



HAL
open science

Décomposition de Domaine dans la simulation par Éléments Discrets en utilisant le calcul parallèle à mémoire partagée pour des applications ferroviaires

Thi Minh Phuong Hoang, Gilles Saussine, David Dureisseix, Pierre Alart

► To cite this version:

Thi Minh Phuong Hoang, Gilles Saussine, David Dureisseix, Pierre Alart. Décomposition de Domaine dans la simulation par Éléments Discrets en utilisant le calcul parallèle à mémoire partagée pour des applications ferroviaires. 10e colloque national en calcul des structures, May 2011, Giens, France. pp.Clé USB. hal-00592728

HAL Id: hal-00592728

<https://hal.science/hal-00592728>

Submitted on 3 May 2011

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.

Décomposition de Domaine dans la simulation par Éléments Discrets en utilisant le calcul parallèle à mémoire partagée pour des applications ferroviaires

T. M. P. Hoang¹, G. Saussine¹
D. Dureisseix², P. Alart³

¹ SNCF, Direction de l'Innovation et de la Recherche, France, {thi-minh-phuong.hoang, gilles.saussine}@snf.fr

² LaMCoS, INSA de Lyon, France, david.dureisseix@insa-lyon.fr

³ LMGC, Université Montpellier 2, France, pierre.alart@univ-montp2.fr

Résumé — La simulation numérique par éléments discrets présente des difficultés pour l'étude de problèmes de grande taille et en temps de sollicitation long, comme ceux issus de dynamique des milieux granulaires pour le ballast ferroviaire. Afin de résoudre ce problème à moindre coût, on propose d'allier deux stratégies : la décomposition de domaine (DDM) et le calcul parallèle (ici en mémoire partagée avec OpenMP). Un exemple traitant d'un procédé de maintenance ferroviaire, le *bourrage*, sur une portion de voie ballastée de 7 blochets de long sera présenté dans cette communication.

Mots clés — Non Smooth Contact Dynamics, Décomposition de Domaine, Parallélisation, ballast, maintenance.

1 Motivations : optimisation du procédé de bourrage

La dégradation géométrique de la voie ballastée sous circulation commerciale nécessite des opérations de maintenance fréquentes et onéreuses. Une de ces opérations, qui permet de corriger la géométrie de la voie suite au tassement différentiel, est le bourrage, ([1], [2], [3]). Il est effectué grâce à une bourreuse qui soulève la voie, ses bourroirs plongent en vibrant dans le ballast, et appliquent d'un mouvement de serrage ramenant le ballast sous la traverse. L'étude du comportement mécanique de la voie sous l'action de cette opération est nécessaire pour proposer des optimisations du procédé de maintenance ([4]).

La simulation numérique d'une portion de voie soumise à un bourrage permet de comprendre les phénomènes physiques mis en jeu dans le ballast, [5]. Néanmoins, la complexité numérique de ce problème demande une attention particulière pour une résolution à moindre coût.

Cette communication est proposée dans le cadre du mini-symposium intitulé *Simulation numérique et Optimisation de procédés*. La méthodologie utilisée se base sur un outil de simulation innovante : l'approche *Non Smooth Contact Dynamics* (NSCD) pour des modèles par Éléments Discrets (DEM). Ici, une méthode de décomposition de domaine (DDM) alliée à une parallélisation adaptée en environnement à mémoire partagée (utilisant OpenMP) sont appliquées pour améliorer l'efficacité en termes de temps de calcul de la simulation numérique. Le domaine est décomposé géométriquement en plusieurs sous-domaines traités simultanément par plusieurs processeurs ou cœurs de calcul.

Les principaux résultats d'un calcul représentatif d'une portion de voie ballastée composée de 7 blochets, soumise à un procédé successif de bourrage seront présentés. L'échantillon considéré comporte 90 000 grains polyédriques, et à chaque pas de temps environ 300 000 contacts avec frottement sont résolus. Le post-traitement des résultats de la simulation montrera l'influence du bourrage d'un blochet à l'autre en terme de compacité et de plusieurs indicateurs locaux de qualité numérique ainsi que de qualité physique de la voie.

2 Méthode numérique

2.1 Dynamique granulaire

L'approche *Non Smooth Contact Dynamics* (NSCD) développée par Jean et Moreau [6] est une des méthodes de dynamique granulaire présentant le plus grand degré de généralité. Dans le cadre de cet article, NSCD se base sur deux ingrédients principaux : l'équation de la dynamique, et la loi de contact. Alors, on considère le système comme un ensemble de corps rigides ayant subis des efforts extérieurs et les interactions non-régulières (*non-smooth*) comme des contacts frottants, ([7],[8]).

