

Calcul de structures/microstructures

Georges Cailletaud

Centre des Matériaux
Mines – Paristech – CNRS UMR 7633

- Le contexte
- Calcul de structures
- Calcul de microstructures

Contents

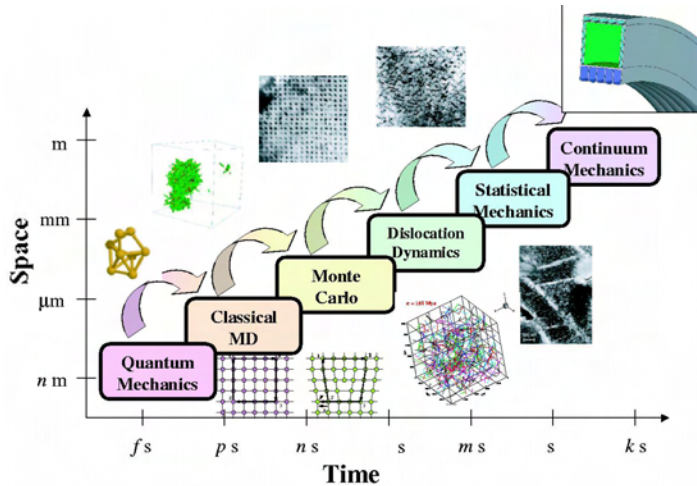
1 Contexte

2 Structures

3 Calculs de microstructures

- Prévoir le comportement d'une pièce, ou un procédé
- Calcul d'un élément de matière pour *homogénéiser* son comportement
- Calcul d'un élément de matière pour *relocaliser* et évaluer l'endommagement
- Extension à toutes les classes de matériaux

Les échelles en jeu



Recherche de sécurité



Recherche de performance



Place des matériaux dans les calculs

1970 Il y a un matériau dans les structures

- Modèles macroscopiques de comportement non linéaire, plasticité, fluage, endommagement
- Naissance de la *Mécanique des Matériaux*
- Groupement d'Intérêt Scientifique *Rupture à Chaud*
- Caractérisation des matériaux naturels

1990 Il y a une microstructure dans le matériau

- Les matériaux sont hétérogènes
- Le comportement et la rupture sont gérés par les échelles inférieures, pas au niveau d'un élément de volume sur lequel les champs sont (trop) moyennés

2000 Mélange des échelles

- Microstructures de taille comparables aux (micro-)objets
- L'endommagement des microstructures agit directement sur la structure

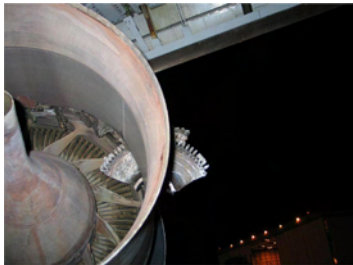
Il y a un matériau dans les structures (1)



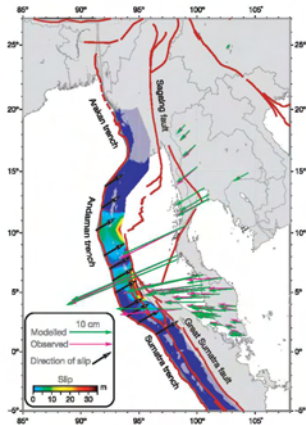
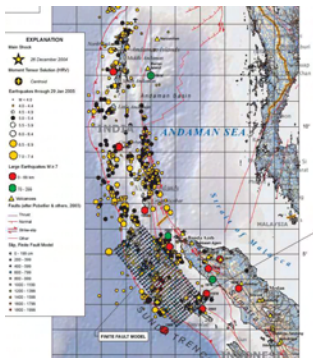
Il y a un matériau dans les structures (2)



Il y a un matériau dans les structures (3)

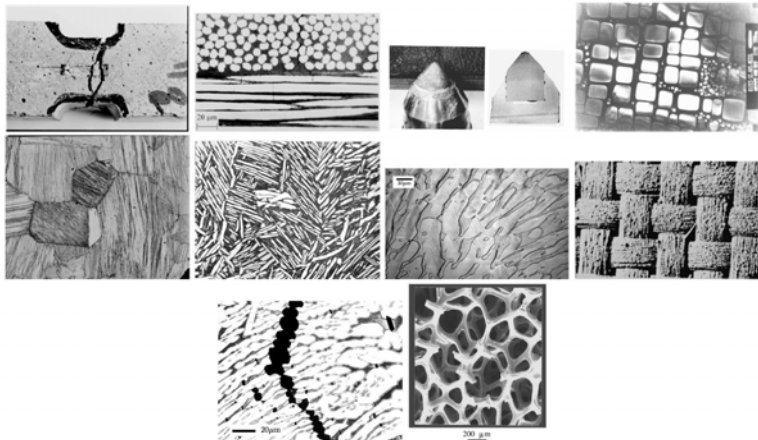


La terre, assemblage de matériaux



(Vigny et al, Nature 436, 2005)

