

Extensions du code parallèle AMITEX_FFTP à la mécanique non-locale et aux couplages

L. Gélébart¹, A. Marano¹, J. Déroutillat², Y. Chen³, F. Boioli⁴, B. Devincré⁴, R. Gatti⁴, J. Boisse⁵

¹ DEN-Service de Recherches Métallurgiques Appliquées, CEA, Université Paris-Saclay, Gif/Yvette, France
{lionel.gelebart,yang.chen,cedric.sauder}@cea.fr

² Maison de la Simulation, CEA, Université Paris-Saclay, Gif/Yvette, France, julien.derouillat@cea.fr

³ Dept. TPCIM, IMT Lille-Douai, France, chenyangpic@gmail.com

⁴ LEM, CNRS-ONERA, Chatillon, France {boioli,devincré,gatti}@onera.fr

⁵ LEMTA, Université de Lorraine – CNRS, Vandoeuvre-lès-Nancy, julien.boisse@univ-lorraine.fr

Résumé — Le code de calcul AMITEX_FFTP offre aux utilisateurs la possibilité de réaliser des simulations numériques du comportement mécanique de matériaux hétérogènes, dans un environnement allant du simple PC aux très grands calculateurs (i.e. de quelques cœurs à plusieurs milliers). Jusqu'ici, son champ d'application était restreint aux équations de la mécanique « locale », en petites perturbations et en grandes transformations. L'objectif est ici de présenter les développements récents ayant permis aux utilisateurs d'introduire, aussi simplement que possible, soit des modèles non-locaux (plasticité cristalline à gradient (A. Marano) et champ de phase d'endommagement (Y. Chen)), soit des couplages avec d'autres équations de la physique (champ de phase pour la transformation martensitique (J. Boisse)) soit même avec d'autres codes (code de Dynamique des Dislocations Discrètes (F. Boioli)).

Mots clefs — FFT, HPC, non-local, DDD

1 Introduction : HPC et FFT pour la mécanique locale

La résolution de problèmes de mécanique « locale » sur des volumes élémentaires hétérogènes soumis à des conditions aux limites périodiques, peut être réalisée de manière particulièrement performante à l'aide d'algorithmes reposant sur l'utilisation de Transformées de Fourier Rapides (ou FFT en anglais), tel que proposé par Moulinec et Suquet [6]. L'algorithme de base correspond à un algorithme de point-fixe défini à partir de l'équation de Lippmann-Schwinger (équation 1).

$$\varepsilon^{n+1} = -\Gamma_0 * (\sigma^n - c_0 : \varepsilon^n) + E \quad (1)$$

Γ_0 est l'opérateur de Green pour un milieu homogène élastique de rigidité c_0 , ε le champ de déformation recherché, et σ le champ de contrainte correspondant. Dans le cas de l'élasticité linéaire, σ et ε sont reliés linéairement mais l'algorithme peut également être appliqué à des comportements non-linéaires (élastiques ou non). Ici présenté sous l'hypothèse des petites perturbations, l'extension de l'algorithme au cadre des grandes transformations est assez direct. En définissant les champs sur une grille régulière puis en passant dans l'espace de Fourier par une FFT, le produit de convolution $*$ se transforme en un simple produit dont le résultat doit être ramené dans l'espace réel par une FFT inverse. Des bibliothèques FFT sont disponibles en version parallélisée en mémoire distribuée et le comportement, local, se parallélise très bien en mémoire distribuée. L'algorithme proposé (équation 1) est donc parfaitement adapté à une implémentation en mémoire distribuée. Toutefois, si une implémentation parallélisée en mémoire partagée est très aisée, une implémentation en mémoire distribuée apporte un niveau de complexité supplémentaire.

Le développement du code de calcul AMITEX_FFTP [1], parallélisé en mémoire distribuée

(implémentation MPI), a donc été entrepris afin de repousser les limites des simulations numériques (taille et temps de calcul) rencontrées couramment avec des codes Eléments-Finis « standards ». A titre d'exemple, une simulation élastique de 5 milliards de voxels peut ici être réalisée en 20 minutes (sur 1568 cœurs) [2]. Le code est adapté aux équations de la mécanique locale en petites et grandes transformations, avec diverses possibilités de chargement et de sorties. Une interface permet d'introduire très simplement des lois de comportement 'utilisateur' en adhérant au format UMAT d'ABAQUS également repris par CAST3M.

