

# Calcul de structures/microstructures

Georges Cailletaud

Centre des Matériaux  
Mines – Paristech – CNRS UMR 7633

- Le contexte
- Calcul de structures
- Calcul de microstructures

# Contents

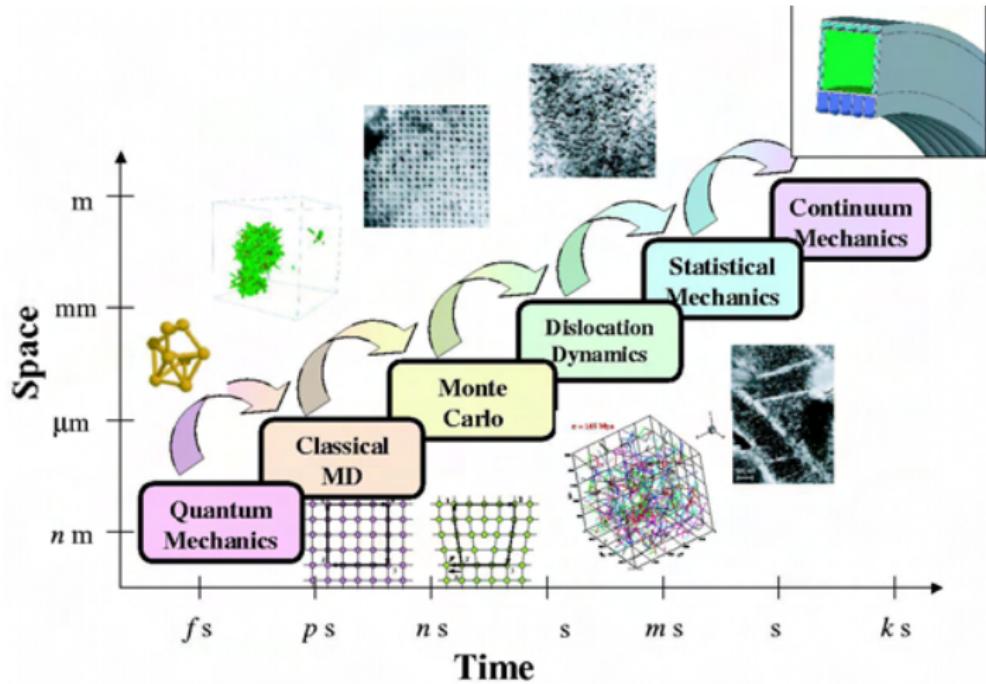
## 1 Contexte

## 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



This Photo © Mike Massee

# 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)



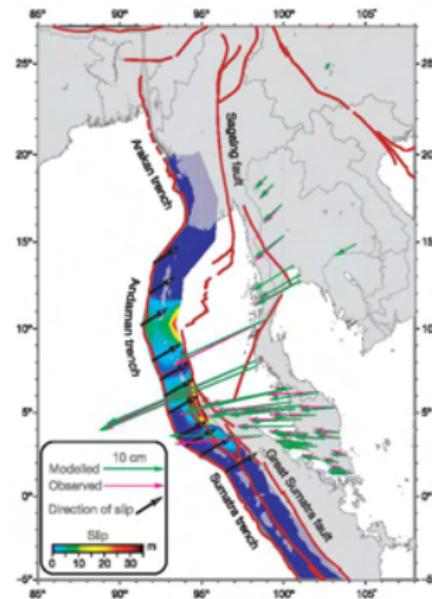
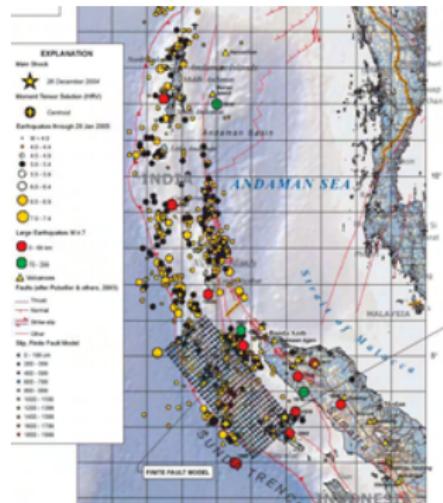
## Il y a un matériau dans les structures (2)



