}_E \text{ et } \tilde{v}_E = G_E^T \tilde{V}_E, \\ (\tilde{r}_E - r_E) + l_E (\tilde{v}_E - v_E) &= 0.\end{aligned}\tag{6.2}$$

1.1 Problème d'interface NSCDD enrichi

Dans le cas de l'enrichissement de la méthode NSCDD, le couple $(\tilde{r}_E, \tilde{v}_E)$ doit aussi assurer la continuité des vitesses d'interface. La dynamique par sous-domaine pour ces dernières quantités est,

$$\tilde{M}_E \tilde{V}_E - H_E \tilde{r}_E = R_E^d - A_{\Gamma E}^T F_\Gamma.\tag{6.3}$$

En substituant $\tilde{r}_E$ par son expression issue de l'équation (6.1), on obtient,

$$\tilde{M}_{\eta,E} \tilde{V}_E - H_E (r_E + l_E v_E) = R_E^d - A_{\Gamma E}^T F_\Gamma, \quad (6.4)$$

avec $\eta = 1/l_E$, $\tilde{M}_{\eta,E} = \tilde{M}_E + 1/\eta K_E$ et $K_E = H_E H_E^T$, cette dernière matrice contenant les informations du réseau de contacts grâce aux matrices de connectivité H_E et H_E^T . Comme dans le cas de la méthode NSCDD générique, l'équation de la dynamique est condensée sur l'interface et l'équation de continuité $\sum_E A_{\Gamma E} \tilde{V}_E = 0$ permet d'exprimer les inter-efforts F_Γ ,

$$X_\eta F_\Gamma = \sum_{E=1}^{N_{sd}} A_{\Gamma E} \tilde{M}_{\eta,E}^{-1} \left[R_E^d + H_E (r_E + l_E v_E) \right], \quad (6.5)$$

avec l'opérateur d'interface,

$$X_\eta = \sum_{E=1}^{N_{sd}} A_{\Gamma E} \tilde{M}_{\eta,E}^{-1} A_{\Gamma E}^T. \quad (6.6)$$

Nous reviendrons dans la section suivante aux formulations algorithmiques de la méthode NSCDD avec problème d'interface enrichi ainsi défini.

1.2 Schwarz-NSCD avec communications augmentées

La prise en compte de la direction de recherche numérique dans le contexte de l'algorithme Schwarz-NSCD, consiste, par analogie avec l'approche précédente, à considérer l'équation de la dynamique,

$$M_E \tilde{V}_E - \tilde{R}_E = R_E^d + R_E^{ddm}. \quad (6.7)$$

En exprimant $\tilde{R}_E$ à partir de l'équation (6.1) :

$$\tilde{R}_E = R_E - l_E K_E (\tilde{V}_E - V_E), \quad (6.8)$$

et en y substituant $\tilde{V}_E$ à partir de l'équation (6.7), on obtient les impulsions de contact augmentées,

$$\tilde{R}_E = (I + L_E M_E^{-1})^{-1} \left(R_E - L_E [M_E^{-1} (R_E^d + R_E^{ddm}) - V_E] \right). \quad (6.9)$$

Les impulsions de contact assurant l'interconnexion des différents domaines sont alors exprimées à l'aide des opérateurs $B_E B_{E*}^T$. Pour un sous-domaine E donné, on a,

$$v_E^{ddm} = H_E^T M_E^{-1} \sum_{E^* \neq E} B_E B_{E*}^T \tilde{R}_{E*}. \quad (6.10)$$

L'algorithme de Schwarz-NSCD avec communications augmentées est synthétisé ALG.6.

Algorithm 6 Algorithme de Schwarz avec communications augmentées**while** (critère de convergence non satisfait) **do**

Évaluation de

$$\tilde{R}_E = (I + L_E M_E^{-1})^{-1} \left(R_E - L_E [M_E^{-1} (R_E^d + R_E^{ddm}) - V_E] \right),$$

pour envoi aux sous-domaines interconnectés et évaluation de

$$\bar{v}_E^{ddm} = H_E^T M_E^{-1} \sum_{E^* \neq E} B_{EE^*} \tilde{R}_{E^*}.$$

Calcul de $(\bar{r}_E, \bar{v}_E)$ avec n_{GS} itérations NLGS sur

$$\begin{cases} W_E \bar{r}_E - \bar{v}_E = -v_E^d - \bar{v}_E^{ddm} \\ \mathcal{R}(\bar{v}_E, \bar{r}_E) = 0. \end{cases}$$

Mise à jour des inconnues de contact $(r_E, v_E) \leftarrow (\bar{r}_E, \bar{v}_E)$.**end while**

1.3 Comparaison des méthodes de décomposition de domaine pour la dynamique des contacts

On se propose ici de comparer les vitesses de convergence des méthodes de décomposition de domaine suivante :

- Schwarz-NSCD,
- Schwarz-NSCD avec communications augmentées (Schwarz-NSCD-EC),
- NSCDD,
- NSCDD avec problème d'interface enrichi (NSCDD-EP).

Deux problèmes 1D, donc sans mobilisation du frottement, et possédant une solution analytique unique sont envisagés. L'algorithme NSCD mono-domaine est également mis en œuvre sur ces exemples afin de pouvoir classer les méthodes.

Accélération	g_y	$= -1 \text{ m.s}^{-2}$
Masse des disques	M	$= 1 \text{ kg}$
Vitesse initiale	V^-	$= 0 \text{ m.s}^{-1}$
Diamètre des disques	$\emptyset$	$= 2 \text{ m}$
Pas de temps	Δt	$= 1 \text{ s}$

TABLE 6.1 – Paramètres numériques des problèmes d'équilibre.

Les deux problèmes académiques traités sont entièrement définis par les paramètres du tableau 6.1 et les numérotations de la figure 6.1.

Les figures 6.2(a) et 6.2(b) montrent des comportements très différents des méthodes étudiées. Ces tendances sont tout de même à relativiser car les problèmes traités sont

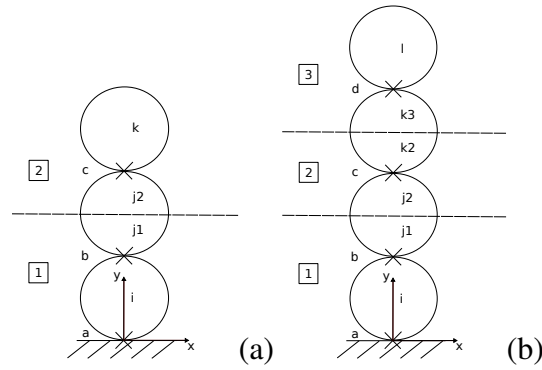


FIGURE 6.1 – Problèmes d'équilibre considérés : colonne de 3 disques sous-structurée en 2 sous-domaines (a) ; colonne de 4 disques sous-structurée en 3 sous-domaines (b).

	Problème n°1	Problème n°2
Impulsions aux contacts	$r_a = -3 N.s$ $r_b = -2 N.s$ $r_c = -1 N.s$	$r_a = -4 N.s$ $r_b = -3 N.s$ $r_c = -2 N.s$ $r_d = -1 N.s$
Vitesses des disques	$V_n = 0 m.s^{-1}, n = i, j, k$	$V_n = 0 m.s^{-1}, n = i, j, k, l$

TABLE 6.2 – Solutions des problèmes d'équilibre d'une colonne de 3 (Problème n°1) et 4 (Problème n°2) disques.

purement académiques et différent de beaucoup des problèmes granulaires réalistes. Cependant, on constate que la méthode NSCDD-EP assure un nombre constant d'itérations pour les deux problèmes, ce qui est cohérent avec les résultats obtenus dans [6] : le problème d'interface enrichi permet ici de calculer des conditions aux limites absorbantes. Le cas de la méthode de Schwarz est plus délicat à analyser, dans la mesure où des gains sont obtenus par rapport aux versions génériques, mais que la vitesse de convergence dépend du nombre d'inconnues du problème et du nombre de sous-domaines.

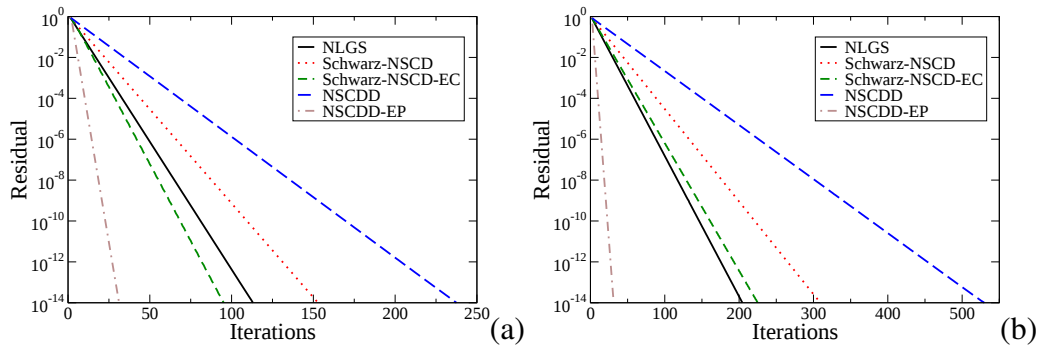


FIGURE 6.2 – Exemples académiques de convergence des méthodes discutées.

Discussion Ces deux méthodes enrichies ont des structures très différentes. Pour la méthode NSCDD, l'enrichissement conduit à un problème d'interface couplant fortement l'ensemble des sous-domaines, alors que l'enrichissement de la méthode Schwarz-NSCD ne présente que des communications augmentées entre sous-domaines directement interconnectés. La résolution du problème d'interface NSCDD enrichi se révèle coûteuse et suppose, soit une centralisation des différentes matrices $A_{\Gamma E} \tilde{M}_{\eta, E}^{-1} A_{\Gamma E}^T$ sur un sous-domaine hôte afin de résoudre de façon directe l'équation d'interface enrichie, soit la mise en œuvre d'une méthode itérative (e.g. de type gradient conjugué), s'apparentant aux méthodes de résolution employées pour la résolution du problème d'interface de type FETI. L'évaluation des quantités de couplage R_E^{ddm} de la méthode Schwarz-NSCD est sans doute plus simple, puisque le système linéaire à résoudre est entièrement défini sous-domaine par sous-domaine, mais il est à remarquer que la matrice $I + l_E K_E M_E^{-1}$ est a priori non symétrique et que l'absence de problème global ne permet pas, en l'état, un couplage fort des différents sous-domaines. Pour ces raisons, nous privilégions par la suite le développement de la méthode NSCDD avec problème d'interface enrichi.

2 Stratégie de résolution à deux DDM imbriquées

Le problème d'interface NSCDD enrichi (6.5), présenté ci dessus, est un problème global faisant intervenir le réseau d'effort de l'ensemble de l'échantillon. La structure de ce problème est comparable à celle des problèmes d'élasticité linéaire en quasi-statique (le comportement aux contacts étant régularisé). Pour résoudre efficacement ce recollement d'interface, il est nécessaire de recourir à une méthode itérative (la matrice X_η étant symétrique définie positive, l'algorithme du gradient conjugué est applicable).