Il faut prendre en compte la diversité des matériaux

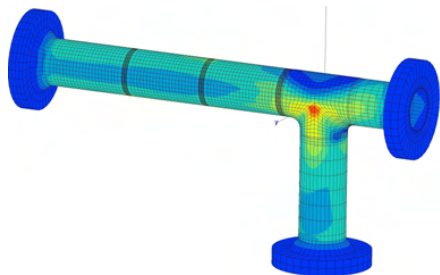


Aspect multi-échelles

Modèles de calcul

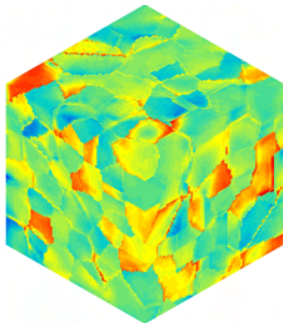
- **Les modèles de conception de structure** (modèles, codes)
Ces modèles (règles de construction) doivent être simples de manipulation et stocker sous forme éventuellement heuristique les connaissances sur des conceptions analogues. Pour ces modèles, la robustesse prime sur la performance.
- **Les modèles d'analyse de structure** (modèles phénoménologiques)
Ce sont des modèles, éventuellement raffinés, destinés à l'étude de problèmes de champ sur un objet dont la géométrie, les matériaux, les conditions aux limites et les chargements sont connus. Pour ces modèles, la performance et la robustesse doivent faire l'objet d'un compromis équilibré.
- **Les modèles de compréhension du comportement de la matière** (modèles multi-échelles)
Leur objectif principal est la compréhension fine du comportement à l'échelle locale. Pour ces modèles, la performance prime complètement sur la robustesse.

Les applications



0,5 mètre

Calcul de structure



0,1 millimètre

Calcul de microstructure

Contents

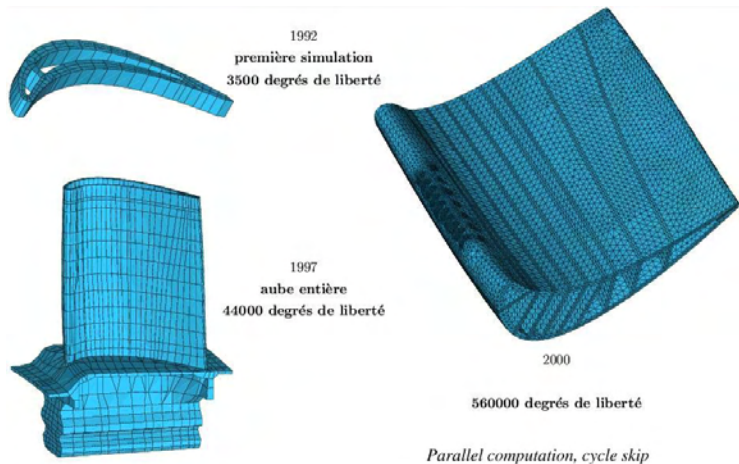
1 Contexte

2 Structures

3 Calculs de microstructures

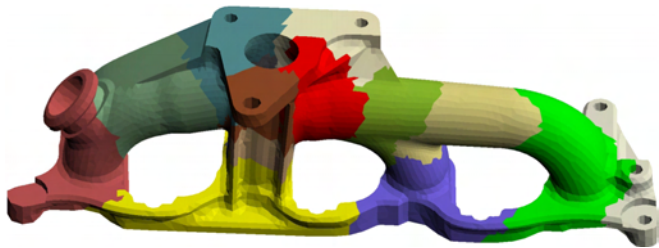
- Prévoir le comportement d'une pièce, ou un procédé
- Calcul d'un élément de matière pour *homogénéiser* son comportement
- Calcul d'un élément de matière pour *relocaliser* et évaluer l'endommagement
- Extension à toutes les classes de matériaux

Calculs d'aubes (SNECMA)