## Il y a un matériau dans les structures (3)

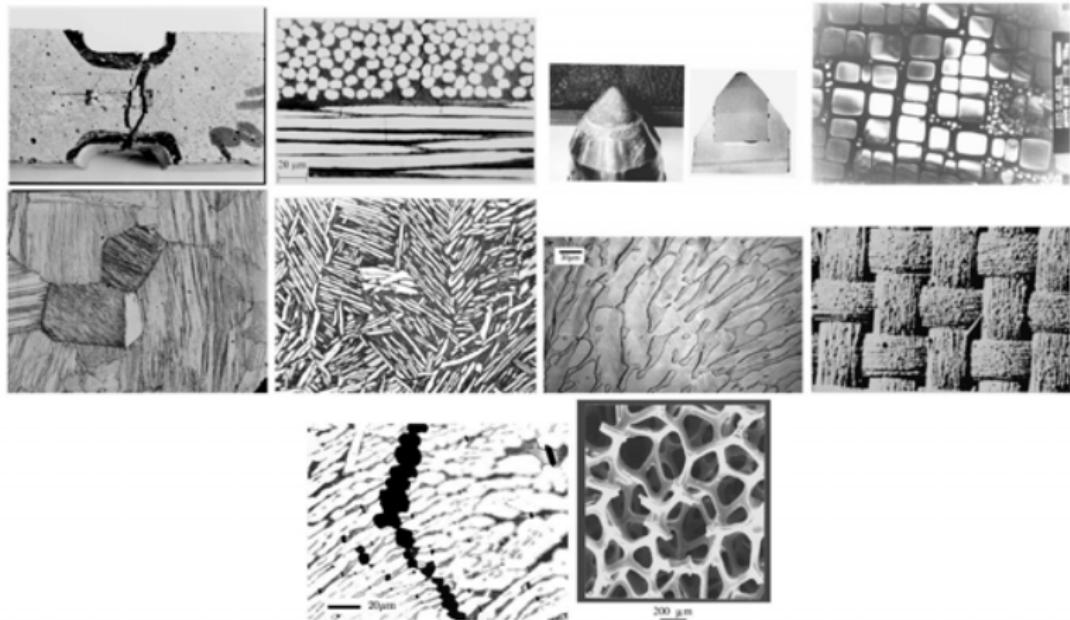


## La terre, assemblage de matériaux



(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.*

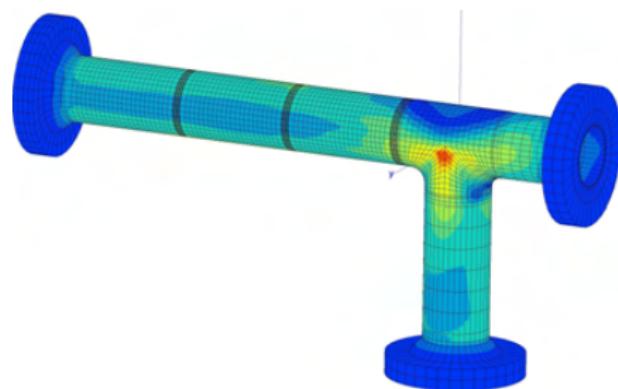
- **Les modèles d'analyse de structure** (modèles phénoménologiques)

*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)

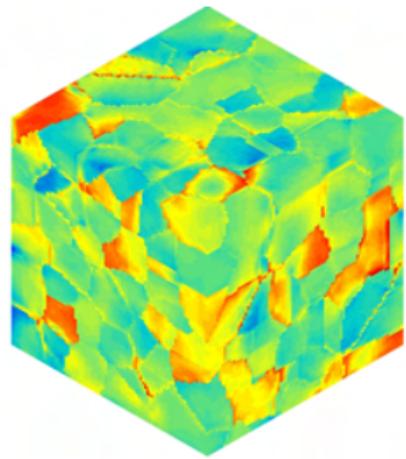
*Leur objectif principal est la compréhension fine du comportement à l'échelle locale. Pour ces modèles, la performance prime complètement sur la robustesse.*

# Les applications



0,5 mètre

*Calcul de structure*



0,1 millimètre

*Calcul de microstructure*

# Contents

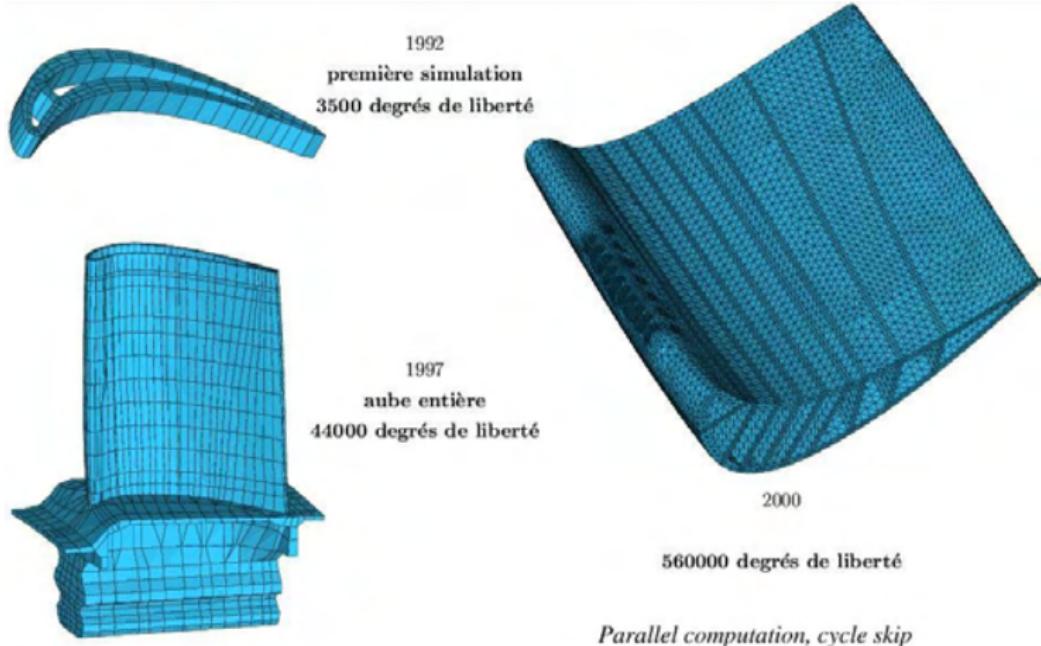
## 1 Contexte

## 2 Structures

## 3 Calculs de microstructures

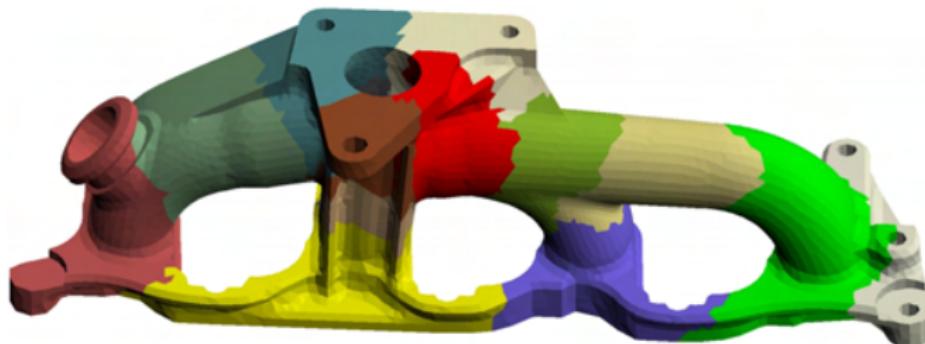
- Prévoir le comportement d'une pièce, ou un procédé
- Calcul d'un élément de matière pour *homogénéiser* son comportement
- Calcul d'un élément de matière pour *relocaliser* et évaluer l'endommagement
- Extension à toutes les classes de matériaux