Algorithm 7 NSCDD – version enrichie ; algorithme à deux DDM imbriquées

while (critères de convergence de volume et d'interface non satisfaits) **do**

Étape 1 : En parallèle pour $E = 1, \dots, N_{sd}$: évaluation de v_E^Γ

Calcul de (r_E, v_E) avec n_{GS} itérations NLGS sur :

$$\begin{cases} \tilde{W}_E r_E - v_E = -v_E^d + v_E^\Gamma \\ \mathcal{R}(v_E, r_E) = 0 \end{cases}$$

Étape 2 : sur l'interface

while (critère de convergence du gradient conjugué non satisfait) **do**

Itérations du gradient conjugué parallèle sur F_Γ :

$$X_\eta F_\Gamma = \sum_{E=1}^{N_{sd}} A_{\Gamma E} M_{\eta, E}^{-1} \left[R_E^d + H_E (r_E + l_E v_E) \right]$$

end while

end while

Algorithm 8 Gradient conjugué parallèle sur le problème d'interface NSCDD enrichi**Initialisation**

Calcul du *membre de droite* par sous-domaine, sommation sur l'interface et mise à jour par sous-domaine,

$$C_{\Gamma_E} = A_{\Gamma_E} \left[\tilde{M}_{\eta,E}^{-1} \left(R_E + l_E v_E + R_E^d \right) \right], \quad C_\Gamma = \sum_E B_{\Gamma\Gamma_E} C_{\Gamma_E}, \quad C_{\Gamma_E} = B_{\Gamma\Gamma_E}^T C_\Gamma$$

Initialisation du *résidu* avec une valeur arbitraire de $F_{\Gamma_E}^0$ (*e.g.* = 0), sommation sur l'interface et mise à jour par sous-domaine,

$$R_{\Gamma_E}^0 = C_{\Gamma_E} - \left[X_{\eta,E} F_{\Gamma_E}^0 \right], \quad R_\Gamma^0 = \sum_E B_{\Gamma\Gamma_E} R_{\Gamma_E}^0, \quad R_{\Gamma_E}^0 = B_{\Gamma\Gamma_E}^T R_\Gamma^0$$

Initialisation de la *direction de descente* $D_{\Gamma_E}^0 = R_{\Gamma_E}^0$

Initialisation de Q_{Γ_E} , sommation sur l'interface et mise à jour par sous-domaine,

$$\left[Q_{\Gamma_E}^0 = X_{\eta,E} D_{\Gamma_E}^0 \right], \quad Q_\Gamma^0 = \sum_E B_{\Gamma\Gamma_E} Q_{\Gamma_E}^0, \quad Q_{\Gamma_E}^0 = B_{\Gamma\Gamma_E}^T Q_\Gamma^0$$

Initialisation de $\alpha^0 = \frac{(R_\Gamma^0, D_\Gamma^0)}{(D_\Gamma^0, Q_\Gamma^0)}$ et $F_{\Gamma_E}^0 = F_{\Gamma_E}^0 + \alpha^0 D_{\Gamma_E}^0$

Itérations

for k=1,..., Iter_max **do**

Calcul du résidu local, sommation sur l'interface globale et mise à jour par sous-domaine,

$$R_{\Gamma_E}^k = R_{\Gamma_E}^k - \alpha^{k-1} Q_{\Gamma_E}^k, \quad R_\Gamma^k = \sum_E B_{\Gamma\Gamma_E} R_{\Gamma_E}^k, \quad R_{\Gamma_E}^k = B_{\Gamma\Gamma_E}^T R_\Gamma^k$$

if ($\|R_\Gamma^k\|/\|C_\Gamma\| < \varepsilon$) **then**

Arrêt des itérations du gradient conjugué

end if

Calcul du β de conjugaison : $\beta^k = (R_\Gamma^k, Q_\Gamma^{k-1})/(D_\Gamma^{k-1}, Q_\Gamma^{k-1})$

Calcul de la nouvelle direction de descente locale, sommation sur l'interface globale et mise à jour par sous-domaine,

$$D_{\Gamma_E}^k = -R_{\Gamma_E}^k + \beta^k D_{\Gamma_E}^{k-1}, \quad D_\Gamma^k = \sum_E B_{\Gamma\Gamma_E} D_{\Gamma_E}^k, \quad D_{\Gamma_E}^k = B_{\Gamma\Gamma_E}^T D_\Gamma^k$$

Calcul de $Q_{\Gamma_E}^k$, sommation sur l'interface globale et mise à jour par sous-domaine,

$$Q_{\Gamma_E}^k = \left[X_{\eta,E} D_{\Gamma_E}^k \right] + \beta^k Q_{\Gamma_E}^{k-1}, \quad Q_\Gamma^k = \sum_E B_{\Gamma\Gamma_E} Q_{\Gamma_E}^k, \quad Q_{\Gamma_E}^k = B_{\Gamma\Gamma_E}^T Q_\Gamma^k$$

Mise à jour de $\alpha^k = (R_\Gamma^k, D_\Gamma^k)/(D_\Gamma^k, Q_\Gamma^k)$

Mise à jour des multiplicateurs d'interface $F_{\Gamma_E}^k = F_{\Gamma_E}^{k-1} + \alpha^k D_{\Gamma_E}^k$

end for

L'algorithme 7 présente la version enrichie de l'algorithme NSCDD (ALG.2 du chapitre 1) sur un pas de temps. La résolution du problème consiste alors en deux méthodes de décomposition de domaine imbriquées :

- itérations globales de la méthode NSCDD,
- itérations du gradient conjugué parallèle sur le problème de recollement d'interface enrichi.

On donne à titre indicatif l'algorithme du gradient conjugué parallèle développé spécifiquement dans la plate-forme de calcul LMGC90 (ALG.8). Les principales étapes suivies sont classiques, mais font apparaître des échanges de messages entre sous-domaines afin de paralléliser l'algorithme en prenant appui sur la sous structuration de l'échantillon. De plus, comme pour les méthodes de complément de Schur, les produits matrice-vecteur $\tilde{M}_{\eta,E}^{-1}b$ et $X_{\eta,E}b = A_{\Gamma E}M_{\eta,E}^{-1}A_{\Gamma E}^T b$ reviennent à une résolution de système linéaire (étapes encadrées de l'algorithme 8). La résolution, locale pour chaque sous-domaine, des équations de la forme

$$\tilde{M}_{\eta,E}^{-1}b = x, \quad (6.11)$$

c'est à dire le système linéaire

$$\tilde{M}_{\eta,E}x = b, \quad (6.12)$$

est mise en œuvre en exploitant le caractère creux de la matrice $\tilde{M}_{\eta,E}$, par appel à la bibliothèque de résolution de systèmes linéaires MUMPS.

2.1 Validation sur des cas-tests de petite dimension

Afin de valider l'implémentation à deux DDM imbriquées présentée ci-dessus, nous allons ici ré-explore les cas-tests présentés dans [6] (FIG.6.3(a), FIG.6.4(a) et FIG.6.5(a)). Sur chacun de ces exemples, nous proposons d'étudier les cas

- sans frottement ($\mu = 0$),
- avec frottement sec ($\mu = 0, 3$).

De plus, nous allons considérer deux types d'*opérateurs de compatibilité* pour la définition du problème d'interface enrichi :

- G_E tel que $G_E r_E = H_E r_E$ (pour cela, il suffit de ne prendre en compte que les contacts actifs dans la construction de K_E , soit $K_E = G_E G_E^T$),
- G'_E tel que $G_E'^T V_E = 0$ (ce qui est effectué en ne prenant en compte que les composantes normales des contacts actifs dans la construction de K'_E , soit $K'_E = G'_E G_E'^T$).

Afin de mettre en évidence une éventuelle accélération de la convergence du problème d'interface en fonction de l_E , deux algorithmes avec problème d'interface enrichi sont comparés. Le premier, auquel on fera par la suite référence par "Enriched algorithm 1" – AE1, consiste à effectuer une itération NLGS (soit $n_{GS} = 1$ dans l'étape 1 de ALG.7), suivie d'une résolution du problème d'interface (étape 2 de ALG.7) jusqu'à convergence vis-à-vis du critère en volume (équations (1.16) ou (1.17)) et d'interface (équations (2.8) ou (2.10)). Cet algorithme est résumé en ALG.9. Le second algorithme étudié (nommé par la suite "Enriched algorithm 2" – AE2) consiste, dans un premier temps, à itérer sur les

Algorithm 9 NSCDD “Enriched algorithm 1” – AE1

```

for  $k_1 = 1, \dots, It_{max1}$  do
  Étape 1 : En parallèle pour  $E = 1, \dots, N_{sd}$ 
    Itération NLGS
  Étape 2 : Sur l'interface
    Résolution du problème d'interface enrichi
  if (Convergences volumique et d'interface atteintes) then
     $It_1 = k_1$  et sortie de la boucle for
  end if
end for

```

contacts (étape 1) puis sur l'interface (étape 2) jusqu'à convergence des multiplicateurs de recollement d'interface (équations (2.8) ou (2.10)), puis, après convergence sur l'interface, à itérer uniquement sur les contacts (indépendamment pour chaque sous-domaine), jusqu'à convergence en volume (équations (1.16) ou (1.17)). Cet algorithme est résumé en ALG.10. Il permet de mettre en évidence la vitesse de convergence du problème d'interface en fonction du paramètre d'enrichissement l_E . Pour ces deux algorithmes, l'opérateur de compatibilité G_E (alternativement G'_E) est redéfini après chaque étape NLGS, afin de mettre à jour les statuts des contacts.

Algorithm 10 NSCDD “Enriched algorithm 2” – AE2

```

for  $k_2 = 1, \dots, It_{max2}$  do
  Étape 1 : En parallèle pour  $E = 1, \dots, N_{sd}$ 
    Itération NLGS
  Étape 2 : Sur l'interface
    Résolution du problème d'interface enrichi
  if (Convergence sur l'interface atteinte) then
     $It_2 = k_2$  et sortie de boucle for
  end if
end for
for  $k_3 = 1, \dots, It_{max3}$  do
  Étape 1 : En parallèle pour  $E = 1, \dots, N_{sd}$ 
    Itération NLGS
  if (Convergence en volume atteinte) then
     $It_3 = k_3$  et sortie de la boucle for
  end if
end for

```

Discussion. Les expériences numériques menées sur les trois exemples à respectivement 4, 8 et 12 disques permettent de valider l'implémentation de l'algorithme à deux DDM imbriquées. En effet, pour ces trois exemples, les résultats obtenus pour les cas

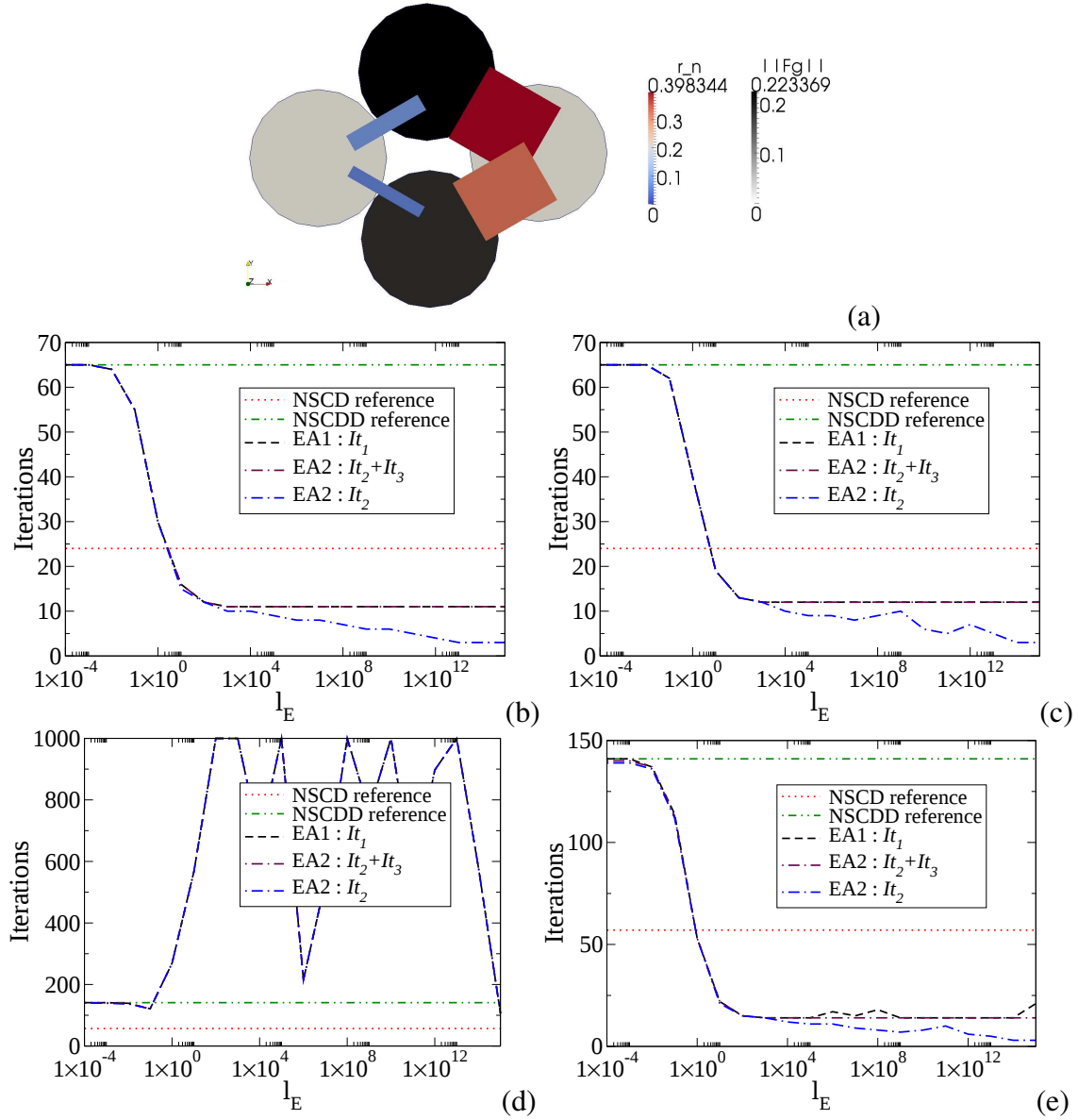


FIGURE 6.3 – (a) : exemple à 4 disques (impulsion imposée sur le disque de droite $F^d = [-1, 0.1]$) ; norme des inter-impulsions $\|F_T\|$ et réactions normales aux contacts r_n . De (b) à (e) : nombre d'itération à convergence en fonction de l_E ;