1992: Calcul d'une tranche 1997: Vrai calcul 3D avec une loi viscoplastique 2000: Prise en compte des détails géométriques

Calculs d'échappements dans un moteur automobile (Renault)

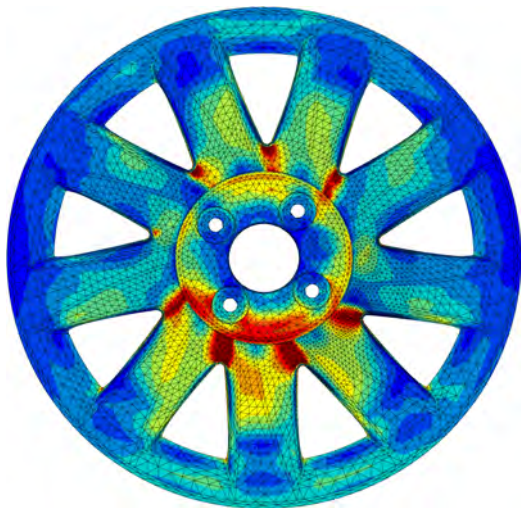


Décomposition en sous-domaines en vue du calcul parallèle

2001: 345000 degrés de liberté

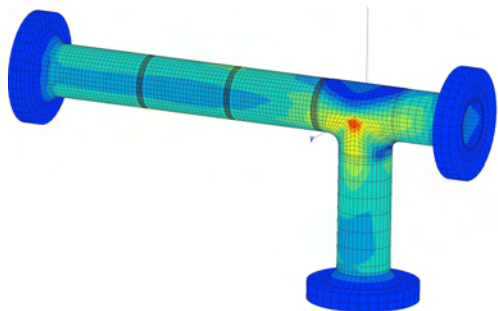
Loi de comportement viscoplastique avec vieillissement

Roue

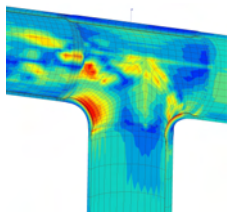


2007: 500000 degrés de liberté
Loi de prévision de durée de vie en fatigue/roulement

Tubes mélangeurs (EDF)



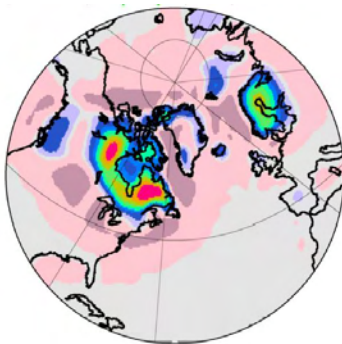
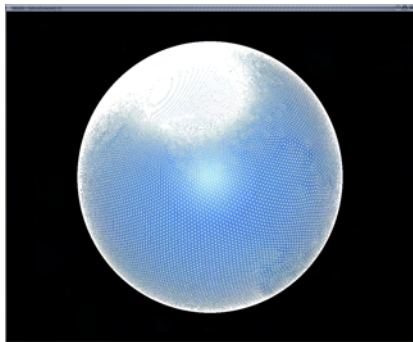
Vue générale (contrainte de von Mises)



Zoom sur la zone critique

2003: 600 000 degrés de liberté, 1000 incréments de temps

Rebond post-glaciaire (ENS)



Remontée des continents

2006: 9600000 degrés de liberté, calcul sur 100 processeurs

Contents

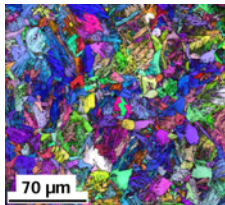
1 Contexte

2 Structures

3 Calculs de microstructures

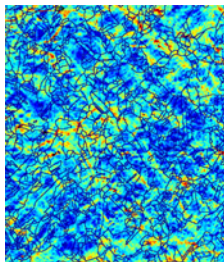
- Prévoir le comportement d'une pièce, ou un procédé
- Calcul d'un élément de matière pour *homogénéiser* son comportement
- Calcul d'un élément de matière pour *relocaliser* et évaluer l'endommagement
- Extension à toutes les classes de matériaux

Les avancées des mesures micromécaniques



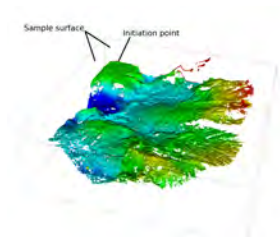
EBSD
Orientation
cristallo

(Th. S. Lubin)