# 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)

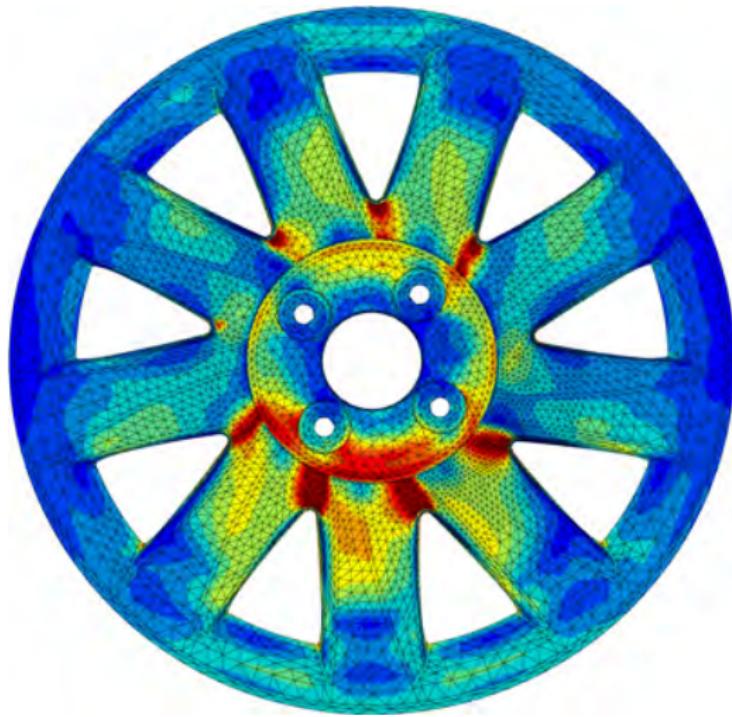


*Décomposition en sous-domaines en vue du calcul parallèle*

**2001**: 345000 degrés de liberté

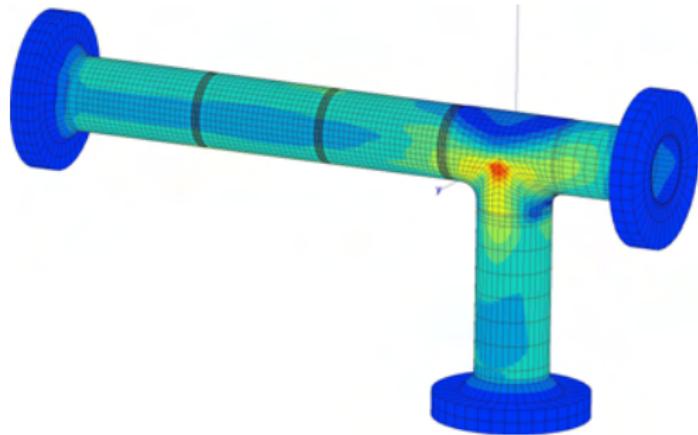
Loi de comportement viscoplastique avec vieillissement

# Roue

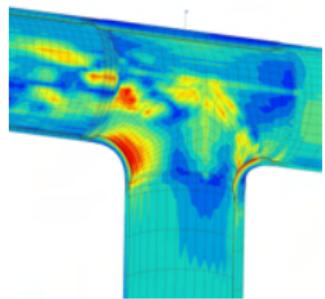


2007: 500000 degrés de liberté  
Loi de prévision de durée de vie en fatigue/roulement

# Tubes mélangeurs (EDF)



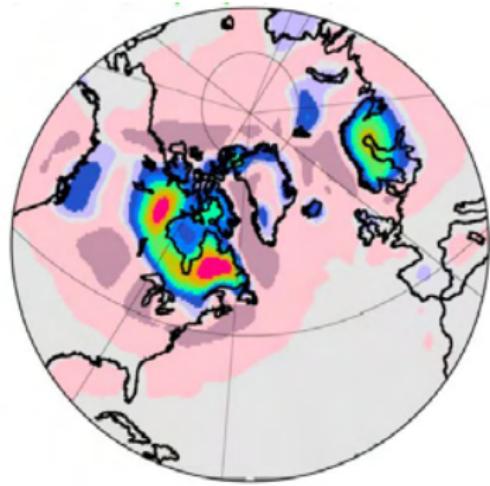
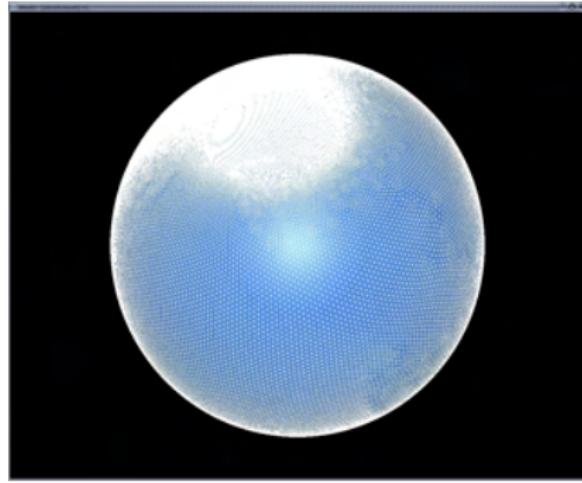
*Vue générale (contrainte de von Mises)*



*Zoom sur la zone critique*

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

# Rebond post-glaciaire (ENS)



*Remontée des continents*

2006: 9600000 degrés de liberté, calcul sur 100 processeurs

# Contents

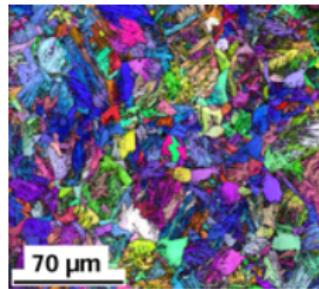
1 Contexte

2 Structures

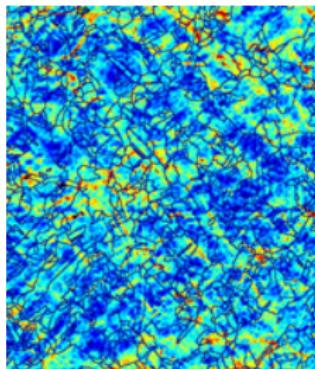
3 Calculs de microstructures

- 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

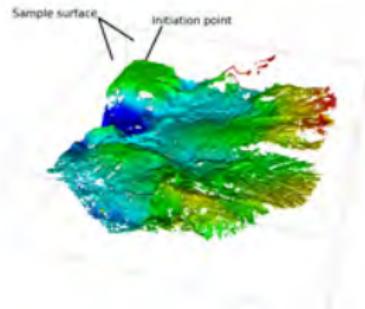
# Les avancées des mesures micromécaniques