(b) : $\mu = 0$ et $K_E = G'_E G'^T_E$;

(c) : $\mu = 0$ et $K_E = G_E G^T_E$;

(d) : $\mu = 0,3$ et $K_E = G'_E G'^T_E$;

(e) : $\mu = 0,3$ et $K_E = G_E G^T_E$.

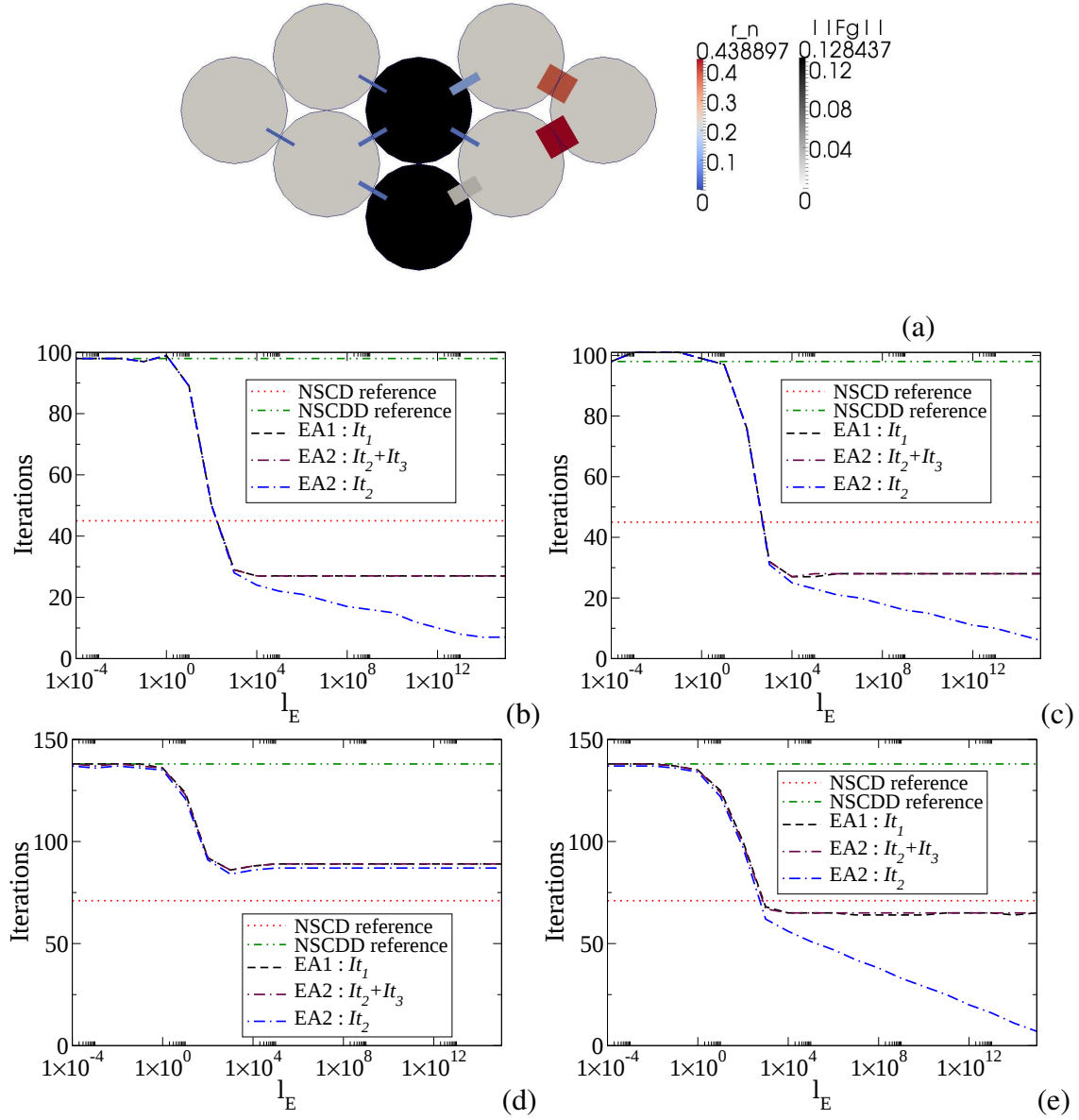


FIGURE 6.4 – (a) : exemple à 8 disques (impulsion imposée sur le disque de droite $F^d = [-1, 0.1]$) ; norme des inter-impulsions $\|F_T\|$ et réactions normales aux contacts r_n . De (b) à (e) : nombre d'itération à convergence en fonction de l_E ;

(b) : $\mu = 0$ et $K_E = G'_E G_E^T$;

(c) : $\mu = 0$ et $K_E = G_E G_E^T$;

(d) : $\mu = 0,3$ et $K_E = G'_E G_E^T$;

(e) : $\mu = 0,3$ et $K_E = G_E G_E^T$.

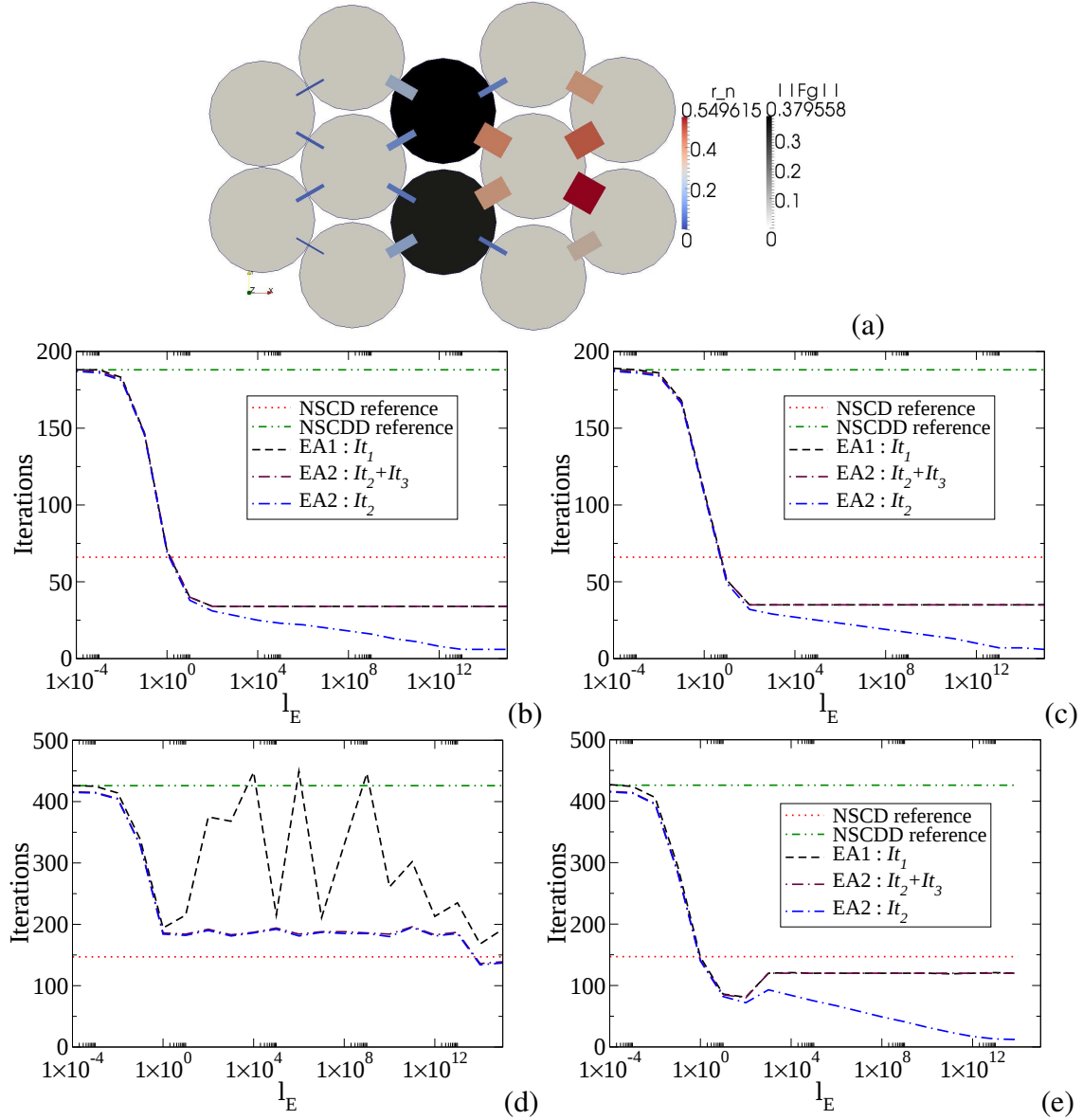


FIGURE 6.5 – (a) : exemple à 12 disques (impulsion imposée sur les deux disques de droite $F^d = [-1, 0.1]$); norme des inter-impulsions $\|F_\Gamma\|$ et réactions normales aux contacts r_n . De (b) à (e) : nombre d'itération à convergence en fonction de l_E ;

(b) : $\mu = 0$ et $K_E = G'_E G_E^T$;

(c) : $\mu = 0$ et $K_E = G_E G_E^T$;

(d) : $\mu = 0,3$ et $K_E = G'_E G_E^T$;

(e) : $\mu = 0,3$ et $K_E = G_E G_E^T$.

sans frottement (les seuls étudiés en [6]) sont cohérents avec les résultats des travaux précédents. En particulier, il a été montré dans cet article que, asymptotiquement (lorsque l_E tend vers l'infini) et pour un cas limite rigide (c'est à dire un cas –hypothétique– où les vitesses relative v_E de l'échantillon sont nulles) les deux étapes de l'algorithme 7 sont découplées. Pour les exemples sans frottement FIG.6.3(b) et (c), FIG.6.4(b) et (c), FIG.6.5(b) et (c), le nombre d'itérations It_2 tend en effet vers 1 pour de grandes valeurs de l_E , alors que $It_2 + It_3 \simeq It_1$: la convergence en volume est alors indépendante du nombre d'itérations pour converger sur l'interface.

Les cas-tests avec frottement ($\mu = 0,3$) sont plus complexes à analyser. En effet, la relation linéaire entre les impulsions de contact tangentielles et les vitesses relatives de glissement n'a plus de sens physique fort (pour donner une image, cette relation linéaire impliquerait une impulsion visqueuse croissante avec la vitesse de glissement des corps, ce qui n'a pas de sens physique dans le cas d'un contact avec frottement sec).