Mesures de
champs locaux

(Th. C. Gérard)



Tomographie
Vue 3D
de la matière

(Th. H. Proudhon)

Contents

1 Contexte

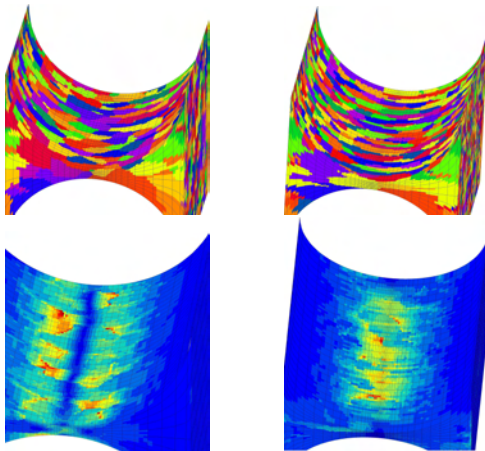
2 Structures

3 Calculs de microstructures

- Prévoir le comportement d'une pièce, ou un procédé
- Calcul d'un élément de matière pour *homogénéiser* son comportement
- Calcul d'un élément de matière pour *relocaliser* et évaluer l'endommagement
- Extension à toutes les classes de matériaux

Microcomposants : taille grain \approx taille pièce

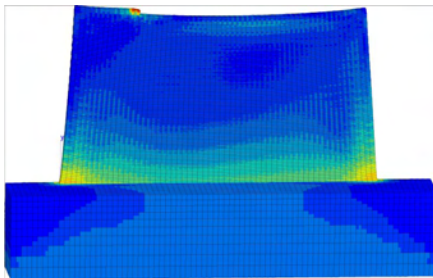
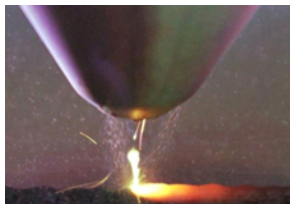
- *Dispersion de la contrainte équivalente de von Mises*



Post-Doc El Houdaigui, 2004

Prototypage laser

- *Dépôt de matière, changements de phase,...*



Thèse de A. Longuet (2008), Cailletaud, Colin

Contents

1 Contexte

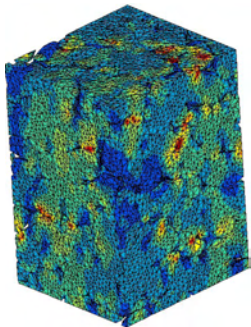
2 Structures

3 Calculs de microstructures

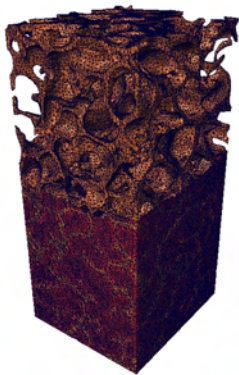
- Prévoir le comportement d'une pièce, ou un procédé
- Calcul d'un élément de matière pour *homogénéiser* son comportement
- Calcul d'un élément de matière pour *relocaliser* et évaluer l'endommagement
- Extension à toutes les classes de matériaux

Réfractaires électro-fondus

- *Prévoir le fluage d'un matériau biphasé zircone/phase vitreuse*



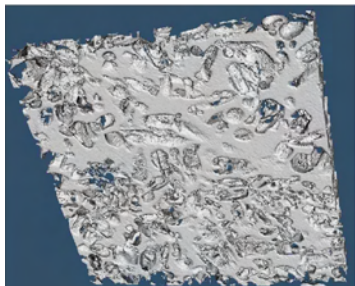
Calcul sur une petite cellule
 $350\mu\text{m} \times 350\mu\text{m} \times 350\mu\text{m}$



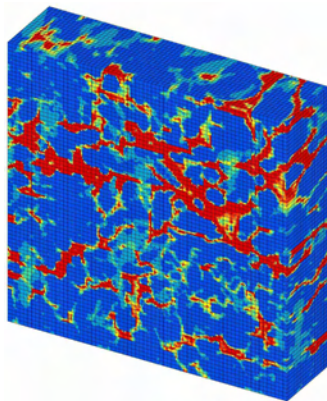
Maillage à 1300000 nœuds
 $350\mu\text{m} \times 350\mu\text{m} \times 700\mu\text{m}$