Si de nombreuses évolutions peuvent encore être envisagées, les possibilités actuelles répondent d'ores et déjà à une grande partie des besoins exprimés par les utilisateurs de ce type de simulation. Une nouvelle voie d'évolution pour AMITEX_FFTP consiste désormais à étendre son champ d'application actuellement limité aux équations de la mécanique locale. Les extensions entreprises, fruits de travaux internes au CEA (A. Marano) et de collaborations (Y. Chen, J. Boisse, F. Boioli) concernent :

- L'utilisation de modèles mécaniques non-locaux (plasticité cristalline à gradient (A. Marano), endommagement non-local (Y. Chen))
- Le couplage avec d'autres équations de la physique (transformation martensitique (J. Boisse)),
- Le couplage avec d'autres codes (couplage avec le code Micromegas de Dynamique des Dislocations Discrètes (F. Boioli))

On limite ici la présentation de ces travaux à deux exemples : l'implémentation d'un modèle d'endommagement non-local proposé par Miehe, et la mise en place d'un couplage entre AMITEX_FFTP et le code de DDD Micromegas.

2 Modèles mécaniques non-locaux : modèle d'endommagement de Miehe

2.1 Modèle d'endommagement par champ de phase (Miehe) cristalline à gradient

Le modèle de champ de phase proposé par Miehe [4] a été implémenté au sein du code AMITEX_FFTP par Yang Chen lors de son post-doc à l'IMT de Lille-Douai [3]. Le modèle est décrit par le jeu d'équations (2-4). Le champ de phase d'endommagement d , modifie le comportement élastique par le biais d'une fonction $g(d)$ (choix arbitraire $(1-d)^2$), différemment suivant que la sollicitation est de type traction (+) ou compression (-) (on se reportera à l'article de Miehe pour les détails) (équation 2.2). A d fixé, le jeu d'équations (2) est un problème élastique classique susceptible d'être résolu par une méthode FFT telle que décrite en introduction.

$$\begin{cases} \operatorname{div}(\boldsymbol{\sigma}) = \mathbf{0} \\ \boldsymbol{\sigma} = g(d)[\lambda \langle \operatorname{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}) \rangle_+ \mathbf{I} + 2\mu \boldsymbol{\varepsilon}_+] + [\lambda \langle \operatorname{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}) \rangle_- \mathbf{I} + 2\mu \boldsymbol{\varepsilon}_-] \\ \boldsymbol{\varepsilon} = (\nabla \mathbf{u} + \nabla^T \mathbf{u})/2 \end{cases} \quad (2)$$

Le champ d'endommagement d est quand à lui relié au champ de déformation par l'équation différentielle :

$$\frac{g_c}{l_c} [d - l_c^2 \Delta d] = 2(1-d) \mathcal{H}(\boldsymbol{\varepsilon}) \quad (3)$$

avec,

$$\mathcal{H}(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}, t)) := \max_{\tau \in [0, t]} \psi_0^+(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}, \tau)) \quad \text{et} \quad \psi_0^\pm = \frac{\lambda}{2} \langle \operatorname{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}) \rangle_\pm^2 + \mu (\boldsymbol{\varepsilon}^\pm : \boldsymbol{\varepsilon}^\pm) \quad (4)$$

A déformation ε fixée, l'équation 3 peut également être résolue en passant dans l'espace de Fourier et en utilisant une construction similaire à celle utilisée en mécanique [3]. Ainsi, le problème peut être résolu de manière approchée par une succession de résolutions des problèmes (2) puis (3). Ce type d'algorithme très simple, proposé par Miehe, nécessite cependant l'utilisation de pas de chargement très faibles.

2.2 Applications

2.2.1 Eprouvette à simple entaille

A titre de validation, la figure 1 présente une comparaison des courbes contrainte axiale vs déformation axiale obtenues avec des simulations aux éléments-finis du même modèle par Miehe [4] puis récemment par Molnar [5]. La comparaison des trois courbes montre un accord correct. L'accord avec Molnar est très bon en début d'essai, lorsque l'endommagement s'initie, puis bien meilleur avec Miehe en fin d'essai, lorsque la fissure propage. Une analyse plus poussée des différences observées entre les différents codes serait riche d'enseignement.