Cependant, les résultats obtenus ne suivent pas cette logique. Pour l'exemple à 12 disques avec frottement et $K'_E = G'_E G_E'^T$ (FIG.6.5(d)) on obtient $It_1 > It_2 + It_3$, ce qui semble difficile à interpréter. Plus généralement, une instabilité apparaît FIG.6.3(d) et FIG.6.5(d) pour les algorithmes enrichis avec $K'_E = G'_E G_E'^T$, alors que dans le cas $K_E = G_E G_E^T$ les résultats sont meilleurs. Nous verrons par la suite que pour des tests granulaires comportant un plus grand nombre de disques, le cas $K'_E = G'_E G_E'^T$ est satisfaisant.

2.2 Cas-test granulaire

Afin de compléter cette étude sur un seul pas de temps, considérons un exemple granulaire de taille réduite.

Phase de préparation. L'échantillon est constitué de 730 disques préalablement déposés dans une boîte rigide dont les murs sont constitués de clusters de disques. L'état déposé est issu d'un chargement gravitaire avec le vecteur d'accélération g porté par l'axe y , jusqu'à stabilisation de l'échantillon.

Chargement imposé. La simulation considérée consiste à imposer une configuration tournée de l'échantillon. La rotation de l'échantillon dans le repère global est obtenue en redéfinissant le vecteur gravité, comme représenté FIG.6.6,

$$g' = [\sin(\theta), -\cos(\theta), 0] \times ||g||.$$

Discussion. Les résultats en termes de nombre d'itérations à convergence sont présentés FIG.6.7 pour une décomposition en deux sous-domaines suivant la grille de partitionnement (1×2) . D'importantes différences apparaissent entre les comportements des algorithmes EA1 et EA2 pour cet exemple vis-à-vis de ceux obtenus pour 4, 8 et 12 disques, du fait de l'augmentation du nombre de particules et l'introduction de contraintes cinématiques (parois fixes).

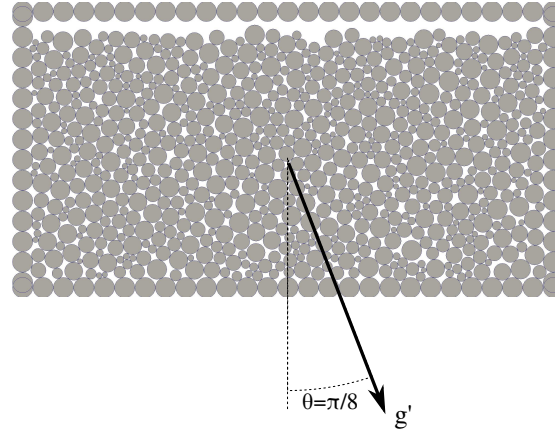


FIGURE 6.6 – Exemple à 730 disques avec gravité inclinée sur un pas de temps ; géométrie de l'échantillon et chargement imposé.

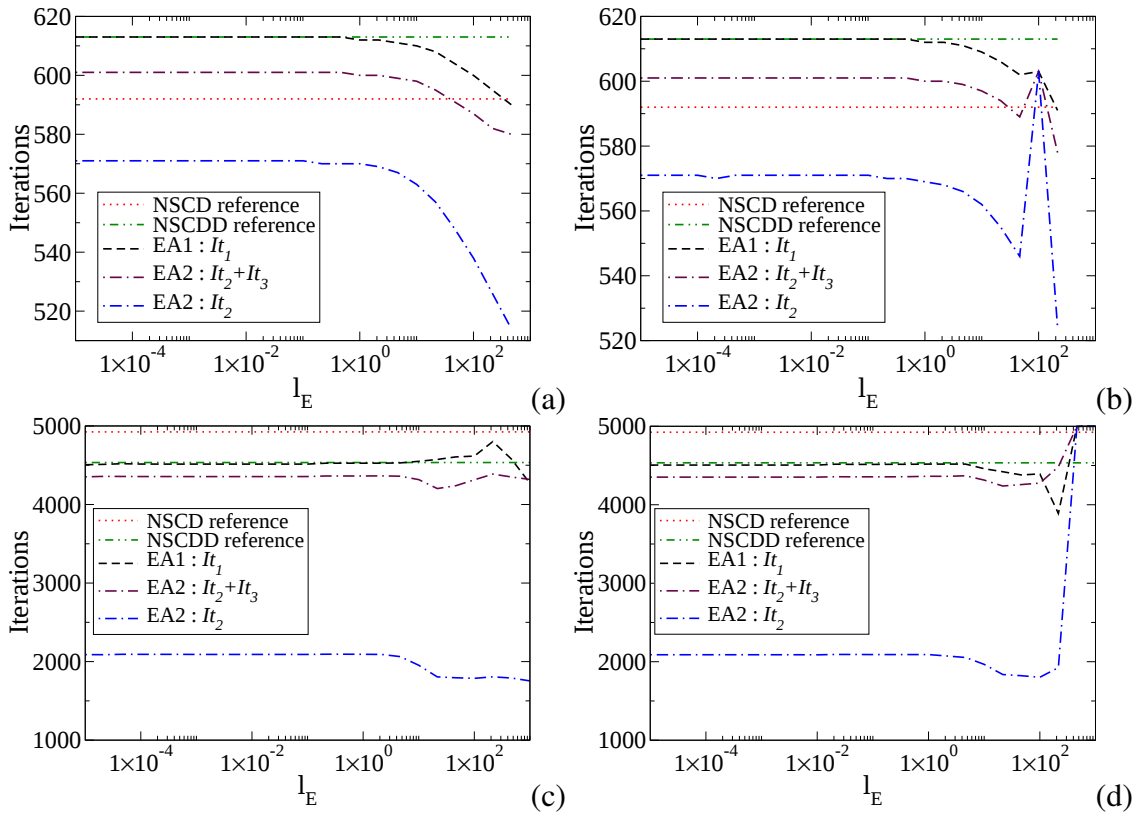


FIGURE 6.7 – Exemple à 730 disques avec gravité inclinée sur un pas de temps.

De (b) à (d) : nombre d'itérations à convergence en fonction de l_E .

(a) : contact sans frottement ($\mu = 0$) et $K'_E = G'_E G'^T_E$.

(b) : contact sans frottement ($\mu = 0$) et $K_E = G_E G^T_E$.

(c) : contact frottant ($\mu = 0,3$) et $K'_E = G'_E G'^T_E$.

(d) : contact frottant ($\mu = 0,3$) et $K_E = G_E G^T_E$.

On constate que le nombre d'itérations It_2 pour le cas sans frottement (FIG.6.7(a) et FIG.6.7(b)) :

- reste constant pour $l_E < 1$ (y compris pour $l_E = 0$, i.e. avec un problème d'interface NSCDD générique), avec $It_2 < It_1$, contrairement aux trois exemples précédents où $It_2 \simeq It_1$ pour de faibles valeurs de l_E ,
- décroît pour $l_E \in [1, 10^2]$,
- diverge pour $l_E > 5 \times 10^2$ (zone non représentée).

Le gain (nombre d'itérations NSCDD / It_2) optimal obtenu est bien plus faible que pour les exemples précédents. Dans le cas avec frottement, des résultats similaires sont obtenus, avec une décroissance moins marquée pour $l_E \in [1, 10^2]$.

Pour toutes ces études, on constate par ailleurs que $It_2 + It_3 < It_1$: les algorithmes EA1 et EA2 ne sont donc plus équivalents pour une simulation mettant en jeu un échantillon granulaire comportant des centaines de particules, un chargement en effort volumique et des contraintes cinématiques de type vitesses imposées.

La conclusion de cette étude est différente de celle des trois tests précédents concernant le choix de G_E et plus conforme à l'intuition. Pour $l_E < 10^1$, la prise en compte de l'opérateur de compatibilité G'_E donne des résultats en terme de convergence sensiblement égaux au cas $K_E = G_E G_E^T$, mais se trouve être plus stable pour des valeurs supérieures de l_E . Par la suite, on gardera donc G'_E .

3 Une approche multiéchelle en espace... et en temps

Considérons maintenant la simulation du comportement de ce même échantillon granulaire, non plus sur un seul pas de temps mais au cours d'un processus pour lequel le vecteur gravité $g(\theta)$ effectue une rotation de $\pi/4$, comme schématisé FIG.6.8.

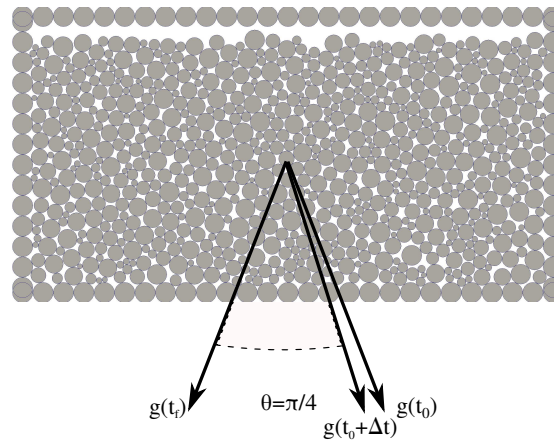


FIGURE 6.8 – Échantillon de 730 disques avec gravité tournante ; processus au cours duquel le vecteur gravité g effectue une rotation de $\pi/4$, en 50 pas de temps.

On constate (FIG.6.9 et FIG.6.10) que les deux algorithmes avec enrichissement du problème d'interface NSCDD ne permettent pas de diminuer significativement le nombre

d'itérations à convergence vis-à-vis des références NSCD et NSCDD. De plus, les interpénétrations moyennes et maximales sont plus importantes dans le cas des algorithmes enrichis (bien que ces interpénétrations soient très faibles devant le rayon moyen des disques, fixé arbitrairement à 1m).

Cette tendance est de plus identique dans les cas sans (FIG.6.9) et avec frottement (FIG.6.10), pour une décomposition en deux sous-domaines suivant la grille de partitionnement (1×2). Ceci rejoint des constatations faites par ailleurs sur la méthode de Gauss-Seidel qui peut être fortement perturbée à chaque itération par la résolution du problème enrichi global et ce d'autant plus que ce problème enrichi est "raide" quand l_E est grand. Ceci est une motivation supplémentaire à la stratégie développée dans la sous-section suivante.

Du fait du coût important du problème d'interface enrichi, ces deux algorithmes (EA1 et EA2) s'avèrent inefficaces pour la simulation d'un tel processus granulaire et perturbent de surcroît la solution obtenue (augmentation des interpénétrations).

3.1 Algorithme de résolution incomplète

Les études ci-dessus ont une conclusion contrastée. En effet, le coût de l'enrichissement est trop important pour être compensé par les gains de convergence obtenus. Cela est vrai pour les petits exemples à 4, 8 et 12 disques, mais surtout pour un échantillon granulaire de dimension plus importante. Les auteurs de [6] avancent deux caractéristiques pouvant expliquer ce résultat : (i) la nature rigide des particules lors du processus dynamique et (ii) le caractère non régulier des interactions. En l'état, les algorithmes enrichis AE1 et AE2 ne peuvent donc être utilisés tel quel.

Cependant, cette approche d'enrichissement, associée au comportement multiéchelle en espace et en temps des milieux granulaires, semble justifier un schéma de résolution incomplet sur un pas de temps. L'idée est de combiner une résolution explicite du problème d'interface (linéaire) à l'échelle de sous-domaines (niveau macro), basé sur le réseau des contacts actifs définis en début de pas, avec une résolution implicite des problèmes non réguliers dans chaque sous-domaine contact par contact (niveau micro).