Equations de la dynamique : à l'échelle globale (au centre de masse des grains), l'équation dynamique d'un ensemble de corps en contact s'écrit :

$$M(V - V^i) = R^d + R \quad (1)$$

où M représente la matrice de masse, V^i et V désignent respectivement les vitesses des grains au centre de masse à l'instant t_i , et t_{i+1} , R^d indiquent les impulsions ou forces extérieures s'exerçant sur l'intervalle $[t_i, t_{i+1}]$, R sont les impulsions dues aux contacts à l'instant t_{i+1} . V et R sont inconnus.

À l'échelle locale (au point de contact, dans le repère local au contact), l'équation (1) est exprimée par :

$$v = v^d + Wr \quad (2)$$

$v = H^T V$ et $v^d = H^T (M^{-1} R^d + V^i)$ sont respectivement les vitesses relatives aux contacts, et les vitesses relatives dues aux impulsions extérieures (mais pas à celles dues aux interactions). $W = H^T M^{-1} H$ est l'opérateur de Delassus utilisant l'application H et sa transposée H^T qui permet de passer des repères globaux liés aux grains aux repères locaux aux contacts ; r représente les impulsions dues aux contacts avec : $R = Hr$.

Loi de contact : pour chaque contact potentiel α entre deux grains, la condition de "non-pénétration" exige d'avoir un interstice positif : $g_\alpha \geq 0$. De plus, la relation entre les vitesses relatives et les impulsions pour la partie normale, notée n , pour la partie tangentielle, notée t , est décrite par la loi de contact frottant (loi de Signorini-Coulomb) :

$$\begin{cases} \text{si } g > 0, & r = 0 \\ \text{si } g = 0, & 0 \leq v_n \perp r_n \leq 0 \text{ et } \begin{cases} \text{si } \|v_t\| = 0, & \|r_t\| \leq \mu r_n \\ \text{si } \|v_t\| \neq 0, & r_t = -\mu r_n v_t / \|v_t\| \end{cases} \end{cases} \quad (3)$$

Cette loi peut alors s'écrire formellement : $\mathcal{R}(r, v) = 0$.

Problème de référence : en résumé, le couple inconnu de l'impulsion et de la vitesse relative pour chaque contact frottant (r, v) peut être défini par le système d'équations suivant :

$$\begin{cases} v = v^d + Wr \\ \mathcal{R}(r, v) = 0 \end{cases} \quad (4)$$

Solveur *Non Linear Gauss Seidel* (NLGS) : la résolution locale est réalisée contact par contact par un algorithme de type NLGS ; si on considère le contact α , et qu'on suppose les réactions aux autres contacts fixées (par commodités l'indice de temps i sera omis), le schéma itératif est alors défini de la façon suivante (à l'itération $k+1$) :

$$\begin{cases} W_{\alpha\alpha} r_\alpha^{k+1} - v_\alpha^{k+1} = -v_\alpha^d - \sum_{\beta < \alpha} W_{\alpha\beta} r_\beta^{k+1} - \sum_{\beta > \alpha} W_{\alpha\beta} r_\beta^k \\ \mathcal{R}(r_\alpha^{k+1}, v_\alpha^{k+1}) = 0 \end{cases} \quad (5)$$

Le problème consiste à trouver le couple $(r_\alpha^{k+1}, v_\alpha^{k+1})$ connaissant les r_β^k . Les étapes de résolution sont détaillées dans [9].

2.2 Décomposition de domaine et parallélisme

Principe de partitionnement géométrique : le système granulaire peut-être considéré comme un ensemble de nœuds (grains) et de liens (interactions de contact frottant) (voir Fig. 1).

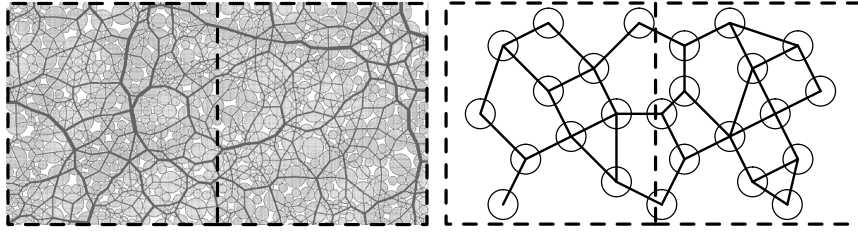


FIG. 1 – Décomposition par la méthode des boîtes en 2/3D pour un milieu granulaire (à gauche) et son principe (à droite) [10].