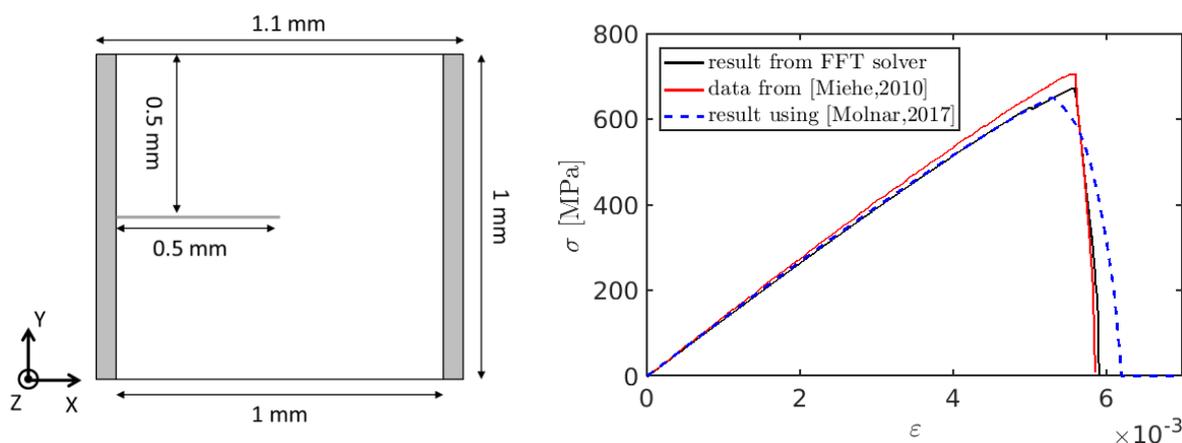


Figure 1. Courbe contrainte-déformation macroscopique simulée par FFT, comparée aux simulations aux éléments-finis de Miehe [4] et Molnar [5].

2.2.2 Eprouvette à double entailles

A titre d'illustration maintenant, la figure 2 présente l'évolution du champ d'endommagement d pour une éprouvette à double entailles, soit symétrique, soit légèrement asymétrique. Dans ce dernier cas, on observe que la simulation numérique FFT est capable de reproduire l'interaction entre les deux fissures donnant lieu à la formation d'un « œil », phénomène observé expérimentalement et également reproduit par Molnar dans une simulation aux éléments-finis [5].