Cette stratégie postule que les efforts d'interface participant à la tenue globale du milieu évoluent plus lentement que les impulsions locales régies par la dynamique non-régulières. Les travaux de Radjai et Jean [67] sur la bimodalité du réseau de contact mettent par ailleurs en évidence que le réseau fort, participant à la tenue mécanique, est dominé par des impulsions normales dans des contacts mobilisant peu le glissement tangentiel. Dans ce sens, comme il est possible de choisir un opérateur de compatibilité G_E pour les quantités $(\tilde{r}_E, \tilde{v}_E)$ différent pour les deux étapes des algorithmes enrichis, une première façon de sélectionner cet opérateur est de prendre G_E tel que $G_E^T V_E = 0$ (opérateur de sélection des composantes normales des contacts actifs). L'algorithme 11 est une proposition de mise en œuvre d'un tel schéma, avec une étape de mise à jour des contacts actifs réalisée en début de pas de temps, via une itération NLGS unique.

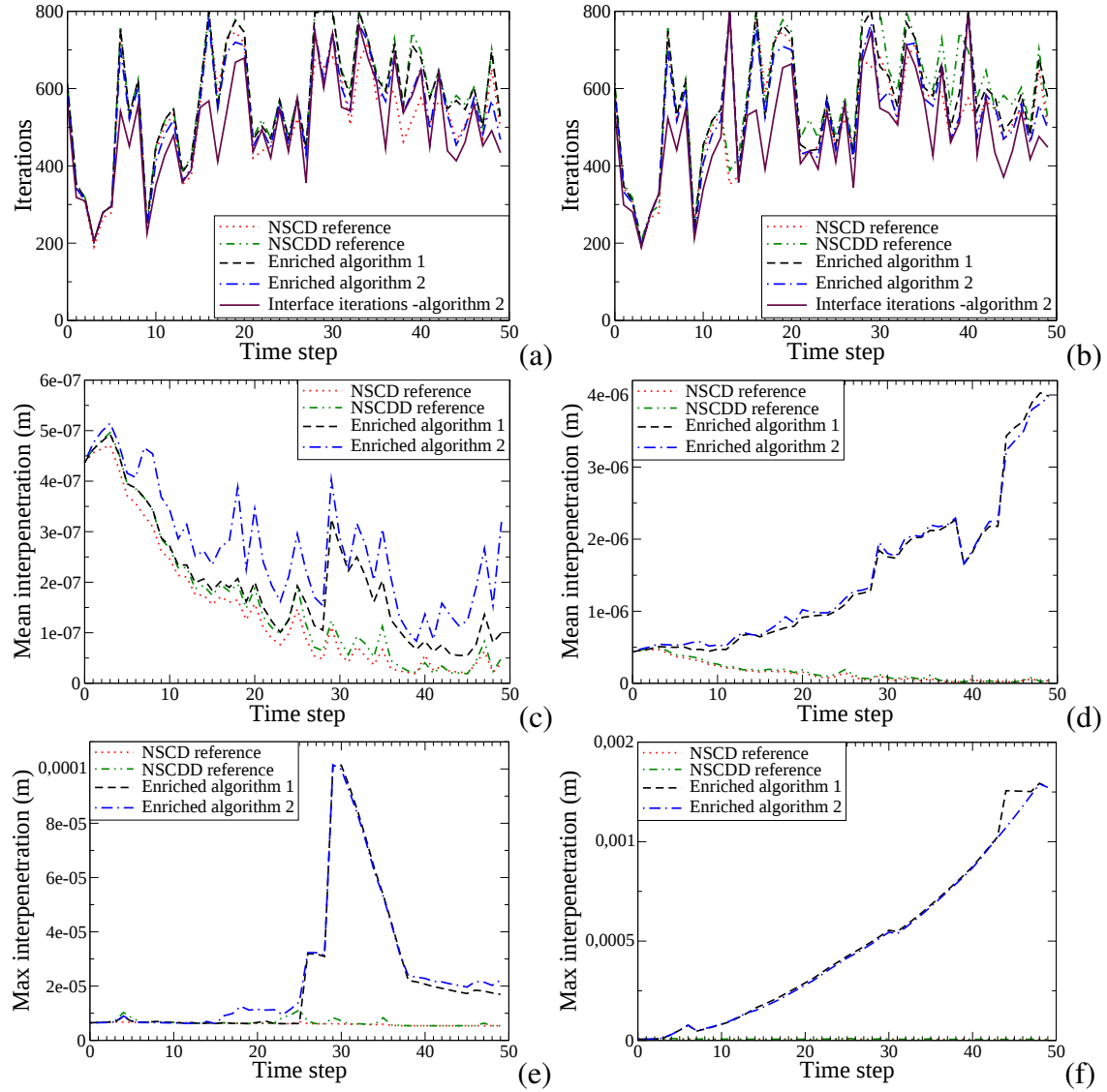


FIGURE 6.9 – Échantillon de 730 disques avec gravité tournante, **sans frottement** ($\mu = 0$) et $K'_E = G'_E G_E^T$.

Nombre d'itérations à convergence en fonction du pas de temps pour $l_E = 10$ (a) et $l_E = 100$ (b).

Interpénétration moyenne en fonction du pas de temps pour $l_E = 10$ (c) et $l_E = 100$ (d).

Interpénétration maximale en fonction du pas de temps pour $l_E = 10$ (e) et $l_E = 100$ (f).

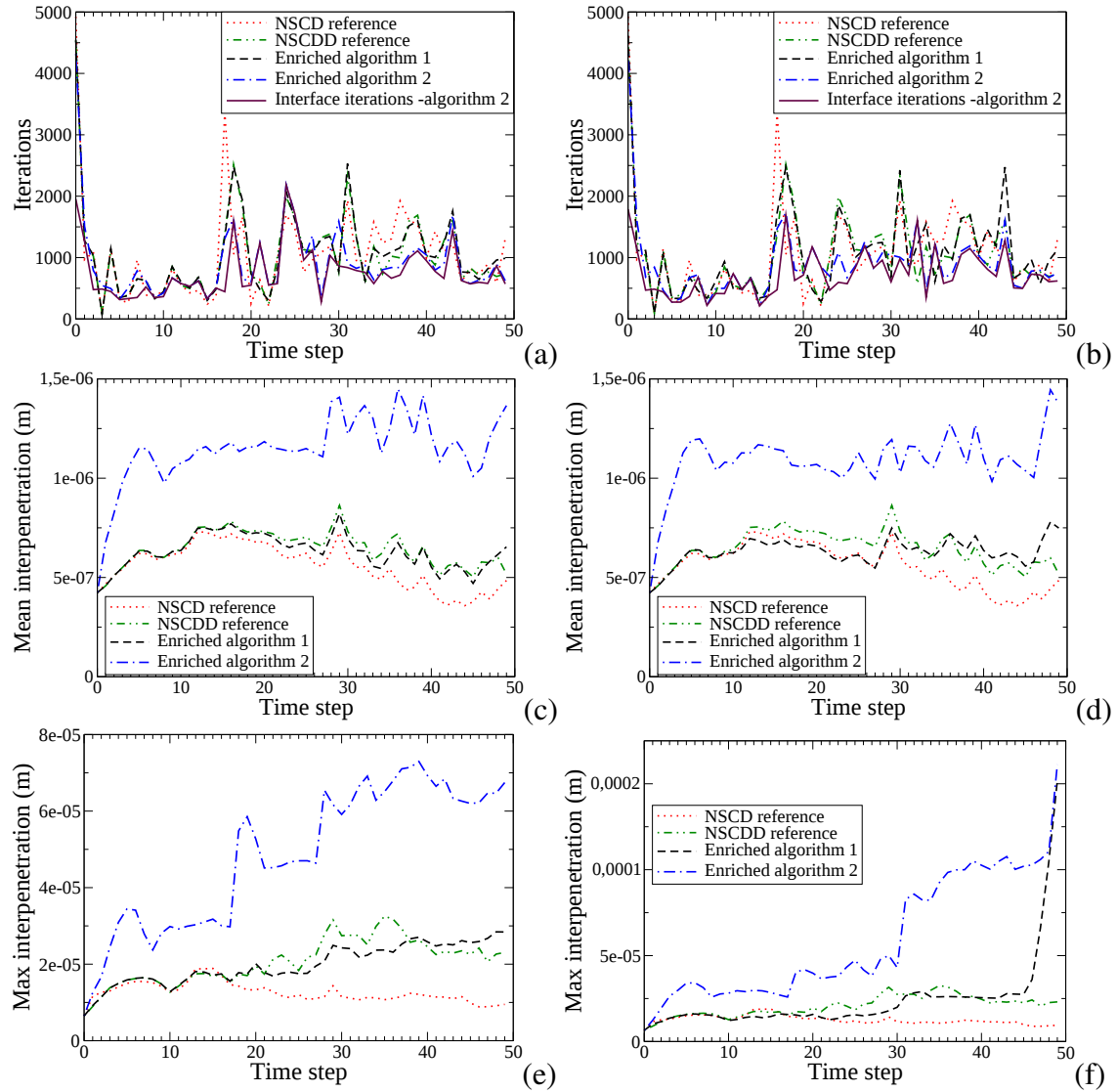


FIGURE 6.10 – Échantillon de 730 disques avec gravité tournante, **avec frottement** ($\mu = 0,3$) et $K'_E = G'_E G'^T_E$. Nombre d'itérations à convergence en fonction du pas de temps pour $l_E = 10$ (a) et $l_E = 100$ (b).

Interpénétration moyenne en fonction du pas de temps pour $l_E = 10$ (c) et $l_E = 100$ (d).

Interpénétration maximale en fonction du pas de temps pour $l_E = 10$ (e) et $l_E = 100$ (f).

3.2 Premiers résultats et analyse

Nous proposons de mettre en œuvre cet algorithme EA3 sur le problème d'évolution de l'échantillon granulaire de 730 disques avec rotation du vecteur gravité. Cet exemple rentre en effet dans la catégorie des problèmes d'évolution où le réseau de contact est relativement stable alors que la distribution des forces de contact évolue de façon conséquente, ce qui est cohérent avec les hypothèses sous-tendant la démarche de résolution incomplète développée à la sous-section précédente. La résolution incomplète nous oblige par ailleurs à qualifier la solution obtenue en contrôlant un indicateur de qualité le plus physique possible, ici l'interpénétration, en moyenne ou maximale.

Algorithm 11 NSCDD “Enriched algorithm 3” – EA3

for $i = 1, \dots, N_{\Delta t}$ **do** {Boucle sur les pas de temps}
 Possible nouvelle décomposition en sous-domaine
 Détection des contacts, évaluation des impulsions extérieures et des vitesses données aux contacts

Problème d'interface explicite

En parallèle pour $E = 1, \dots, N_{sd}$
 Mise à jour des statuts des contacts
 Sur l'interface
 Résolution du problème d'interface enrichi

Problèmes NSCD par sous-domaines

for $k_4 = 1, It_{max4}$ **do**
 En parallèle pour $E = 1, \dots, N_{sd}$
 Itération NLGS
if (Convergence en volume atteinte) **then**
 $It_4 = k_4$ et sortie de la boucle **for**
end if
end for

Évaluation de la vitesse et de la position des corps
end for

Les résultats en termes de nombre d'itérations (soit It_4 défini ALG.11), interpénétrations moyenne et maximale sont présentés FIG.6.11, pour la grille de partitionnement en sous domaines (1×2) et un coefficient de frottement $\mu = 0,3$.

Le nombre d'itérations de l'algorithme EA3 est comparé FIG.6.11(a) aux références NSCD et NSCDD. Une diminution modérée du nombre d'itérations est obtenue, mais ce nombre n'évolue pas de façon monotone avec l_E . Pour des raisons de lisibilité, seuls les cas $l_E = 0, 10, 100$ sont reportés.

