

CAHIER TECHNIQUE

Des supercalculateurs pour optimiser la matière

» RÉALISÉ PAR



» **SAMUEL FOREST**

DIRECTEUR DE RECHERCHES
AU CNRS, CHERCHEUR
AU CENTRE DES MATÉRIAUX
DE MINES PARISTECH

Il étudie le comportement mécanique non linéaire des matériaux dans l'énergie et les transports et anime la fédération francilienne de mécanique, matériaux, structures et procédés.

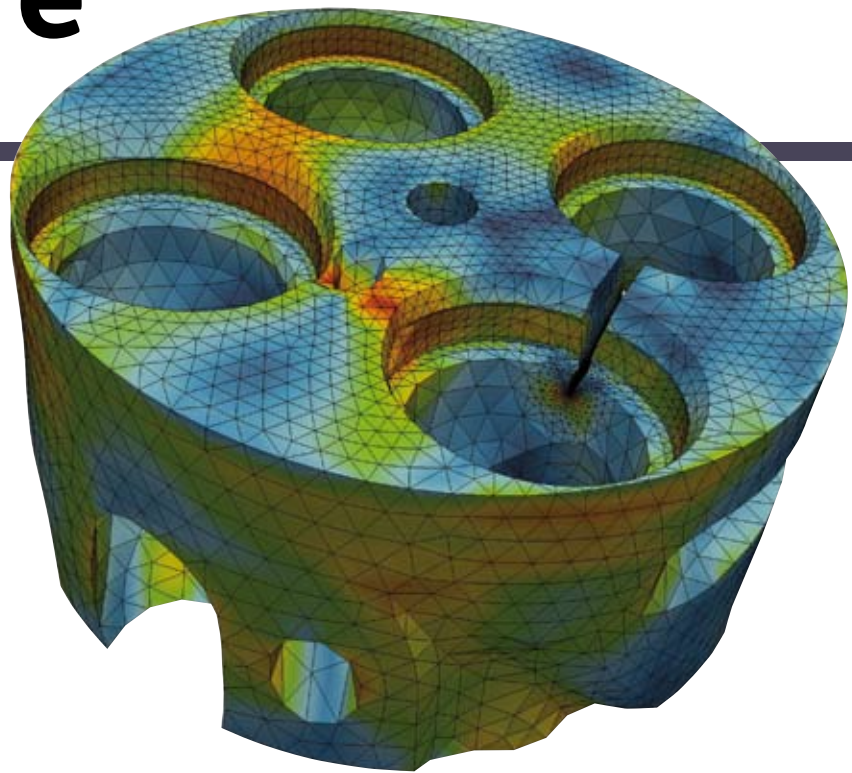


» **GEORGES CAILLETAUD ET DAVID RYCKELYNCK**

PROFESSEURS ET CHERCHEURS
AU CENTRE DES MATÉRIAUX
DE MINES PARISTECH

Respectivement : l'un modélise le comportement mécanique et la rupture des matériaux et l'autre développe des méthodes numériques de réduction de modèle.

Avec la participation de Nikolay Osipov, docteur-ingénieur au Centre des matériaux de Mines ParisTech



Les possibilités offertes par le calcul intensif bénéficient aux ingénieurs qui ont à concevoir des structures critiques du point de vue des performances et de la sécurité, ainsi qu'aux chercheurs qui veulent développer des matériaux dont ils contrôlent à la demande les propriétés physiques.

Les chemins des deux communautés se rejoignent dans la mesure où les progrès réalisés permettent une meilleure maîtrise des matériaux et des structures, ouvrant la route à la certification numérique des composants. Cette approche ira en se renforçant. D'autant que l'augmentation incessante de la performance des supercalculateurs permet la mise en place de nouvelles approches mathématiques. Celles-ci vont changer la manière d'aborder les problématiques de conception et de prise de décision. »



Le calcul intensif au service de la mécanique

Les progrès des super-calculateurs en termes de performances et de capacité de traitement de gros modèles numériques permettent d'utiliser le calcul intensif pour optimiser à la fois la géométrie des pièces et la nature de la matière qui les constitue. Une approche au service des ingénieurs pour créer des produits plus performants.

Prédire la durée de vie de pièces soumises à des conditions sévères d'utilisation requiert des modèles numériques non linéaires capables de représenter de manière suffisamment précise les phénomènes complexes mis en jeu (irréversibilité de la déformation, endommagement local et fissuration, vieillissement et transformations microstructurales) en présence des agressions externes (fortes contraintes mécaniques, grandes déformations, très hautes températures, environnement corrosif...). Grâce à l'amélioration des moyens d'observation et d'expérimentation physique en mécanique des matériaux, les modèles disponibles sont de plus en plus per-

formants. Toutefois, ce développement s'accompagne d'une augmentation du nombre de variables critiques, donc du nombre d'équations à résoudre, et d'une forte croissance du nombre de paramètres physiques à recaler sur les expériences.

Nous montrerons de quelle façon il est possible de faire face à des demandes de plus en plus complexes dans le cas de la simulation des pièces chaudes des moteurs aéronautiques, ou comment le calcul à l'échelle du millimètre ou du micromètre permet la maîtrise des propriétés de certains matériaux, dits « architecturés », au moyen du calcul explicite de leur microstructure.