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

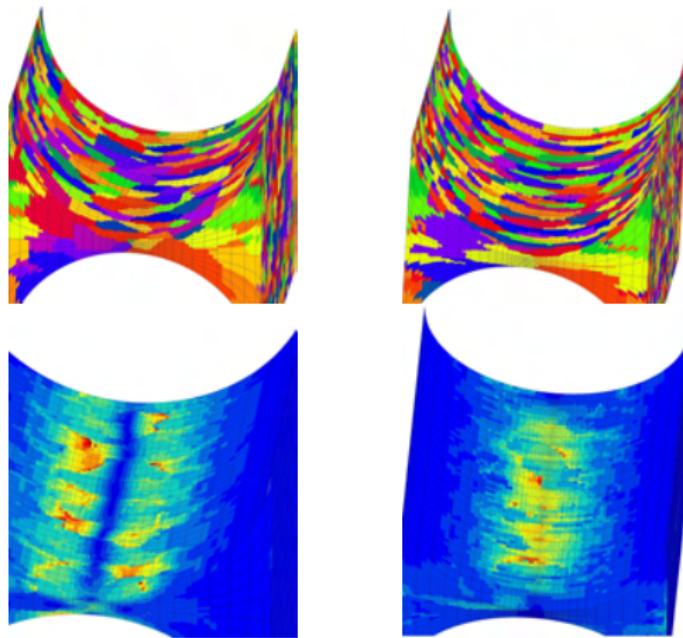
2 Structures

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

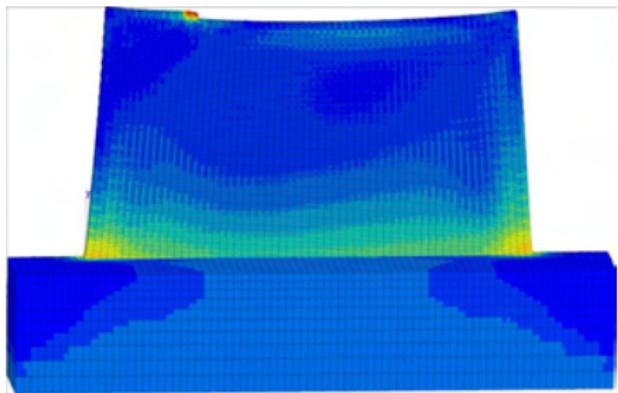
- *Dispersion de la contrainte équivalente de von Mises*



*Post-Doc El Houdaigui, 2004*

# Prototypage laser

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



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

# Contents

1 Contexte

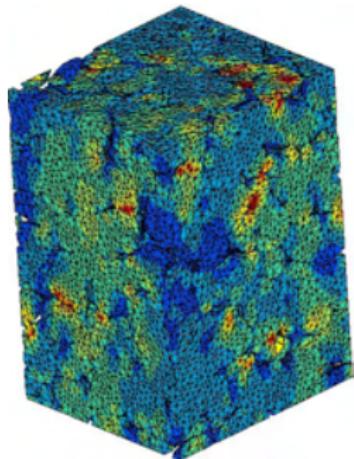
2 Structures

## 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  
 $350\mu\text{m} \times 350\mu\text{m} \times 350\mu\text{m}$



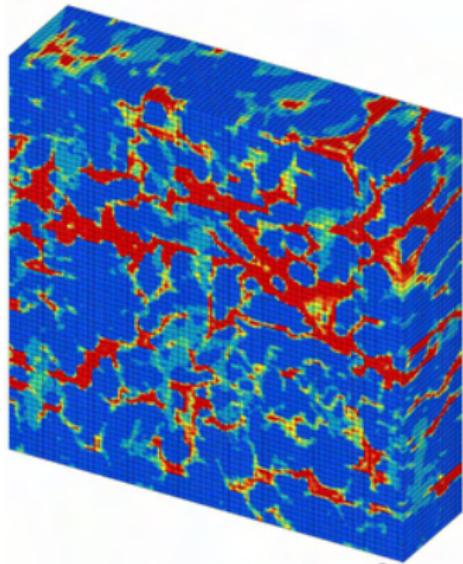
Maillage à 1300000 nœuds  
 $350\mu\text{m} \times 350\mu\text{m} \times 700\mu\text{m}$