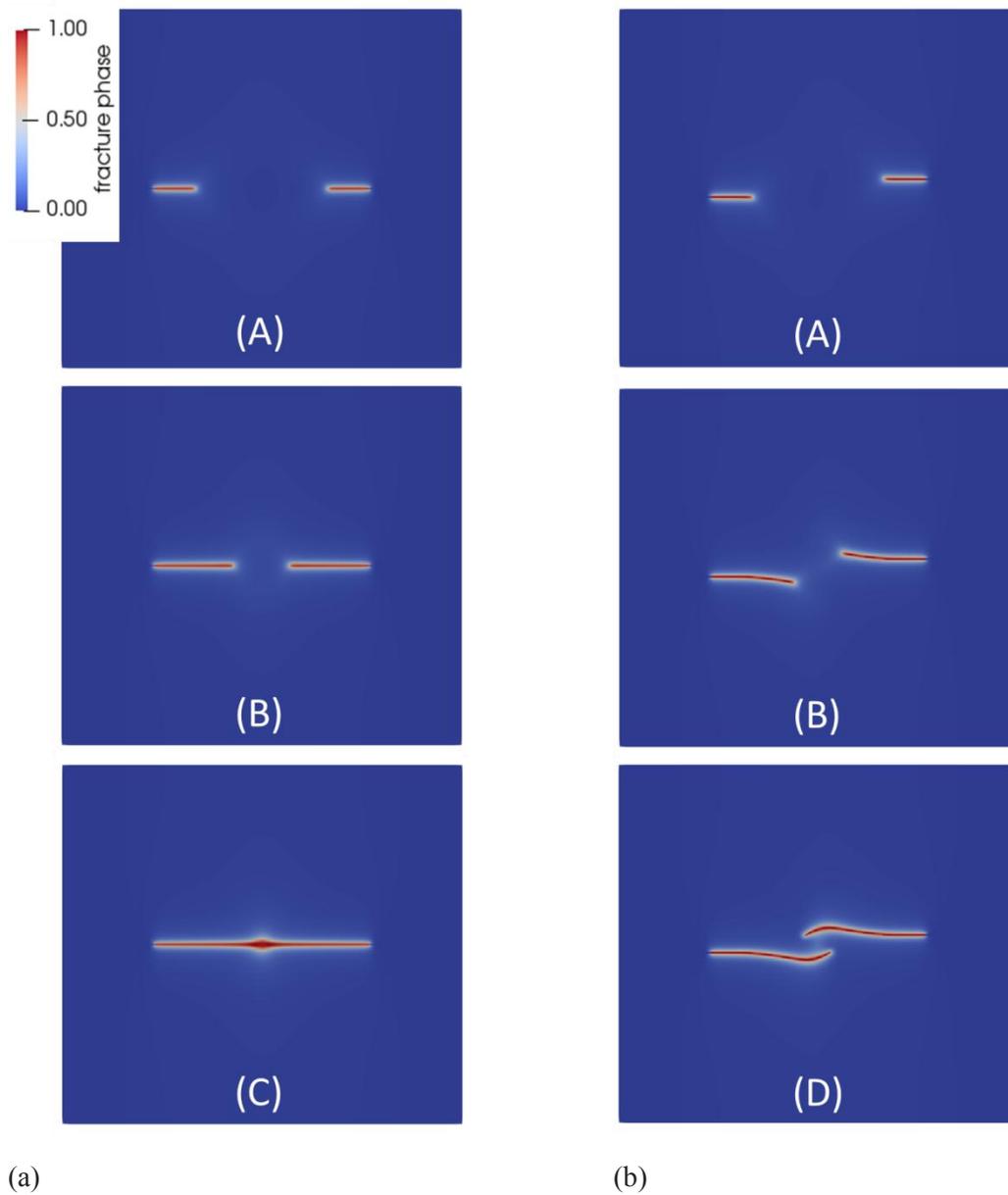


Figure 2. Evolution du champ d pour une éprouvette doublement entaillée, symétrique (gauche) ou asymétrique (droite), sollicitée en traction

3 Couplage AMITEX_FFTP – Micromegas (DDD)

Un couplage entre le code AMITEX_FFTP et le code de Dynamique des Dislocations Discrètes de l'ONERA, Micromegas, est actuellement en cours de développement dans le cadre du post-doctorat de F. Boioli (projet Européen H2020-M4F). Un couplage analogue a été mis en œuvre par le passé avec le code de simulation aux éléments-finis Zébulon [7]. On souhaite ici tirer parti du parallélisme d'AMITEX_FFTP afin d'obtenir une amélioration importante des performances en termes de taille et/ou de durée de simulation. Il est important de noter qu'en plus du gain de performance apporté par le code AMITEX_FFTP, ce type de couplage permet d'étendre le champ d'application des simulations DDD en prenant en compte des microstructures hétérogènes (prise en compte de précipités, de cavités, de grains anisotropes etc...).