Crème glacée

- *Prévoir les propriétés (le goût ?) d'un mélange eau-crème*



Vue au microscope
confocal

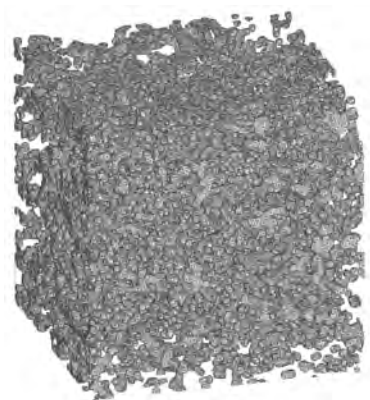
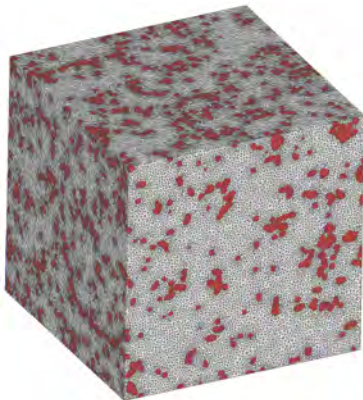


Champ de déformation
équivalente

Calcul sur 1000000 ddl

Etude de polymères chargés

- *Noir de carbone dans une matrice*



Thèse de A. Jean (2009), Forest, Jeulin

Contents

1 Contexte

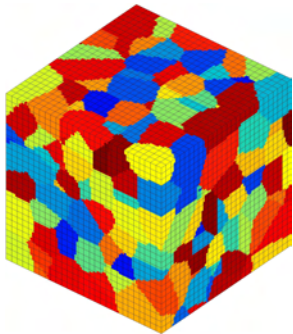
2 Structures

3 Calculs de microstructures

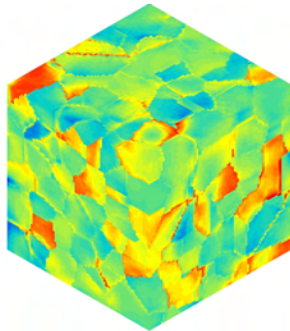
- Prévoir le comportement d'une pièce, ou un procédé
- Calcul d'un élément de matière pour *homogénéiser* son comportement
- Calcul d'un élément de matière pour *relocaliser* et évaluer l'endommagement
- Extension à toutes les classes de matériaux

Microstructures: agrégats polycristallins

- *Contraintes locales à l'échelle microscopique, effet de surface, paramètres pertinents pour les modèles d'endommagement*



Maillage de
microstructure

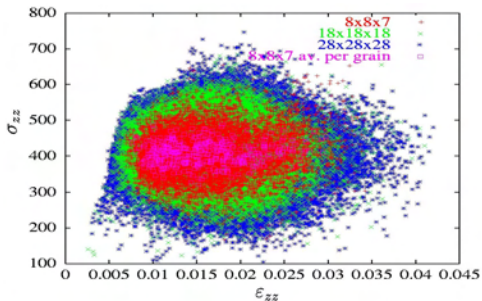


Calcul de la
contrainte équivalente de von Mises

Thèse F. Barbe (2000), O. Diard (2002)

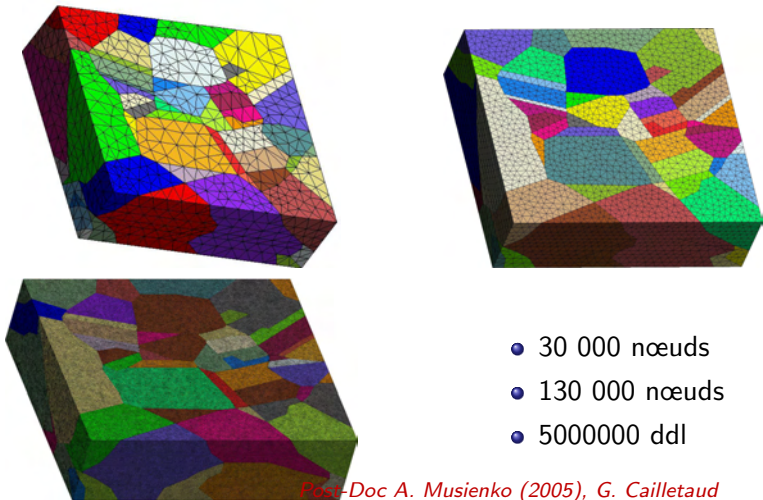
Influence de la taille du maillage sur les contraintes intragranulaires