# Crème glacée

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



Vue au microscope  
confocal

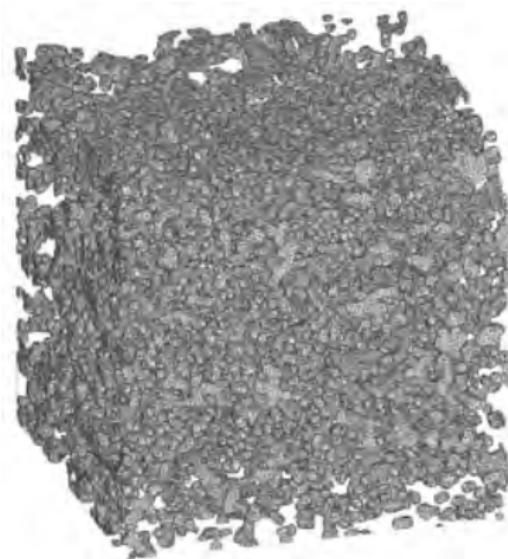


Champ de déformation  
équivalente

*Calcul sur 1000000 ddl*

# Etude de polymères chargés

- *Noir de carbone dans une matrice*



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

# Contents

1 Contexte

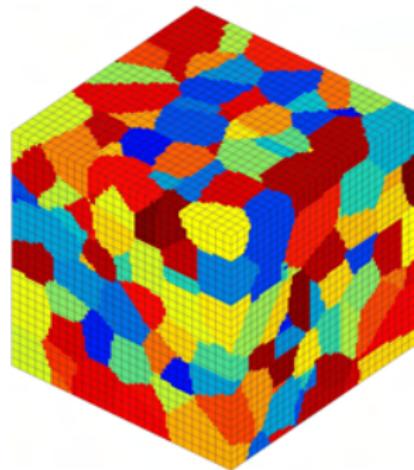
2 Structures

## 3 Calculs de microstructures

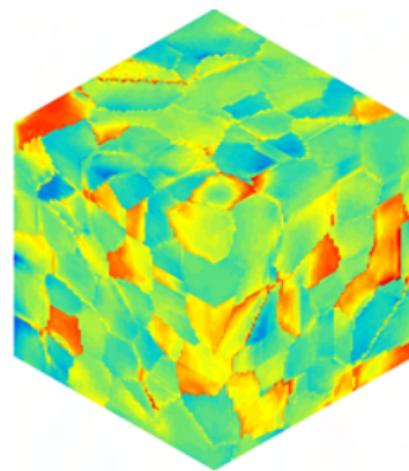
- Prévoir le comportement d'une pièce, ou un procédé
- Calcul d'un élément de matière pour *homogénéiser* son comportement
- **Calcul d'un élément de matière pour *relocaliser* et évaluer l'endommagement**
- Extension à toutes les classes de matériaux

# Microstructures: agrégats polycristallins

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



Maillage de  
microstructure

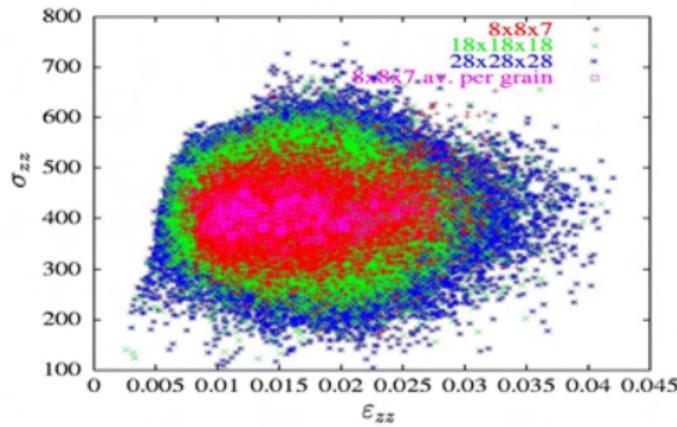


Calcul de la  
contrainte équivalente de von Mises

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

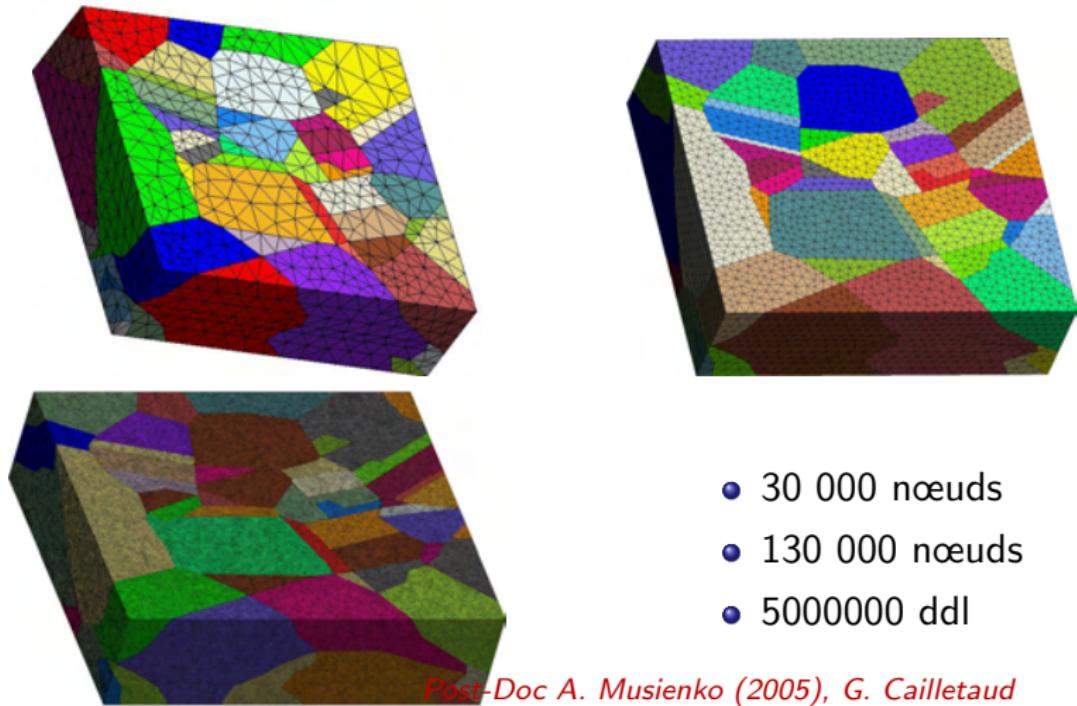
# Influence de la taille du maillage sur les contraintes intragranulaires