Pour l'interpénétration moyenne et maximale nous présentons (FIG.6.11(b) et (c) respectivement) une série de courbes correspondant à $l_E \in [0, 10^6]$. Ces interpénétrations

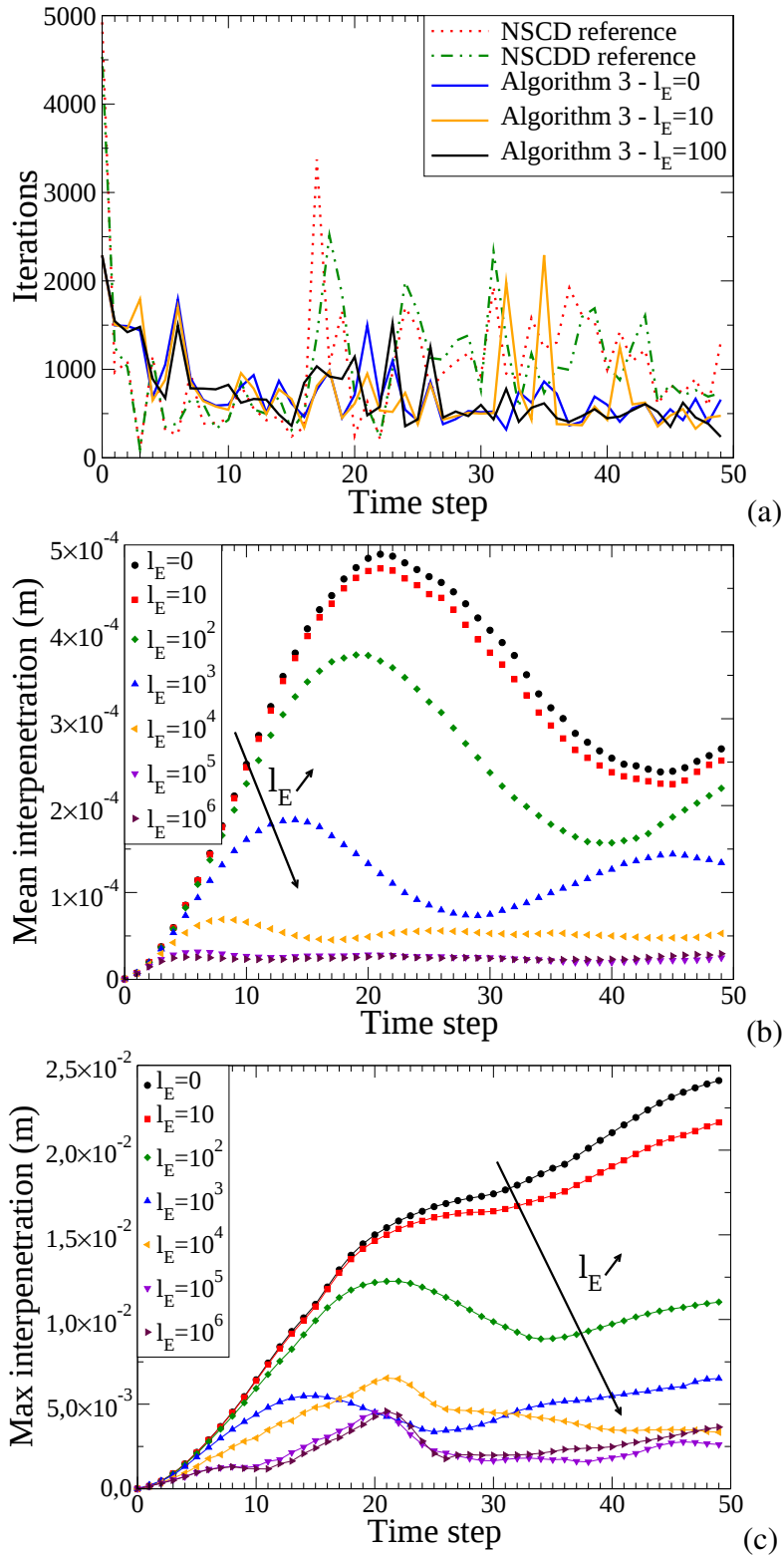


FIGURE 6.11 – Échantillon de 730 disques avec gravité tournante, avec frottement ($\mu = 0,3$); évolution du nombre d'itération à convergence (a), de l'interpénétration moyenne (b) et de l'interpénétration maximale (c) en fonction de l_E ; $l_E \in [0, 10^6]$.

décroissent fortement avec l'augmentation de l_E . Pour $l_E \in [0, 10^3]$ les interpénétrations fluctuent de façon significative et ont tendance à croître avec l'accumulation des pas de temps, alors que pour $l_E \in [10^4, 10^6]$ ces valeurs se stabilisent après un nombre réduit de pas de temps. Les valeurs d'interpénétration obtenues sont plus importantes que celles obtenues par les méthodes NSCD et NSCDD (FIG.6.10) tout en restant acceptables vis-à-vis du rayon moyen des particules en présence (1m).

Algorithme	Temps CPU
NSCD	117 s
NSCDD	63 s
EA3 – $l_E = 0$	46 s
EA3 – $l_E = 10^6$	51 s

TABLE 6.3 – Temps CPU ; échantillon de 730 disques avec gravité tournante ($\mu = 0,3$) avec grille de partitionnement en sous-domaines (1×2).

Nous sommes donc en présence d'un algorithme multiéchelle, en espace par l'usage d'une méthode de décomposition de domaine, mais aussi en temps par la mise en œuvre d'une intégration temporelle différente selon l'échelle. Le problème d'interface linéaire couple alors fortement l'ensemble des sous-domaines, mais est résolu de façon explicite (une seule fois), alors que les problèmes non réguliers par sous-domaines sont résolus itérativement afin de permettre les ré-arrangements locaux. La correction au cours du temps de l'interpénétration est assurée par cette stratégie semi-implicite, malgré une résolution incomplète sur chaque pas de temps. Cette stratégie est de plus efficace du point de vue des temps de calcul comme indiqué TAB.6.3, bien que des optimisations peuvent être mises en œuvre dans l'implémentation du gradient conjugué parallèle (communications décentralisées, préconditionnement, etc.).

Conclusion

Dans ce dernier chapitre, nous avons pris appui sur les travaux de [6] afin de dépasser le caractère local du problème d'interface NSCDD et des communications de Schwarz-NSCD. Pour ce faire, l'idée clé consiste à intégrer le réseau de contacts sous-jacent aux différents sous-domaines, afin de propager cette information structurale rapidement sur l'ensemble de l'échantillon granulaire. La définition d'une direction de recherche tangente, fonction d'un nouveau paramètre numérique l_E , mène respectivement à un problème d'interface global enrichi et à des communications augmentées.

Deux premiers exemples académiques (colonnes de 3 et 4 disques) ont, dans un premier temps, permis de mettre en évidence l'accélération de la vitesse de convergence de ces deux méthodes vis-à-vis de leurs versions génériques. Dans le cas de l'algorithme de Schwarz-NSCD avec communications enrichies, cette vitesse de convergence semble décroître avec le nombre de sous-domaines, ce qui n'est pas satisfaisant, alors que la méthode NSCDD enrichie donne (dans ces cas très spécifiques) des conditions aux limites

absorbantes. Cependant, le problème d'interface NSCDD avec enrichissement est un problème coûteux, couplant fortement l'ensemble des sous-domaines et nécessitant la mise en œuvre d'une technique de résolution proche de celles employées dans le cadre des méthodes de complément de Schur.

Deux premières propositions d'algorithmes à deux DDM imbriquées ont ensuite été introduites. Leur comportement a été analysé sur les exemples proposés dans l'article [6] afin d'en valider tant l'implémentation que les différentes variantes (avec ou sans frottement, avec ou sans prise en compte des composantes tangentielles dans la définition des opérateurs de compatibilité G_E et G_E^T).

Ces deux algorithmes ont ensuite été mis en œuvre sur un exemple d'échantillon granulaire de taille plus conséquente (730 disques). Sur un pas de temps, les gains en termes d'accélération de la vitesse de convergence des algorithmes apparaissent bien plus réduits que pour les exemples de petite taille précédents. De même, la simulation d'un processus granulaire (sur 50 pas de temps) a montré que ces algorithmes n'étaient pas satisfaisants car le coût de résolution du problème d'interface enrichi est trop important en rapport du gain en nombre d'itérations obtenu. Ces algorithmes semblent de plus perturber la résolution de ce problème, introduisant des interpénétrations plus conséquentes que les méthodes NSCD et NSCDD génériques.

En accord avec les conclusions de [6], nous avons alors pris le pari de représenter l'évolution d'un processus granulaire comme un système multiéchelle en espace et en temps, en proposant un schéma de résolution incomplète sur un pas de temps, mais dont la propagation de l'information entre les sous-domaines s'effectuerait en partie au cours du temps. Cette approche semi-implicite, consistant à résoudre une seule fois le problème d'interface par pas de temps et à itérer dans les sous-domaines pour gérer les non régularités, a été effectuée pour le cas de 730 disques soumis à une gravité tournante.

Les solutions obtenues, bien que générant des interpénétrations plus conséquentes que les versions génériques, se caractérisent par la diminution des interpénétrations moyenne et maximale lorsque l_E croît. Pour des valeurs suffisamment grandes de l_E , ces interpénétrations se stabilisent au cours des itérations et restent modérées devant les diamètres des particules de l'échantillon. De plus, les temps de calcul de cette approche espace-temps sont performants vis-à-vis de la méthode NSCDD générique.

Les simulations avec plus de deux sous-domaines ne sont pas présentées ici. Pour cet exemple de taille relativement faible, des simulations à quatre sous-domaines ont été effectuées et présentent des résultats très similaires à ceux pour deux sous-domaines, discutés ci-dessus. Il reste cependant à valider ces premiers résultats sur des simulations granulaires comportant un nombre de particules et de sous-domaines plus conséquents. La stabilisation des interpénétrations est aussi à confirmer sur un processus moins régulier.

Bilan et perspectives

Dans ce manuscrit de thèse, nous avons étudié deux familles de décomposition de domaine adaptées au formalisme de la dynamique non régulière des contacts (NSCD). Cette méthode d'intégration implicite en temps de l'évolution d'une collection de corps en interaction a pour caractéristique de prendre en compte le caractère discret et non régulier d'un tel milieu. Les techniques de décomposition de domaine classiques ne peuvent de ce fait être directement transposées pour ce type de simulation. Cependant, les deux familles de décomposition de domaine, que sont les méthodes de Schwarz et les méthodes de Schur, trouvent leurs prolongements dans les méthodes NSCDD et Schwarz-NSCD.

La méthode NSCDD se base sur les travaux initiés au Laboratoire de Mécanique et Génie Civil. Nous avons clarifié certains aspects de cette méthode, tel que la signification de la partition de l'unité effectuée sur les paramètres inertiels des corps d'interface, l'écriture du problème de recollement sous forme incrémentale ainsi qu'une solution originale donnée au traitement des grains de coins, problématique inhérente aux méthodes de décomposition de domaine.

Il a été montré que la méthode de Schwarz-NSCD est une méthode de type Schwarz additif, se traduisant par un algorithme mixte Gauss-Seidel/Jacobi pour la résolution des impulsions de contact. Une rapide comparaison de ces deux méthodes a permis de montrer des performances similaires. Par manque de temps, une comparaison de ces méthodes sur des exemples granulaires de grande taille et pour un processus long n'a pu être réalisée, mais la structure de ces méthodes (génériques) laisse supposer des performances équivalentes en terme de parallélisation.

Afin de préciser l'influence d'une approche DDM sur les résultats d'une simulation granulaire, nous avons étudié l'influence de la méthode NSCDD dans le cas d'un essai biaxial dont les caractéristiques en termes de comportement global et de structure micro-mécanique sont bien maîtrisées. Les outils d'analyse de la physique des milieux granulaires nous ont alors permis de valider l'utilisation de ces méthodes, sous réserve de respecter les critères classiques de pilotage des calculs par éléments discrets (critères de convergence sur le réseau de contact et contrôle de l'interpénétration).

L'implémentation de ces deux méthodes dans la plate-forme de calcul LMGC90 a par ailleurs été conçue en collaboration avec l'équipe de développeurs de ce logiciel, de sorte à paralléliser le plus largement possible les différentes phases d'un calcul NSCD. Ainsi, la phase de détection des contacts, coûteuse dans le cas d'objets de formes complexes,

est décomposée en deux étapes. La première étape, nommée détection grossière, est réalisée séquentiellement mais ne représente pas de coût trop important et sert de plus de support au partitionnement dual en sous-domaine. L'étape de détection fine, assurant la construction des opérateurs de compatibilité est, quand à elle, réalisée en parallèle.