Le fonctionnement d'un code de DDD repose sur une discrétisation des dislocations en segments qui, soumis à différentes forces, se déplacent. En plus de la force associée à la contrainte appliquée, il faut ajouter toutes les forces associées aux interactions entre tous les segments. Ainsi, le nombre de forces à calculer évolue en n^2 (n =nombre de segments) et il est nécessaire d'avoir recours à des stratégies pour réduire ces calculs, le couplage avec un solveur élastique (EF ou FFT) en est une. L'idée générale consiste ici à distinguer les forces (entre segments) à courte distance et les forces (entre segments) à longue distance et à calculer ces dernières à partir du champ de contrainte issu d'un calcul élastique dans lequel les dislocations sont représentées par un champ de déformation libre (plastique). Plus précisément, lorsqu'une dislocation balaye une surface, elle introduit un saut de « déplacement plastique » permettant de définir un champ de déformation libre (plastique) régularisée autour de cette surface. La figure 3, illustre une boucle de dislocation (ligne bleue) représentée par un champ de déformation libre (plastique) (dont une iso-surface est tracée sur la figure de gauche), donnant naissance à un champ de contrainte (à droite sur la figure). En pratique dans le code AMITEX_FFTP, une loi de comportement élastique avec déformation libre est déclarée et à chaque pas de temps, la déformation libre (plastique) est évaluée à partir des surfaces balayées par les dislocations, reçues du code DDD. Le champ de contrainte associé est évalué (algorithme présenté en introduction) et transmis au code DDD afin d'évaluer les forces entre segments à longue distance. Ce dernier évalue également les forces entre segments à courte distance puis fait évoluer les dislocations et transmet à nouveau à AMITEX_FFTP les surfaces balayées et ainsi de suite. Un premier exemple de comparaison est proposé à la figure 4 entre une structure de dislocations simulée avec le code DDD seul et avec le code couplé FFT-DDD. Si ce résultat préliminaire démontre que le couplage FFT-DDD est opérationnel, une optimisation des paramètres du couplage est encore à l'étude.

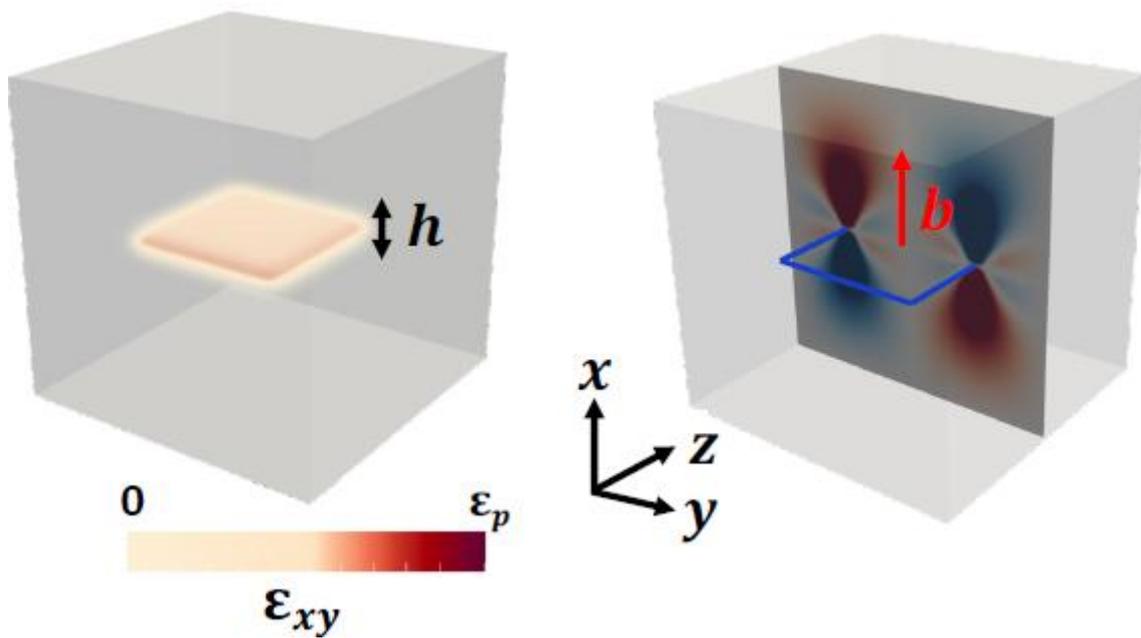


Figure 3. A gauche, iso-surface du champ de déformation libre (plastique) associé à la boucle de dislocation bleue (à droite). A droite, champ de contrainte évalué par FFT.