En se basant sur cette description, deux méthodes de décomposition peuvent être utilisées (voir Fig. 2), [7] :

- *L’approche primale* ventile des grains dans les sous-domaines (Fig. 2 à gauche). Un grain est déclaré appartenir à un sous-domaine (une boîte) si son centre de masse est localisé à l’intérieur de la boîte en question. L’interface est alors constituée des *liens* reliant les grains de deux sous-domaines voisins, [11].
- *L’approche duale* ventile des interactions dans les sous-domaines (Fig. 2 à droite). Une interaction est déclarée appartenir à un sous-domaine (une boîte) si le milieu du segment reliant les centres de masse des grains en contact est localisé à l’intérieur de la boîte en question. Les interfaces sont donc constituées des centres de masse de grains ayant au moins deux contacts avec des grains de sous-domaines différents, [12].

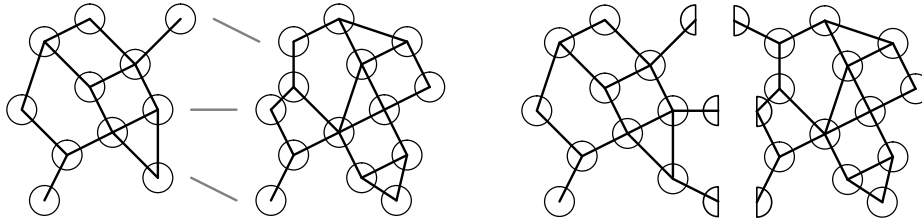


FIG. 2 – Méthode primale de décomposition : distribution des grains (à gauche) et méthode duale : distribution des interactions (à droite), [10].

Nous utilisons ici *l’approche primale* consistant à distribuer les grains dans les sous-domaines, par son caractère moins intrusif dans un code dédié au traitement des problèmes d’interactions de grande taille. Les sous-domaines sont traités comme des systèmes granulaires couplés avec leurs voisins par les conditions aux limites particulières dues à l’interface globale. Celle-ci est gérée comme un sous-domaine particulier qui ne contient que des interactions et aucun grain.

Principe de partitionnement algébrique : un partitionnement algébrique du problème de référence peut être construit sur la base du partitionnement géométrique, ([7],[8]). Afin de simplifier l’écriture, les indices E, E', Γ désignent par la suite les sous-domaines et l’interface globale ; les lettres majuscules et minuscules représentent respectivement les variables au niveau des grains et les variables au niveau des contacts. Les vitesses des grains et les impulsions sont alors définies comme :

$$V = \begin{bmatrix} V_E \\ V_{E'} \end{bmatrix} \quad \text{et} \quad R = \begin{bmatrix} R_E \\ R_{E'} \end{bmatrix} \quad (6)$$

De la même façon, les vitesses relatives et les impulsions de contact sont décomposées en :

$$v = \begin{bmatrix} v_E \\ v_{E'} \\ v_\Gamma \end{bmatrix} \quad \text{et} \quad r = \begin{bmatrix} r_E \\ r_{E'} \\ r_\Gamma \end{bmatrix} \quad (7)$$

L'équation de la dynamique des grains du sous-domaine E s'écrit :

$$M_E V_E = M_E V_E^i + R_E^d + R_E + R_{E\Gamma} \quad (8)$$

où l'indice $E\Gamma$ désigne des grandeurs de Γ agissant sur E et réciproquement pour ΓE . Il faut noter alors que chaque sous-domaine est indépendant, et qu'il est donc possible de remplacer H par h comme suit :

$$R_E = H_E r = h_E r_E \quad \text{et} \quad R_{E\Gamma} = H_{E\Gamma} r = h_{E\Gamma} r_\Gamma \quad (9)$$

ainsi que de façon duale

$$v_E = H_E^T V = h_E^T V_E \quad \text{et} \quad v_\Gamma = \sum_E H_{E\Gamma}^T V = \sum_E h_{E\Gamma}^T V_E \quad (10)$$