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

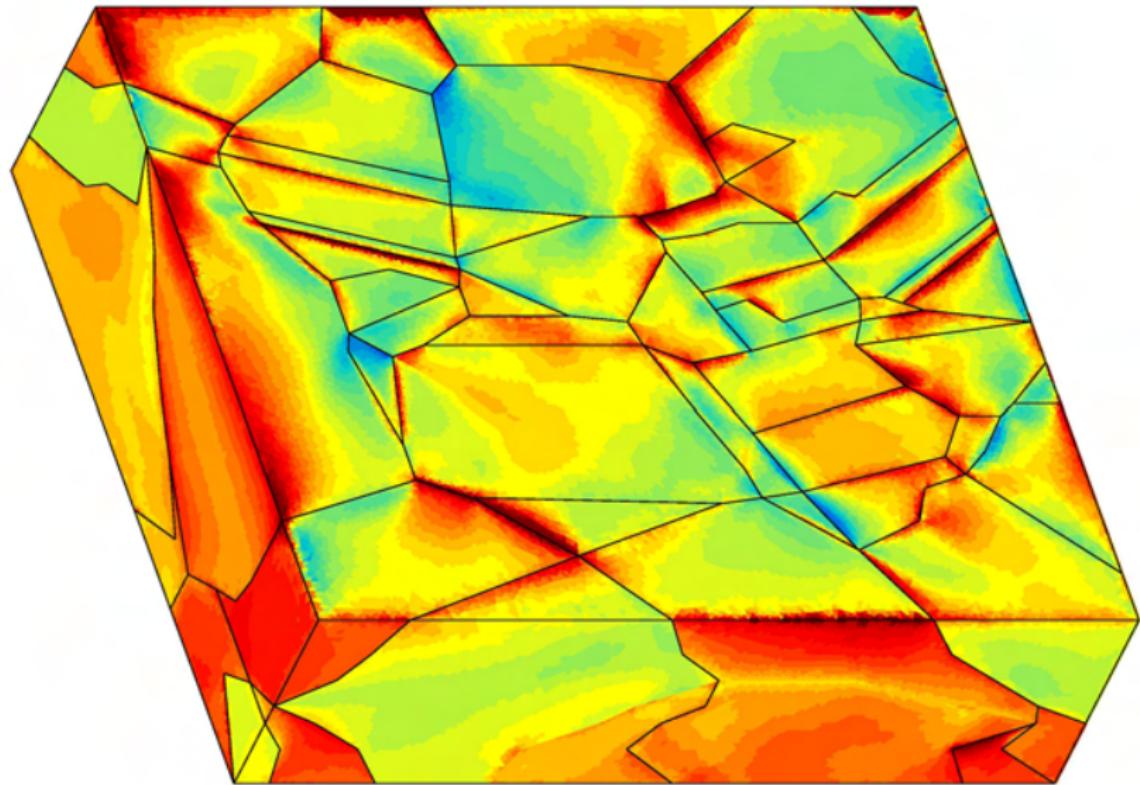


*Thèse O. Diard (2002), G. Cailletaud*

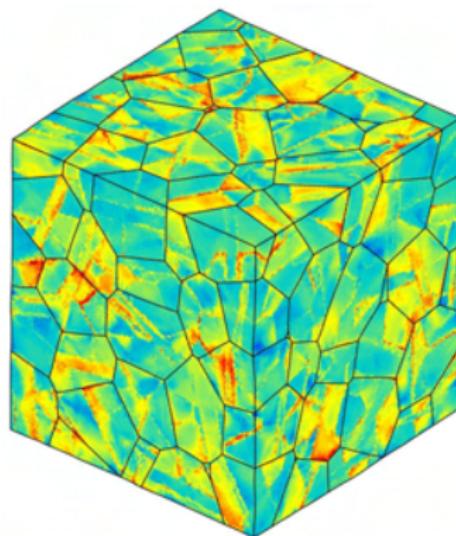
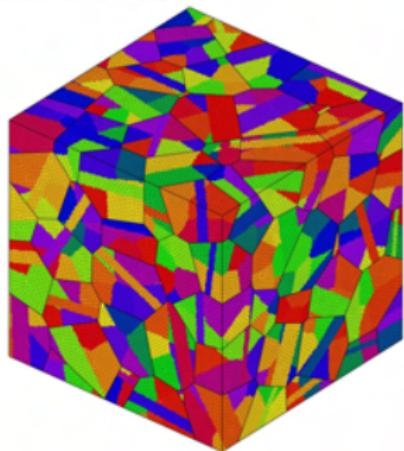
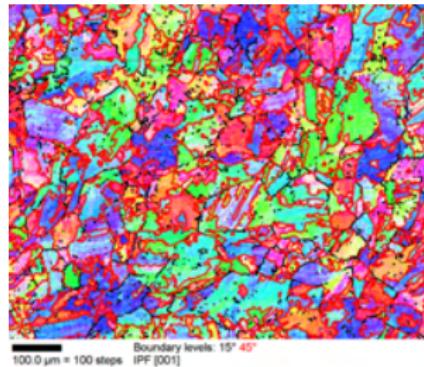
# Calcul de polycristaux : recherche des mécanismes de déformation