- *Les maillages trop petits sous-estiment la dispersion*



Thèse O. Diard (2002), G. Cailletaud

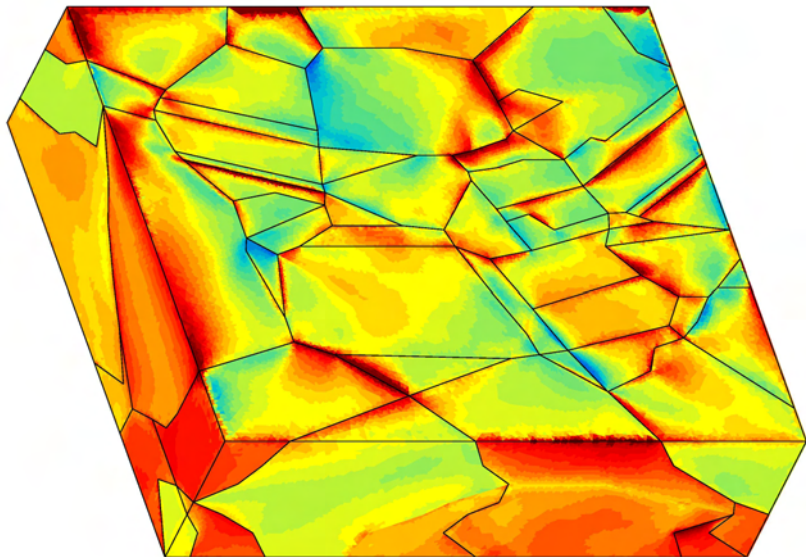
Calcul de polycristaux : recherche des mécanismes de déformation



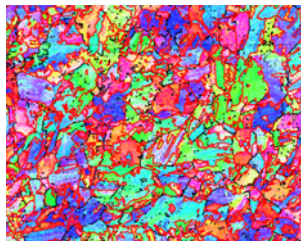
- 30 000 nœuds
- 130 000 nœuds
- 5000000 ddl

Post-Doc A. Musienko (2005), G. Cailletaud

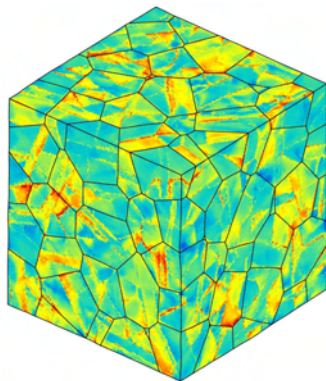
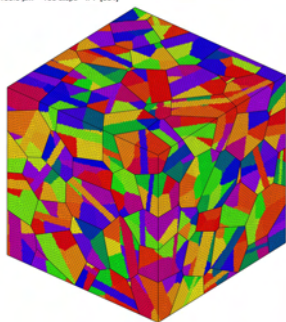
Champ de déformation locale dans un polycristal



Plasticité des alliages bainitiques



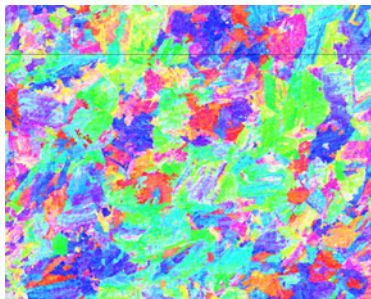
Boundary levels: 15° 40°
IPF [001]



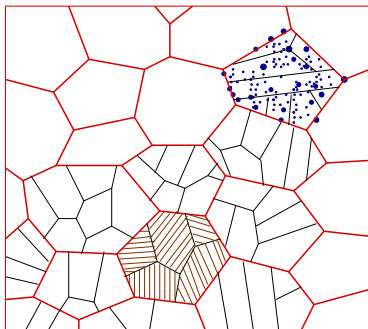
10^7 *ddl*

Thèse de N. Osipov (2007), Cailletaud

Microstructure description, 16MND5 bainitic steel



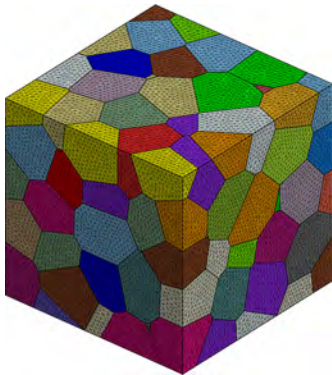
100.0 μm = 100 steps IPF [001]