La condensation de la dynamique sur les interactions conduit au problème de référence partitionné :

$$\begin{bmatrix} v_E \\ v_{E'} \\ v_\Gamma \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v_E^d \\ v_{E'}^d \\ v_\Gamma^d \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} W_E & 0 & W_{E\Gamma} \\ 0 & W_{E'} & W_{E'\Gamma} \\ W_{\Gamma E} & W_{\Gamma E'} & W_\Gamma \end{bmatrix} \begin{bmatrix} r_E \\ r_{E'} \\ r_\Gamma \end{bmatrix} \quad (11)$$

avec

$$\begin{aligned} v_E^d &= h_E^T (V_E^i + M_E^{-1} R_E^d) \\ v_\Gamma^d &= \sum_E h_{E\Gamma}^T (V_E^i + M_E^{-1} R_E^d) \\ W_E &= h_E^T M_E^{-1} h_E \\ W_{E\Gamma} &= W_{\Gamma E}^T = h_{E\Gamma}^T M_E^{-1} h_{E\Gamma} \end{aligned}$$

et

$$W_\Gamma = \sum_E h_{E\Gamma}^T M_E^{-1} h_{E\Gamma} \quad (12)$$

On utilise alors une technique de parallélisation en mémoire partagée utilisant OpenMP afin d'implémenter aisément la méthode de décomposition de domaine couplée au solveur *Non Linear Gauss-Seidel*. Cette stratégie permet de réduire le temps de simulation. En principe, les sous-domaines sont simultanément traités par différents processeurs, l'interface globale est résolue dans une étape particulière pour obtenir un algorithme synchrone.

Le traitement complet complet (DDM–OpenMP–NLGS) est décrit par l'algorithme 1. n_{SD} est le nombre de sous-domaines, n_{DDM} est le nombre d'itérations externes sur la décomposition de domaine, n et m sont les nombres d'itérations internes de Gauss-Seidel sur le problème associé à chaque sous-domaine et associé à l'interface.

3 Résultats

L'application visée concernent le comportement d'une portion de voie ballastée sous l'action du bourrage. Néanmoins, la simulation du procédé de bourrage sur une telle configuration exige un temps de calcul considérable. Le test proposé dans cette partie utilisant la stratégie de résolution précédente permet de diminuer le temps de simulation et de réaliser des études paramétriques extensives. Un échantillon de $3.6 m \times 2 m \times 0.56 m$ en trois dimensions est modélisé pour représenter une portion de voie de 7 blochets. Il est soumis à un cycle de bourrage sur le quatrième blochet. La figure 3 montre la géométrie de l'échantillon.

L'échantillon est constitué de 88 100 grains polyédriques et d'environ 310 000 contacts frottants. Le coefficient de frottement est pris à $\mu = 1$ entre grains, entre grains et blochets, ainsi qu'entre grains et bourroirs, $\mu = 0.8$ entre grains et plans. Les paramètres numériques sont choisis de la façon suivante :

- l'intervalle de temps $[0, T]$ avec $T = 1.764 s$, discrétisé en 8820 pas de temps de $2 \cdot 10^{-4} s$,
- 7 sous-domaines correspondant aux zones sous chaque blochet ($n_{SD} = 7 \Leftrightarrow 1 \times 7 \times 1$ sous-domaines selon x, y, z et une interface globale),

Algorithm 1 DDM–OpenMP–NLGS

```
Boucle sur les pas de temps
for  $i = 1, 2, \dots$  do
  Détection et stockage des contacts potentiels
  Partitionnement du domaine
  Boucle en parallèle sur les sous-domaines  $E$ 
  for  $E = 1, 2, \dots, n_{SD}$  do
    Calcul des vitesse libres agissantes sur les sous-domaines  $E$ 
  end for
  Boucle sur les itération DDM
  for  $j = 1, 2, \dots, n_{DDM}$  do
    Boucle en parallèle sur les sous-domaines
    for  $E = 1, 2, \dots, n_{SD}$  do
      Résolution NLGS pour les sous-domaines  $E$ , avec  $n$  itérations NLGS
      Calcul des erreurs numériques dans les sous-domaines  $E$ 
    end for
    Résolution NLGS pour les sous-domaines  $\Gamma$ , avec  $m$  itérations NLGS
    Calcul des erreurs numériques dans l'interface globale  $\Gamma$ 
    Test de convergence
  end for
  Boucle en parallèle sur les sous-domaines
  for  $E = 1, 2, \dots, n_{SD}$  do
    Calcul des grandeurs nodales (actualisation des vitesses, des positions)
  end for
end for
```