## Champ de déformation locale dans un polycristal

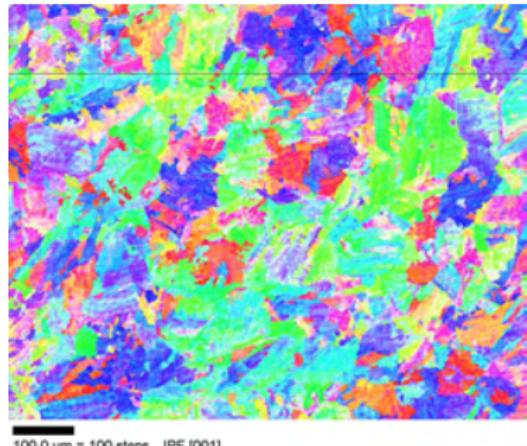


# Plasticité des alliages bainitiques

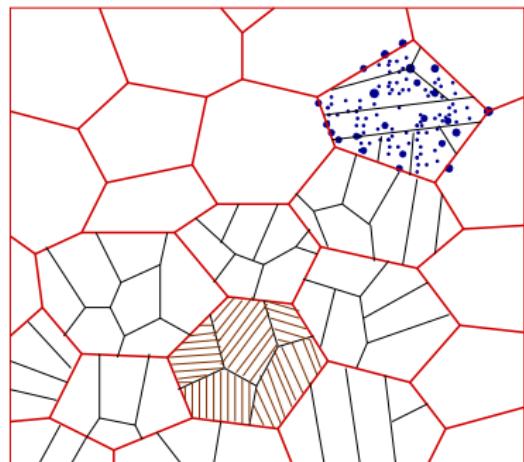


$10^7 \text{ } ddI$   
*Thèse de N. Osipov (2007), Cailletaud*

# Microstructure description, 16MND5 bainitic steel



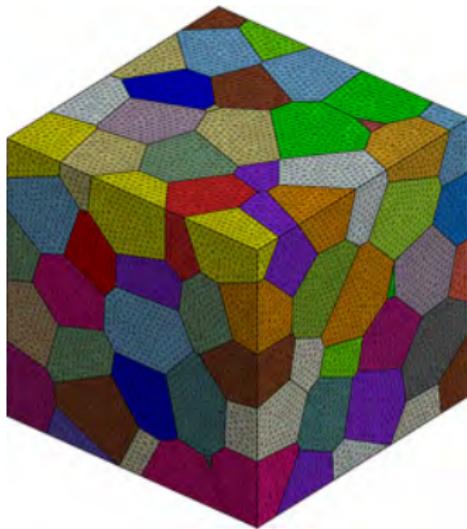
EBSD image



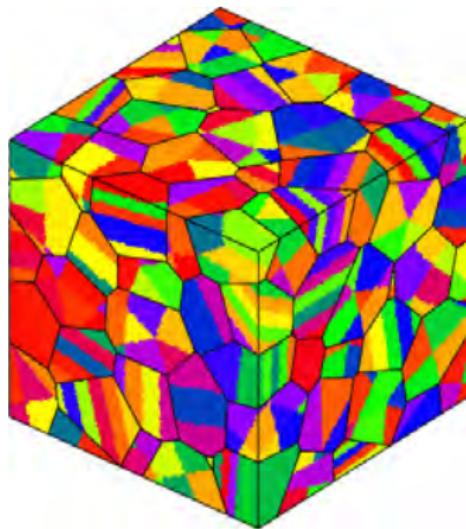
Schematic view

- 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

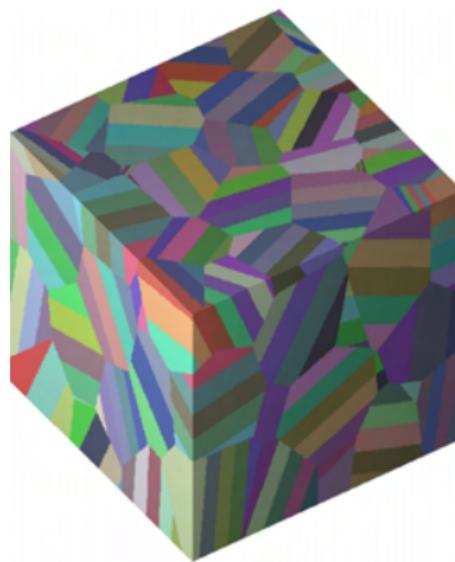


Austenitic phase represented  
by 120 Voronoï grains



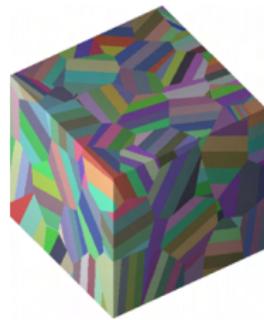
Bainitic microstructure  
 $\approx 1000$  bainitic packets  
3 types of cutting

## Steps to generate a free mesh

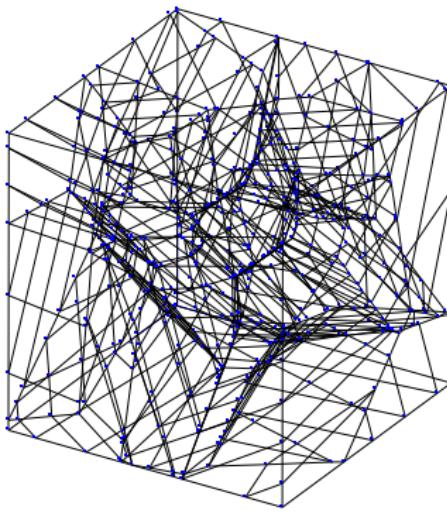


## Image generation

## Steps to generate a free mesh



## Image generation



## Geometry reconstruction

# Steps to generate a free mesh

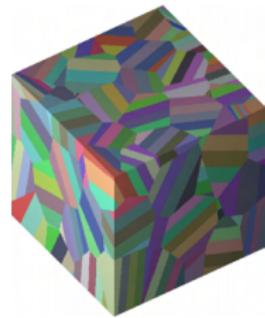
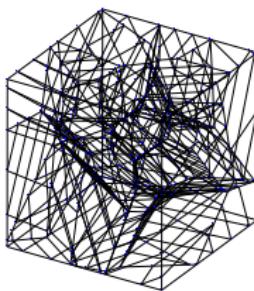
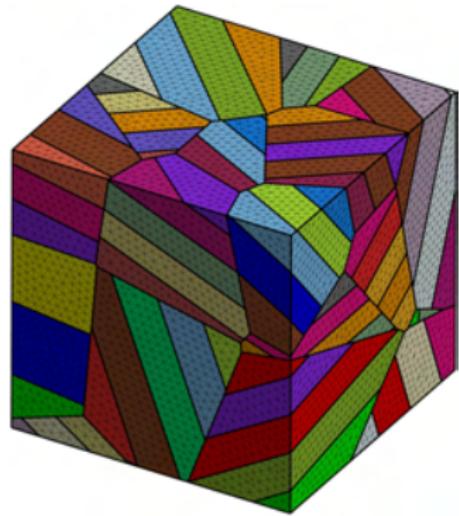


Image  
generation



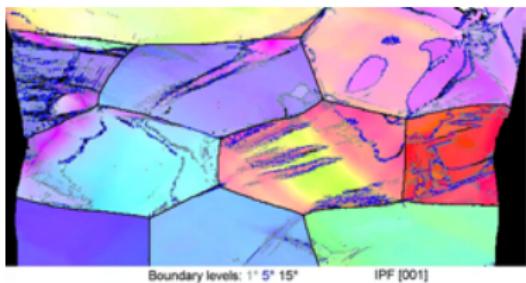
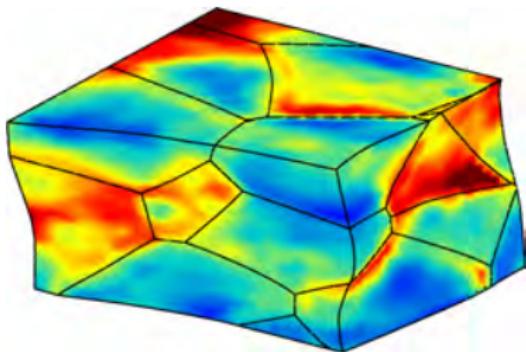
Geometry  
reconstruction