Dans le cas de la méthode NSCDD, le problème d'interface était initialement conçu comme un problème global centralisé sur un sous-domaine particulier (hôte). Cette vision donne lieu en pratique à de nombreuses communications collectives, ce qui détériore rapidement les performances de la méthode lorsque le nombre de sous-domaines devient conséquent. Afin de lever cette limitation, un schéma de communication décentralisé, basé sur les propriétés de l'opérateur d'interface X , est proposé. Les communications entre processus s'effectuent alors suivant une topologie non structurée, du fait de la présence de corps allongés, tel que des murs dans les simulations granulaires ou les planchers rigides dans le cas de structures maçonnées, ce qui est une spécificité des méthodes DEM. Cette topologie de communication est par ailleurs naturelle dans le cas de la méthode de Schwarz-NSCD, pour laquelle aucun problème d'interface n'est défini.

Ce travail d'implémentation permet d'analyser de façon satisfaisante les propriétés de la méthode NSCDD en termes de *extensibilité*. Pour des exemples granulaires 2D et 3D, l'efficacité de la méthode dépend fortement du caractère dense de l'échantillon considéré. Pour un milieu dense, proche de l'état de compacité maximal ("Random Closed Packing") nous avons montré que la méthode NSCDD possédait un comportement quasi-linéaire pour un échantillon de 2×10^5 sphères comportant 2×10^6 inconnues de contact. Ce résultat montre la bonne efficacité de la méthode pour les échantillons denses, en accord avec les caractéristiques de la méthode NSCD dont elle découle. Lorsque la dynamique granulaire est plus agitée, comme dans le cas d'un gaz granulaire, les performances s'en trouvent réduites du fait de la prépondérance de chocs binaires, ne nécessitant pas de solveur de contact itératif.

Ces méthodes ont de plus été étendues au cas d'objets polyédriques, afin, par exemple, de simuler le comportement de maçonneries sous séisme. Une première étude indique une *accélération parallèle* linéaire sur une structure maçonnée à un étage soumise à un tassement différentiel. Pour cet exemple, nous avons comparé les performances obtenues avec une parallélisation OpenMP, avec des résultats similaires (linéarité).

Dans le cas d'échantillons structurés de corps rigides, nos études montrent donc la pertinence des approches DDM en dynamique des contacts. Cependant, ces méthodes ne permettent pas d'éviter l'augmentation du nombre d'itérations à convergence lorsque le nombre de contacts croît, comme cela est initialement le cas pour la méthode NSCD (mono-domaine). Afin de dépasser cette limitation, des méthodes d'enrichissement du problème d'interface NSCDD et des communications de Schwarz-NSCD ont été développées. L'idée est de prendre en compte le réseau de contacts sous-jacent dans la formulation du problème d'interface linéaire, via une direction de recherche numérique tangente. La matrice du système gouvernant la dynamique de l'échantillon devient alors non diagonale, une fois pris en compte ce réseau de contact sous-jacent. Ainsi la condensation sur l'interface de ces équations mène à une matrice du problème d'interface NSCDD pleine,

comme dans le cas de la méthode FETI.

Les résultats obtenus avec cette version enrichie, pour un pas de temps, sont contrastés : dans le cas d'échantillons ne comportant que quelques disques, l'accélération de la vitesse de convergence semble conséquente, alors que pour un échantillon de centaines de disques les gains obtenus restent faibles en comparaison des coûts induits, ceci malgré la mise en œuvre d'une méthode de gradient conjugué parallèle afin de résoudre efficacement le problème d'interface enrichi. Nous avons alors pris le pari de considérer l'évolution du milieu granulaire dense comme un problème multiéchelle en espace (réseau de forces faible et fort) et en temps (évolution quasi-statique globale et réorganisation dynamique locale). Cette approche mène à un algorithme de résolution incomplète sur chaque pas de temps d'un processus granulaire. L'étape linéaire est alors résolue une seule fois par pas de temps et les ré-arrangements locaux sont pris en compte par le solveur de contact itératif sous-domaine par sous-domaine. Les premiers tests effectués avec ce schéma semi-implicite montrent que l'enrichissement permet de diminuer les interpénétrations du système lorsque le paramètre d'enrichissement l_E croît. Cette approche demande encore à être étudiée pour des échantillons plus conséquents en termes de nombre de corps et de sous-domaines, mais semble apporter une solution efficace dans le cas de simulations quasi-statiques où le modélisateur accepte une interpénétration entre corps plus conséquente que celle obtenue avec les méthodes NSCD ou NSCDD génériques.

Les perspectives ouvertes par ces travaux de thèse sont au moins de deux types. Comme indiqué au chapitre 2, l'extension des méthodes NSCDD et/ou Schwarz-NSCD au cas des solides déformables est une question ouverte. Une première proposition d'algorithme, basée sur la méthode NSCDD, est avancée dans ce manuscrit, mais nécessite d'être implémentée pour en évaluer la pertinence. En particulier, nous proposons ici un recollement des corps par l'intermédiaire de leurs degrés de liberté rigides, en supposant que les quantités d'intérêt principales du modélisateur concernent le comportement macroscopique du matériau étudié. Il est néanmoins nécessaire de vérifier que ce raccord faible, autorisant des champs de déformation distincts entre les représentants d'un même grain, n'introduit pas d'erreur marquée.

Cet aspect peut être envisagé plus globalement dans la perspective d'une parallélisation plus aboutie du logiciel LMGC90. Il serait par exemple nécessaire d'ajouter la prise en compte de la migration des interactions de contact, lorsque celles-ci comportent des variables internes, afin de pouvoir gérer des lois d'interactions de type zone cohésive, adhésion, pont capillaire etc., dans le cas d'un réseau de contact fortement évolutif.

Par ailleurs nous venons de discuter les résultats obtenus par l'algorithme de résolution incomplète avec enrichissement de l'étape linéaire NSCDD. Cette étude apporte de nouvelles perspectives pour la gestion d'échantillons de corps rigides de très grande taille, car le transfert d'information entre sous-domaines y est uniquement effectué par le problème d'interface global, alors que les problèmes non réguliers à résoudre ne devraient nécessiter que peu d'itérations. De plus, le treillis sous-jacent pris en considération pour accélérer la convergence peut être sélectionné par le modélisateur en fonction du maté-

riau considéré. Nous avons ainsi validé, pour les milieux à contact frottant, l'opérateur de compatibilité limité à la composante normale des contacts actifs (obtenus par une étape de prédiction). Dans le cas de matériaux cohésifs ce choix est sans doute à remettre en cause afin de représenter la résistance en traction et flexion d'un tel milieu.

Bibliographie

- [1] P. Alart. Méthode de newton généralisée en mécanique du contact. *Journal de Mathématiques Pures et Appliquées*, 76(1) :83–108, 1997.
- [2] P. Alart, M. Barboteu, and J. Gril. A numerical modelling of non linear 2D-frictional multicontact problems : Application to post-buckling in cellular media. *Computational Mechanics*, 34(4) :298–309, 2004.
- [3] P. Alart, M. Barboteu, P. Le Tallec, and M. Vidrascu. Additive Schwarz method for nonsymmetric problems : application to frictional multicontact problems. In *Thirteenth International Conference on Domain Decomposition Methods — DD13*, pages 3–13, 2001.
- [4] P. Alart, M. Barboteu, P. P. Le Tallec, and M. Vidrascu. Méthode de Schwarz additive avec solveur grossier pour problèmes non symétriques. *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences. Series I, Mathématiques*, 331(5) :399–404, 2000.
- [5] P. Alart and D. Dureisseix. A scalable multiscale LATIN method adapted to nonsmooth discrete media. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 197(5) :319–331, 2008.
- [6] P. Alart, D. Iceta, and D. Dureisseix. A nonlinear domain decomposition formulation with application to granular dynamics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 205-208 :59–67, 2012. Special Issue on Advances in Computational Methods in Contact Mechanics, dedicated to the memory of Professor J. A. C. Martins.
- [7] P. Alart, D. Iceta, T. M. P. Hoang, D. Dureisseix, and G. Saussine. Two domain decomposition strategies for granular dynamics using discrete elements. In *Free Boundary Problems – Applications to the fluid mechanics, friction and impact phenomena*, Saint Etienne, France, 09 2009. SNCF OPTIGRA.
- [8] M. Allen and D. Tildesley. Computer simulation of liquid. vol. 17, 1987.
- [9] S. J. Antony. Evolution of force distribution in three-dimensional granular media. *Physical Review E*, 63 :011302, 2001.
- [10] E. Azéma, N. Estrada, and F. Radjaï. The effect of the angularity of particles on the mechanical response of sheared granular packings. *Submitted to Physical Reviews E*, 2011.
- [11] E. Azéma and F. Radjaï. Stress-strain behavior and geometrical properties of packings of elongated particles. *Physical Review E*, 81 :051304, 2010.

- [12] E. Azéma, F. Radjaï, R. Peyroux, and G. Saussine. Force transmission in a packing of pentagonal particles. *Physical Review E*, 76 :011301, 2007.
- [13] E. Azéma, F. Radjaï, and G. Saussine. Quasistatic rheology, force transmission and fabric properties of a packing of irregular polyhedral particles. *Mechanics of Materials*, 41 :721–741, 2009.
- [14] M. Barboteu, P. Alart, and M. Vidrascu. A domain decomposition strategy for non-classical frictional multi-contact problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 190 :4785–4803, 2001.
- [15] C. Bernardi, Y. Maday, and A. T. Patera. A new nonconforming approach to domain decomposition : The mortar element method. In H. Brezzi, editor, *Nonlinear partial differential equations and their applications*, pages 13–51. Paris, 1994.
- [16] P. Breitkopf and M. Jean. Modélisation parallèle des matériaux granulaires. In *4e Colloque National en Calcul des Structures*, pages 387–392, Giens, May 1999. CSMA.
- [17] B. Cambou, M. Jean, and F. Radjaï, editors. *Micromechanics of Granular Materials*. ISTE Ltd. and Jhon Wiley and Sons Inc., 2009.
- [18] N. J. Carpenter, R. L. Taylor, and K. M. G. Lagrange constraints for transient finite element surface contact. *International journal for numerical methods in engineering*, 32 :103–128, 1991.
- [19] S. N. Coppersmith, C. Liu, S. Majumdar, O. Narayan, and T. A. Witten. Model for force fluctuations in bead packs. *Physical Review E*, 53(5) :4673–4685, 1996.
- [20] L. C. Cowsar, J. Mandel, and M. F. Wheeler. Balancing domain decomposition for mixed finite elements. *Mathematics of Computation*, 64 :989–1015, 1995.
- [21] P. A. Cundall and O. D. L. Stack. A discrete numerical model for granular assemblies. *Geotechnique*, 29(1) :47–65, 1979.
- [22] F. Dubois, M. Jean, M. Renouf, R. Mozul, A. Martin, and M. Bagneris. LMGC90. In *10e colloque national en calcul des structures*, Giens, France, 2011.
- [23] F. Dubois and A. Martin. Rapport scientifique – projet degrip. Technical report, 2012.
- [24] D. Dureisseix. *Une approche multi-échelles pour des calculs de structures sur ordinateurs à architecture parallèle*. PhD thesis, ENS de Cachan, 1997.
- [25] D. Dureisseix and C. Farhat. A numerically scalable domain decomposition method for the solution of frictionless contact problems. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 50(12) :2643–2666, 2001.
- [26] C. Farhat, L. Crivelli, and F.-X. Roux. A transient FETI methodology for large-scale parallel implicit computations in structural mechanics. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 37(11) :1945–1975, 1994.
- [27] C. Farhat, J. Mandel, and F.-X. Roux. Optimal convergence properties of the FETI domain decomposition method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 115 :367–388, 1994.