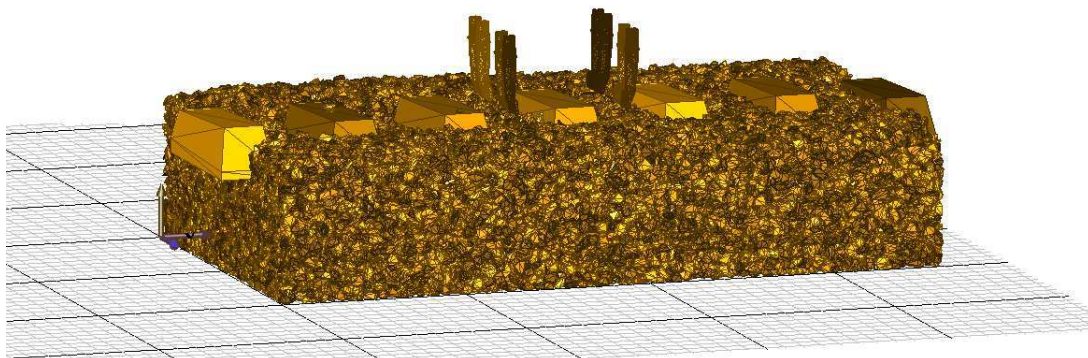


FIG. 3 – Portion de la voie ballastée comportant 7 blochets soumise à un cycle de bourrage sur le 4e blochet (Les blochets sont numérotés de gauche à droite)

- 740 itérations DDM ($n_{DDM} = 740$),
- 1 itération NLGS ($n_{NLGS} = n = m = 1$).

Le cas test est implémenté dans la plateforme LMGC90 [13], et réalisé sur une machine de 8 Go RAM 2 Dual-Core (2 processeurs physiques avec 2 cœurs). L'étude des grandeurs physiques du problème, tel que la compacité est détaillée dans [11]. On s'intéresse ici aux grandeurs numériques : temps de simulation, temps passé dans différentes parties du programme.

Afin d'évaluer la performance parallèle d'OpenMP, le *speedup* est défini dans cette étude (*speedup* relatif) comme : $S_p = T_1/T_p$ où T_1 est le temps d'exécution avec l'algorithme parallèle sur 1 processeur

et T_p sur p processeurs. Le *speedup* est optimal lorsque $S_p = p$. L'efficacité d'exploitation (*efficiency*) est $E_p = S_p/p$ comprise dans l'intervalle $[0, 1]$.

Le tableau 1 présente le temps total de calcul et le temps passé sur différentes parties du programme de la simulation réalisée sur 1 processeur et 4 processeurs. On remarque que la partie *résolution numérique NLGS* occupe en moyenne 75 % du temps total, la partie *détection* environ 22 % et 3 % pour les autres parties du code. La résolution NLGS est parallélisée afin de diminuer le temps total de la simulation, mais pas les autres phases. Le calcul réalisé sur 4 processeurs est environ 2 fois plus rapide que sur 1 processeur.

	Temps passé / min	
	1 processeur	4 processeurs
Temps total	14019	7860
Temps partiel <i>détection des contacts</i>	2473	2458
Temps partiel <i>résolution NLGS</i>	11290	5086
Temps partiel <i>autres parties du code</i> (prédiction, actualisation,...)	256	316
Détail du temps passé dans la partie résolution NLGS		
Parallélisation sur 7 sous-domaines	10250	4048
Calcul séquentiel sur l'interface globale	1040	1038

TAB. 1 – Prises de temps d'un calcul réalisé sur 1 et 4 processeurs

Les courbes de la figure 4 illustrant le *speed-up* et l'efficacité montrent que la partie *sous-domaines* possède une meilleure performance que le *programme total* ($speedup = 2.53 > 1.8$ et efficacité = $63.3\% > 45\%$). Effectivement, non seulement l'interface, mais aussi les autres parties du code sont traitées séquentiellement et pénalisent donc le comportement en parallèle. La deuxième source de perte d'efficacité est le déséquilibre des charges (traitement de 7 sous-domaines de tailles équivalentes sur 4 processeurs), pour la partie *sous-domaines*.