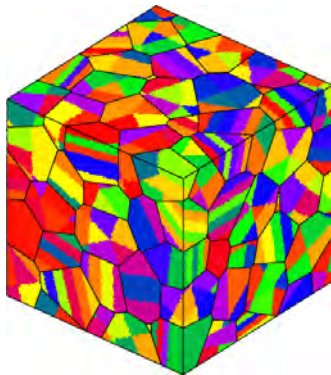
Schematic view

- grain size = $50\mu\text{m}$ - packet size = $15\mu\text{m}$ - lath size = $2\mu\text{m}$ -
- carbide size = $1\mu\text{m}$ -

Synthetic microstructure of austenitic and bainitic phases



Austenitic phase represented
by 120 Voronoi grains



Bainitic microstructure
 \approx 1000 bainitic packets
3 types of cutting

Steps to generate a free mesh

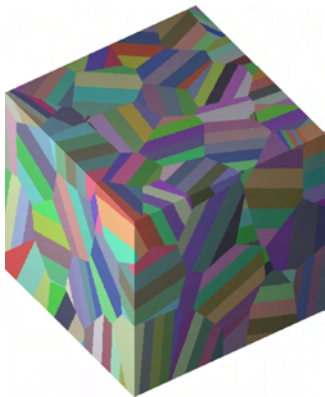


Image
generation

Steps to generate a free mesh

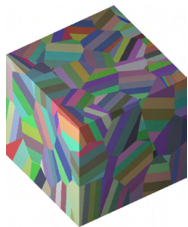
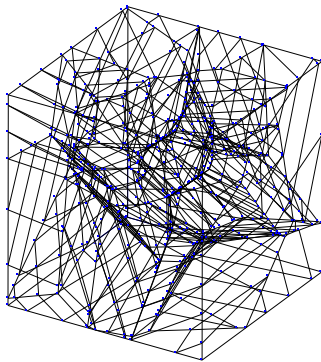


Image
generation



Geometry
reconstruction

Steps to generate a free mesh

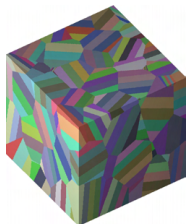
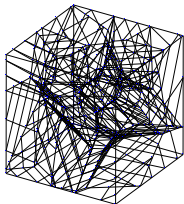
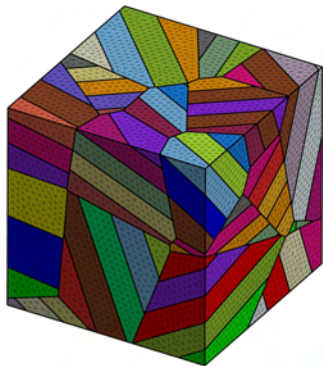


Image
generation



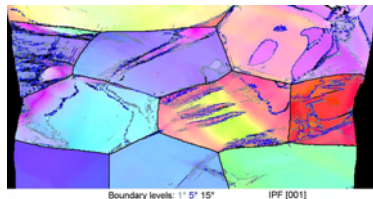
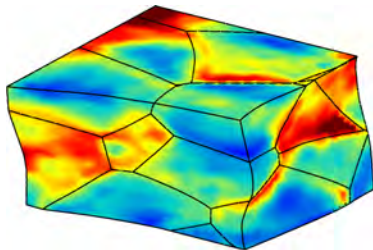
Geometry
reconstruction



Free mesh
generation

Etude de la recristallisation

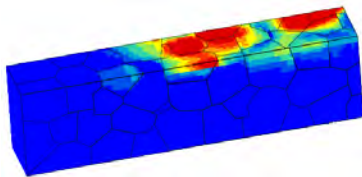
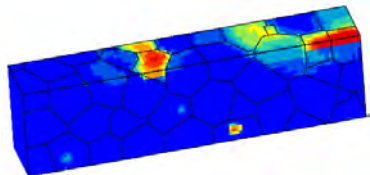
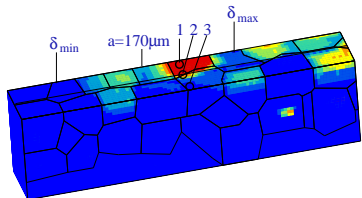
- *Modèles en mécanique des milieux continus généralisés*



Thèse de G. Abrivard (2009), Forest, Busso

Fatigue–fretting sur un polycristal

- *La taille de la zone de concentrations de contraintes dues au contacts est comparable à la taille de grain*