Free mesh  
generation

# Etude de la recristallisation

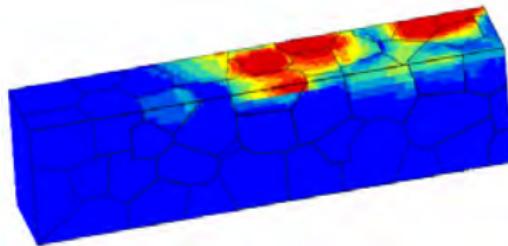
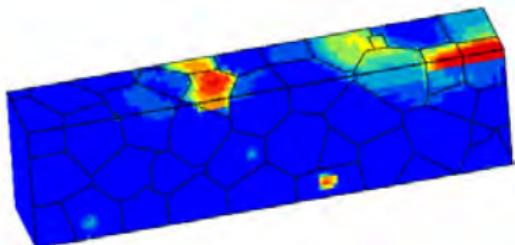
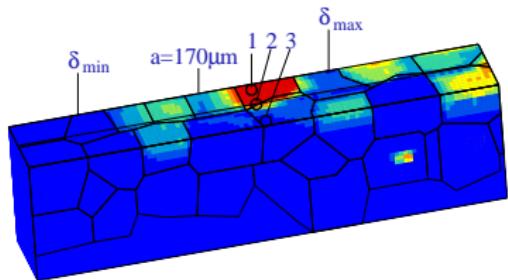
- *Modèles en mécanique des milieux continus généralisés*



*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

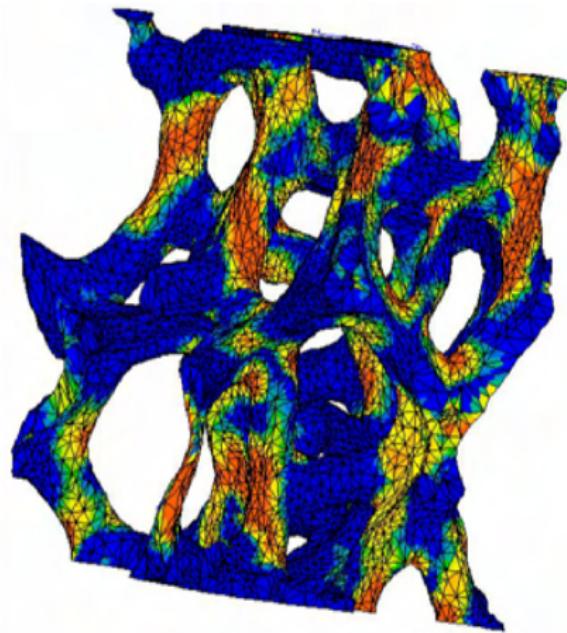
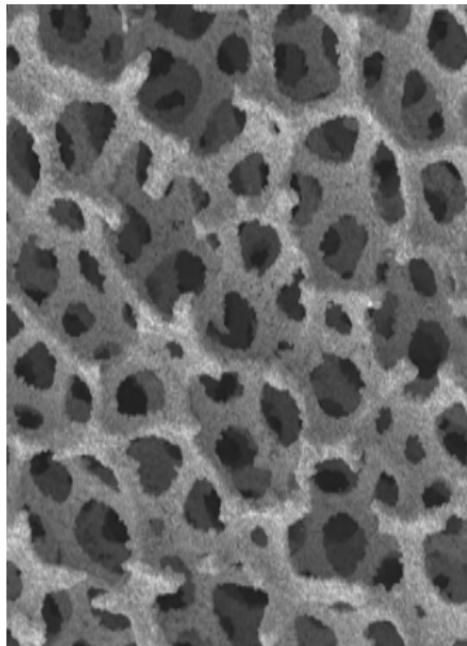


Champs de déformation inélastique équivalente après le 10ème cycle de fatigue

Thèse de T. Dick (2006), Cailletaud

# Mousses de nickel

- *Matériaux plastiques et compressibles, localement instables*



# Contents

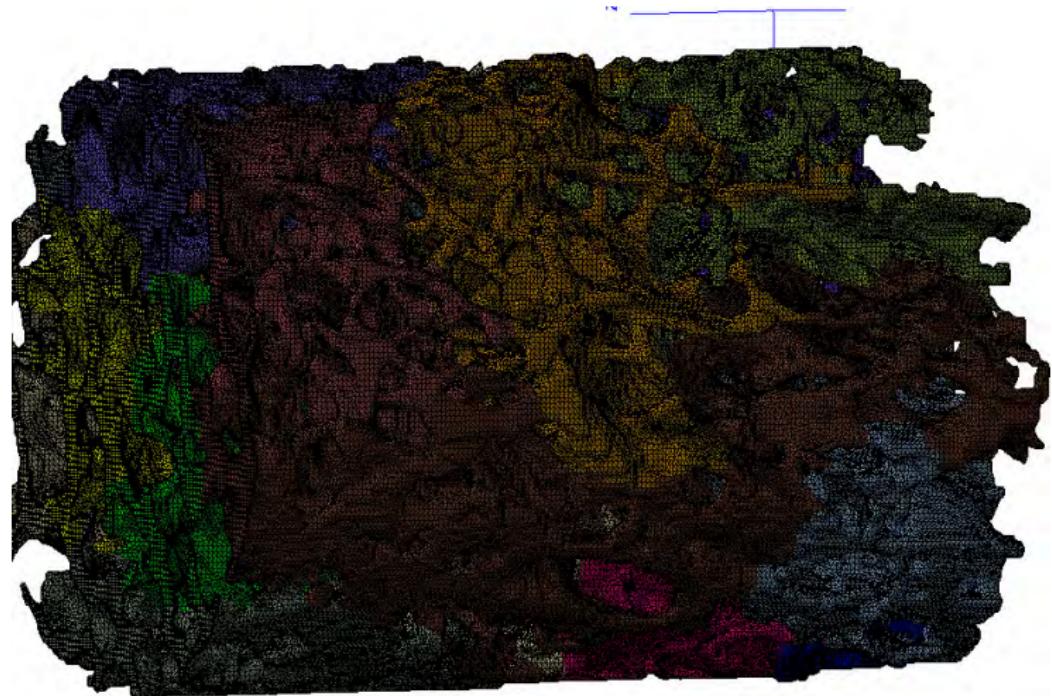
1 Contexte

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

- **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