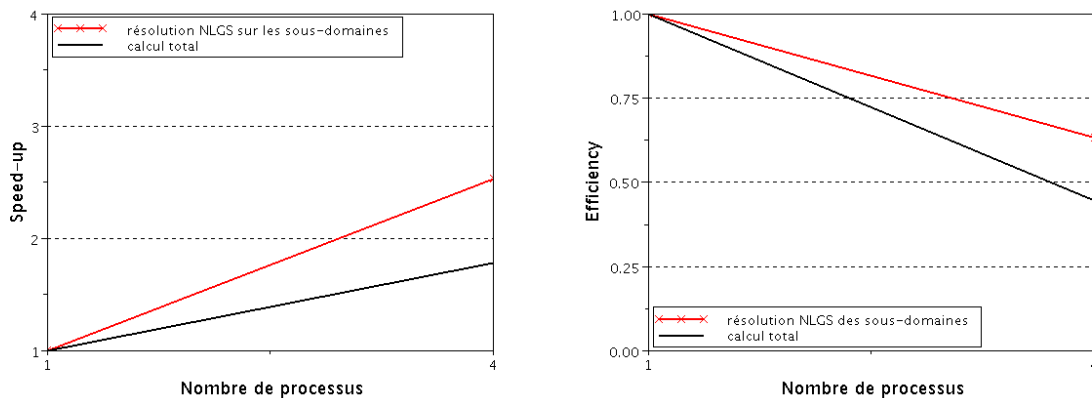


FIG. 4 – Performance avec OpenMP et 4 processeurs pour le calcul de 7 blocs

4 Conclusions

La stratégie proposée utilisant une méthode de décomposition de domaine couplée à une technique de parallélisation en mémoire partagée a montré la possibilité de réduire significativement le temps de calcul afin de traiter des problèmes industriels. Un gain de 6159 min (~ 4.3 jours de simulation) est obtenu en exploitant 4 processeurs, néanmoins la performance parallèle reste encore faible (*speedup* de 1.8 pour un *speedup* optimal de 4).

Afin d'améliorer le comportement en parallèle, quelques propositions sont dégagées, tels que : le nombre de sous-domaines est un multiple du nombre de processeurs ; un nombre de contacts par sous-domaine constant, pouvant être obtenu par un découpage géométrique optimal ; la taille de l'interface est

la plus petite possible en choisissant un nombre de sous-domaines limité et des sous-domaines de forme compacte ; et enfin la parallélisation de la détection des contacts.

Cette méthodologie présente plusieurs avantages. Le premier est d'obtenir une simulation du comportement de la voie ballastée pertinente en un temps raisonnable. Un autre avantage est de pouvoir traiter des problèmes de plus grande taille dans la suite de l'étude, afin de simuler un procédé complet de bourrage sur une portion de voie sur un environnement multiprocesseur de plus grande puissance.

Références

- [1] C. Paderno. *Comportement du ballast sous l'action du bourrage et du trafic ferroviaire*. Thèse de doctorat, EPFL, 2010.
- [2] E. Azéma. *Etude numérique des matériaux granulaires à grains polyédriques : rhéologie quasi-statique, dynamique vibratoire, application au procédé de bourrage du ballast*. Thèse de doctorat, Université Montpellier 2, 2007.
- [3] B. Solomon. *Railway maintenance*. MBI Publishing Company, USA, 2001.
- [4] R. Perales, G. Saussine, N. Milesi, and F. Radjai. Tamping process optimization. In *EUROMECH*, Lisbonne, Portugal, 2009.
- [5] G. Saussine. *Contribution à la modélisation de granulats tridimensionnels : Application au ballast*. Thèse de doctorat, Université Montpellier 2, octobre 2004.
- [6] B. Cambou and M. Jean. *Micromécanique des matériaux granulaires*. Traité MIM – Mécanique et ingénierie des matériaux. Hermes Science Europe Ltd, 2001.
- [7] L. Champany and D. Dureisseix. *A mixed domain decomposition approach*, chapter 12, pages 293–320. Mesh Partitioning Techniques and Domain Decomposition Methods. Civil-Comp Press / Saxe-Coburg Publications, 2007.
- [8] 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.
- [9] M. Renouf. *Optimisation numérique et calcul parallèle pour l'étude des milieux divisés bi- et tridimensionnels*. Thèse de doctorat, Université Montpellier 2, septembre 2004.
- [10] P. Alart, D. Dureisseix, T. M. P. Hoang, and G. Saussine. Domain decomposition methods for granular dynamics using discrete elements and application to railway ballast. In *7th Meeting on Unilateral Problems in Structural Analysis*, Palmanova, Italy, June 17-19 2010.
- [11] 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*, Lille, France, may 2011.
- [12] D. Iceta. *Simulation numérique de la dynamique des systèmes discrets par décomposition de domaine et application aux milieux granulaires*. Thèse de doctorat, Université Montpellier 2, juillet 2010.
- [13] F. Dubois and M. Renouf. Numerical strategies and software architecture dedicated to the modelling of dynamical systems in interaction. Application to multibody dynamics. In *Multibody 2007*, Milano, Italy, june 2007. ECCOMAS Thematic Conference.