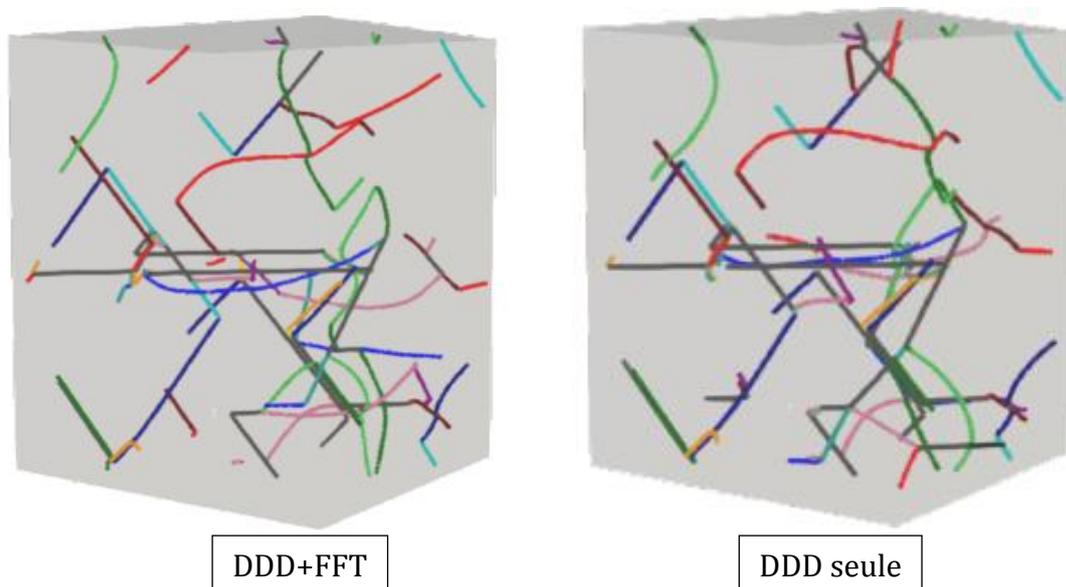


Figure 4. Première comparaison entre une structure de dislocations obtenue à l'issue d'un calcul en DDD seule ou à partir du couplage DDD-FFT.

4 Conclusions et perspectives

Le code AMITEX_FFTP, disponible librement pour la recherche, permet en standard de réaliser des simulations numériques massivement parallèles du comportement mécanique de cellules hétérogène petites et grandes transformations.

Des travaux en cours, illustrés ici par deux cas particuliers, consistent à mettre en place un cadre permettant aux utilisateurs d'introduire des modèles de comportements non-locaux, de nouveaux algorithmes, des couplages avec d'autres équations associées à d'autres problèmes physiques ou encore des couplages à d'autres codes de mécanique. Des exemples complémentaires illustrant l'introduction d'une loi de plasticité cristalline non-locale et le couplage mécanique/transformation de phase pour la transformation martensitique seront évoqués lors de la présentation orale.

Références

- [1] Amitex_fftp, <http://www.maisondelasimulation.fr/projects/amitex/html/index.html>.
- [2] Y. Chen, L Gélébart, C. Chateau, M. Bornert, and C. . Sauder. Analysis of the damage initiation in a SiC/SiC composite tube from a direct comparison between large-scale numerical simulation and synchrotron x-ray micro-computed tomography. *International Journal of Solids and Structures*, 2018.
- [3] Y. Chen, D. Vasiukov, L. Gélébart, and C-H Park. A fft solver for variational phase-field modeling of brittle fracture. *Comput. Meth. in Appl. Mech. and Eng.*, submitted, 2018.
- [4] C. Miehe, F. Welschinger, and M. Hofacker. Thermodynamically consistent phase-field models of fracture: Variational principles and multi-field fe implementations. *Int. Jour. of Num. Meth. and Eng.*, 83:1273–1311, 2010.
- [5] G. Molnàr and A. Gravouil. 2d and 3d abaqus implementation of a robust staggered phase-field solution for modeling brittle fracture. *Finite Elements in Analysis and Design*, 130:27 – 38, 2017.
- [6] H. Moulinec and P. Suquet. A numerical method for computing the overall response of nonlinear composites with complex microstructure. *Computer Methods In Applied Mechanics and Engineering*, 157(1-2):69–94, April 1998.
- [7] A. Vattré, B. Devincre, F. Feyel, R. Gatti, S. Groh, O. Jamond, and A. Roos. Modelling crystal plasticity by 3d dislocation dynamics and the finite element method: The discrete-continuous model revisited. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 63:491 – 505, 2014.