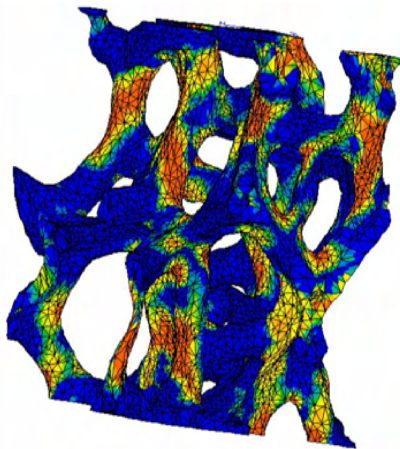
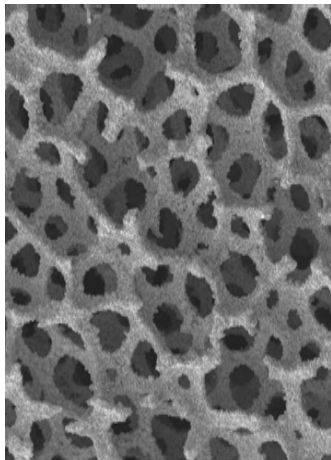


Champs de déformation inélastique équivalente après le 10ème cycle de fatigue

Thèse de T. Dick (2006), Cailletaud

Mousses de nickel

- *Matériau plastique et compressible, localement instable*



Thèse de A. Burteau (2009), Forest, Bartout, Bienvenu

Contents

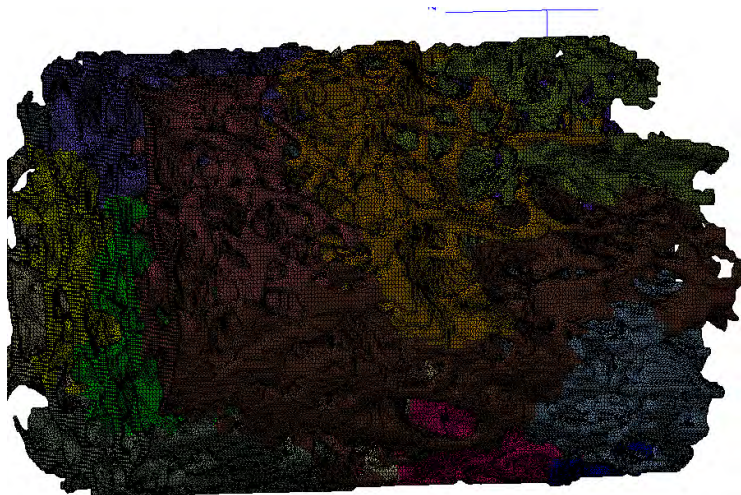
1 Contexte

2 Structures

3 Calculs de microstructures

- Prévoir le comportement d'une pièce, ou un procédé
- Calcul d'un élément de matière pour *homogénéiser* son comportement
- Calcul d'un élément de matière pour *relocaliser* et évaluer l'endommagement
- Extension à toutes les classes de matériaux

Caractérisation du risque d'ostéoporose



Post-Doc de K. Madi (2006–2007) (Boussuge, S. Forest)

Les étapes critiques de la méthode des éléments finis

- Etape *globale* pour résoudre l'équilibre
 - Parallélisme, méthode FETI
 - Résolution itérative qui utilise des sous-domaines
 - Excellente scalabilité jusqu'à 150–200 domaines
 - Fragile face au conditionnement (géométrie, contacts, hétérogénéité)
- Etape *locale* pour intégrer le comportement
 - Naturellement parallèle
 - Peut devenir longue si le système à intégrer est grand ou très non linéaire
- Développements à réaliser
 - Robustesse, équilibrage des charges
 - Parallélisme à deux niveaux

Taille mémoire et temps CPU en éléments finis

- Etape *globale* pour résoudre l'équilibre
 - Optimum aux environs de 150000 degrés de liberté par CPU
 - Temps d'une résolution élémentaire inférieur à la minute
- Etape *locale* pour intégrer le comportement
 - De 10 à 10000 variables par élément
 - Typiquement 2 et 4 GO par processeur, devient limitant
- Limites actuelles en fonction du nombre de nœuds
 - < 200000 : calcul séquentiel
 - 10^5 – 10^6 : Calcul parallèle courant
 - 10^6 – 10^7 : Calcul parallèle avancé
 - $> 10^7$: Limité à l'élasticité (200 processeurs)

En conclusion : nécessité du calcul parallèle