- [28] C. Farhat and F.-X. Roux. The dual Schur complement method with well-posed local Neumann problems. *Contemporary Mathematics*, 157 :193–201, 1994.
- [29] M. Gander and H. Zhao. Overlapping schwarz waveform relaxation for the heat equation in n dimensions. *BIT Numerical Mathematics*, 42(4) :779–795, 2002.
- [30] M. J. Gander and L. Halpern. Méthodes de décomposition de domaines – notions de base. *Techniques de l'ingénieur Methodes numeriques*, base documentaire : TIB105DUO.(ref. article : af1375), 2013. fre.
- [31] GDR-MiDi. On dense granular flows. *European Physical Journal E*, 14 :341–365, 2004.
- [32] W. D. Gropp, E. Lusk, and A. Skjellum. *Using MPI : Portable Parallel Programming with the Message-Passing Interface*. MIT Press, 1994. <http://www-unix.mcs.anl.gov/mpi/>.
- [33] T. M. P. Hoang, P. Alart, D. Dureisseix, and G. Saussine. A domain decomposition method for granular dynamics using discrete elements and application to railway ballast. *Annals of Solid and Structural Mechanics*, 2(2-4) :87–98, 2011.
- [34] T. M. P. Hoang, G. Saussine, D. Dureisseix, and P. Alart. Behaviour of a portion of railway track under maintenance operation. In *9th World Congress on Railway Research (WCRR2011)*, page 10 pages, Lille, may 2011.
- [35] T. M. P. Hoang, G. Saussine, D. Dureisseix, and P. Alart. Décomposition de domaine dans la simulation par éléments discrets en utilisant le calcul parallèle à mémoire partagée pour des applications ferroviaires. In *10e colloque national en calcul des structures — CSMA2011*, Giens, France, 2011.
- [36] T. M. P. Hoang, G. Saussine, D. Dureisseix, and P. Alart. Domain decomposition with discrete element simulations using shared-memory parallel computing for railways applications. *European Journal of Computational Mechanics*, 2012. In press.
- [37] T. J. R. Hughes and J. Winget. Finite rotation effects in numerical integration of rate constitutive equations arising in large-deformation analysis. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 15(12) :1862–1867, 1980.
- [38] D. Iceta, P. Alart, and D. Dureisseix. A multiscale domain decomposition for the simulation of a non smooth structure, involving a numerical homogenization. In *18th International Conference on Domain Decomposition Methods — DD18*, Jerusalem (Israel), january 2008.
- [39] D. Iceta, P. Alart, and D. Dureisseix. A multilevel domain decomposition solver suited to nonsmooth mechanical problems. In M. Bercovier, M. J. Gander, R. Kornhuber, and O. Windlund, editors, *Domain Decomposition Methods in Science and Engineering*, volume 70 of *Lecture Notes in Computational Science and Engineering*, pages 113–120. Springer Verlag, 2009.
- [40] D. Iceta, D. Dureisseix, and P. Alart. Mixed versus impulse-oriented domain decomposition method for granular dynamics. *European Journal of Computational Mechanics*, 18(5-6) :429–443, 2009. hal-00447176.

- [41] D. Iceta, D. Dureisseix, and P. Alart. Two domain decomposition methods for granular dynamics. In *5th Contact Mechanics International Symposium — CMIS09*, Chania Grèce, 04 2009. 09-157.
- [42] D. Iceta, D. Dureisseix, and P. Alart. Domain decomposition for granular dynamics : Scalability issue. In *5th European Conference on Computational Mechanics — ECCM2010*, Paris, France, may 2010.
- [43] M. Jean. *Documentation sur LMGC*.
- [44] M. Jean. The non-smooth contact dynamics method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 177 :235–257, 1999.
- [45] F. Jourdan, P. Alart, and M. Jean. A Gauss-Seidel like algorithm to solve frictional contact problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 155(1-2) :31–47, 1998.
- [46] G. Karypis and V. Kumar. ParMETIS : Parallel graph partitioning and sparse matrix ordering. University of Minnesota. [http ://www-users.cs.umn.edu/~karypis/metis](http://www-users.cs.umn.edu/~karypis/metis), 2003.
- [47] Y. Kishino. Disc model analysis of granular media. 1988.
- [48] T. Koziara and N. Bićanić. A distributed memory parallel multibody contact dynamics code. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 87(1-5) :437–456, 2011.
- [49] N. Kruyt and L. Rothenburg. Kinematic and static assumptions for homogenization in micromechanics of granular materials. *Mechanics of Materials*, 36(12) :1157–1173, Dec. 2004.
- [50] P. Ladevèze, A. Nouy, and O. Loiseau. A multiscale computational approach for contact problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 191 :4869–4891, 2002.
- [51] P. Le Tallec, J. Mandel, and M. Vidrascu. A Neumann–Neumann domain decomposition algorithm for solving plate and shell problems. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 35(2) :836–867, April 1998.
- [52] P. Lions. On the Schwarz alternating method. I. In *First international symposium on domain decomposition methods for partial differential equations*, pages 1–42, 1988.
- [53] J. Mandel. Balancing domain decomposition. *Communications on Applied Numerical Methods*, 9 :233–241, 1993.
- [54] J. Mandel and M. Brezina. Balancing domain decomposition for problems with large jumps in coefficients. *Mathematics of Computation*, 65 :1387–1401, 1996.
- [55] J. Mandel and R. Tezaur. Convergence of a substructuring method with Lagrange multipliers. *Numerische Mathematik*, 73(4) :473–487, 1996.
- [56] J. Mandel, R. Tezaur, and C. Farhat. A scalable substructuring method by Lagrange multipliers for plate bending problems. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 36(5) :1370–1391, 1999.

- [57] J. K. Mitchell and K. Soga. *Fundamentals of Soil Behavior*. Wiley, New-YorkY, 2005.
- [58] J. J. Moreau. Unilateral contact and dry friction in finite freedom dynamics. in *New Variational Techniques in Mathematical Physics (C.I.M.E. II ciclo)*, pages 173–232, 1988.
- [59] J. J. Moreau. Numerical investigation of shear zones in granular materials. In D. E. Wolf and P. Grassberger, editors, *Friction, Arching, Contact Dynamics*, pages 233–247, Singapore, 1997. World Scientific.
- [60] J. J. Moreau. Numerical aspects of sweeping process. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 177 :329–349, 1999.
- [61] J. J. Moreau. Modélisation et simulation de matériaux granulaires. In *Actes du 35ème Congrès National d'Analyse Numérique*, 2003.
- [62] D. M. Mueth, H. M. Jaeger, and S. R. Nagel. Force distribution in a granular medium. *Physical Review E*, 57(3) :3164–3169, 1998.
- [63] S. Nineb, P. Alart, and D. Dureisseix. Domain decomposition approach for nonsmooth discrete problems, example of a tensegrity structure. *Computers and Structures*, 85(9) :499–511, 2007.
- [64] F. Radjai and F. Dubois. *Modélisation numérique discrète des matériaux granulaires*. ISTE, 2010.
- [65] F. Radjaï, M. Jean, J. J. Moreau, and S. Roux. Force distributions in dense two dimensional granular systems. *Physical Review Letters*, 77 :274–277, 1996.
- [66] F. Radjaï, H. Troadec, and S. Roux. Key features of granular plasticity. In S. Antony, W. Hoyle, and Y. Ding, editors, *Granular Materials : Fundamentals and Applications*, pages 157–184, Cambridge, 2004. RS.C.
- [67] F. Radjai, D. E. Wolf, M. Jean, and J. J. Moreau. Bimodal character of stress transmission in granular packings. *Physical Review Letters*, 80(1) :61–64, 1998.
- [68] M. Renouf and P. Alart. Conjugate gradient type algorithms for frictional multi-contact problems : Applications to granular materials. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 194 :2019–2041, 2004.
- [69] M. Renouf, F. Dubois, and P. Alart. A parallel version of non smooth contact dynamics algorithm applied to simulation of granular medium. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 168 :375–382, 2004.
- [70] V. Richefeu, E. Azéma, F. Radjaï, and M. S. El Youssoufi. Force distribution in cohesive and non cohesive granular media. *Powder Technology*, 190 :258263, 2009.
- [71] D. Rixen and C. Farhat. A simple and efficient extension of a class of substructure based preconditioners to heterogeneous structural mechanics problems. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 44(4) :489–516, 1999.
- [72] D. J. Rixen, C. Farhat, R. Tezaur, and J. Mandel. Theoretical comparison of the FETI and algebraically partitioned FETI methods, and performance comparisons with a

- direct sparse solver. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 46 :501–533, 1999.
- [73] L. Rothenburg and R. J. Bathurst. Analytical study of induced anisotropy in idealized granular materials. *Geotechnique*, 39 :601–614, 1989.
- [74] Y. Saad and M. H. Schultz. GMRES : A generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, 7 :856–869, 1986.
- [75] B. Saint-Cyr, J.-Y. Delenne, C. Voivret, F. Radjaï, and P. Sornnay. Rheology of granular materials composed of nonconvex particles. *Accepted in Physical Reviews E*, 2011.
- [76] Z. Shojaaee, M. R. Shaebani, L. Brendel, J. Török, and D. E. Wolf. An adaptive hierarchical domain decomposition method for parallel contact dynamics simulations of granular materials. *Journal of Computational Physics*, 231(2) :612–628, 2012.
- [77] L. Staron and F. Radjaï. Friction versus texture at the approach of a granular avalanche. *Physical Review E*, 72 :1–5, 2005.
- [78] A. Toselli and O. B. Widlund. *Domain decomposition methods : algorithms and theory*, volume 34. Springer, 2005.
- [79] H. Troadec, F. Radjaï, S. Roux, and J.-C. Charmet. Model for granular texture with steric exclusions. *Physical Review E*, 66 :041305, 2002.
- [80] C. Voivret, F. Radjaï, J.-Y. Delenne, and M. S. El Youssofi. Space-filling properties of polydisperse granular media. *Physical Review E*, 76 :021301–1, 021301–12, 2007.
- [81] C. Voivret, F. Radjaï, J.-Y. Delenne, and M. S. El Youssofi. Multiscale force networks in highly polydisperse granular media. *Physical Review Letters*, 102 :178001, 2009.

La simulation numérique des systèmes multicorps en présence d'interactions complexes, dont le contact frottant, pose de nombreux défis, tant en terme de modélisation que de temps de calcul. Dans ce manuscrit de thèse, nous étudions deux familles de décomposition de domaine adaptées au formalisme de la dynamique non régulière des contacts (NSCD). Cette méthode d'intégration implicite en temps de l'évolution d'une collection de corps en interaction a pour caractéristique de prendre en compte le caractère discret et non régulier d'un tel milieu. Les techniques de décomposition de domaine classiques ne peuvent de ce fait être directement transposées. Deux méthodes de décomposition de domaine, proches des formalismes des méthodes de Schwarz et de complément de Schur sont présentées. Ces méthodes se révèlent être de puissants outils pour la parallélisation en mémoire distribuée des simulations granulaires 2D et 3D sur un centre de calcul haute performance. Le comportement de structure des milieux granulaires denses est de plus exploité afin de propager rapidement l'information sur l'ensemble des sous domaines via un schéma semi-implicite d'intégration en temps.

Mots clés : Dynamique des contacts, décomposition de domaine, multiéchelle, validation, calcul haute performance.

Numerical simulations of the dynamics of discrete structures in presence of numerous impacts and frictional contacts leads to CPU-intensive large time computations. To deal with such realistic assemblies, numerical tools have been developed, in particular the method called nonsmooth contact dynamics (NSCD). Such modeling has to deal with discreteness and nonsmoothness, such that domain decomposition approaches for regular continuum media has to be rethought. We present further two domain decomposition method linked to Schwarz and Schur formalism. Scalability and numerical performances of the methods for 2D and 3D granular media is studied, showing good parallel behavior on supercomputer platform. The structural behavior of dense granular packing is herein used to introduce a spacial multilevel preconditioner with a coarse problem to improve convergence in a space-time approach.

Keywords : nonsmooth contact dynamics, domain decomposition, multiscale, validation, hight performance computing.