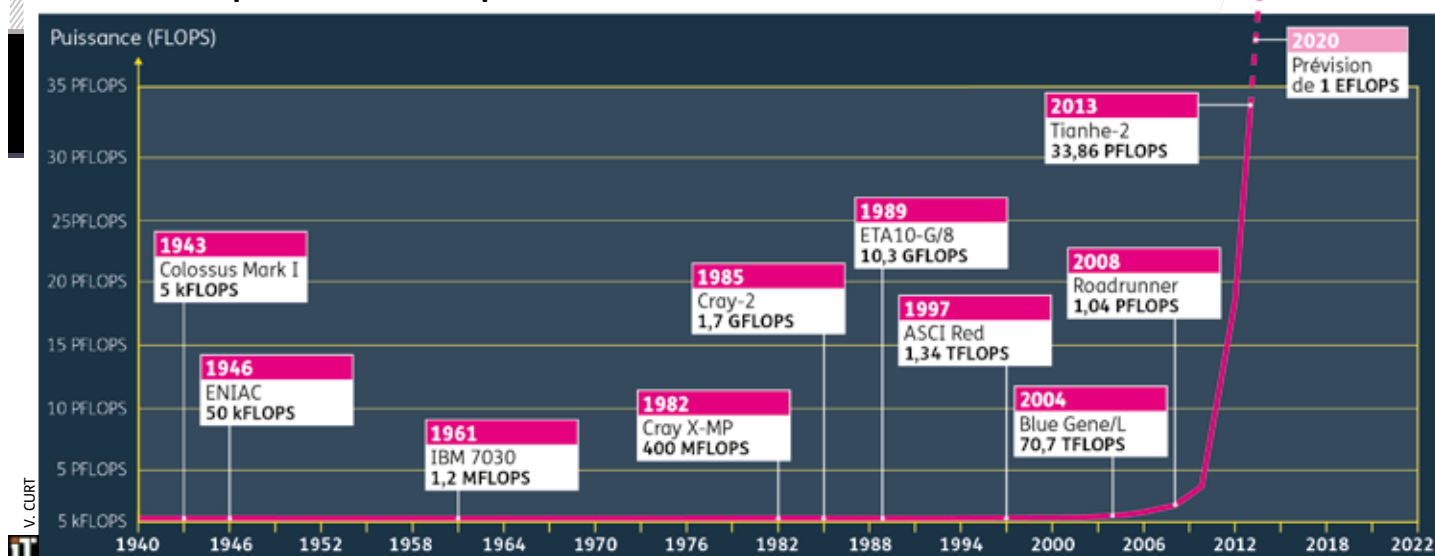
Pour ces deux types d'approches, on fait désormais appel de façon systématique au calcul parallèle. L'utilisation de plus de ressources de calcul a donc la faveur de ceux qui veulent poursuivre leurs efforts de compréhension (Fig. 1). Cette fuite en avant vers une plus grande mobilisation des ressources n'est cependant pas la seule voie possible. On peut améliorer les prévisions en économisant les calculs, sans pour autant exploiter des modèles simplistes.

1. PROBLÉMATIQUE INDUSTRIELLE

Des aubes de turbines aéronautiques aux culasses automobiles

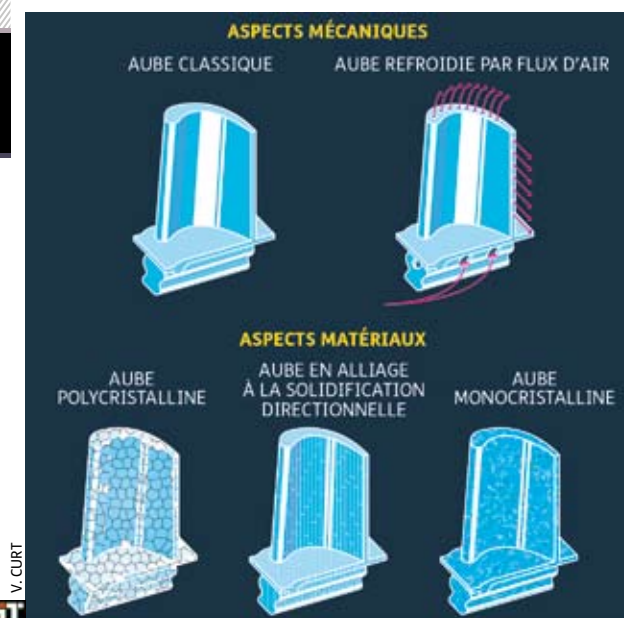
Le rendement et les performances d'un moteur aéronautique dépendent étroitement des aubes des turbines de l'étage hautes températures. Après des dizaines d'années de progrès qui ont permis d'améliorer la thermique, la

Fig. 1 Évolution de la performance des super-calculateurs



La puissance des plus gros super-calculateurs connaît une croissance exponentielle depuis de nombreuses années. La barre des machines exaflopiques (1 trillion d'opérations par seconde), actuellement en cours de développement, devrait être franchie en 2020.

Fig. 2 Évolution des aubes de turbines



Après s'être intéressés à la géométrie des aubes, puis à des aménagements pour diminuer leur température (aspects mécaniques), les ingénieurs ont travaillé sur la nature de leur structure cristalline pour en améliorer la résistance (aspects matériaux). Une évolution qui doit beaucoup aux possibilités du calcul intensif.

mécanique des fluides et des solides, et les matériaux, ces pièces sont toujours l'objet d'une attention toute particulière. Les modèles numériques, de plus en plus précis grâce à la progression constante de la puissance de calcul, jouent un rôle majeur dans leur optimisation.

Les aubes de l'étage haute pression des turbines aéronautiques supportent à la fois un flux de gaz à plus de 1 500 °C et les efforts dus à la force centrifuge. Le métal y monte à plus de 1 000 °C. Les développements successifs ont permis d'abord d'améliorer le refroidissement, grâce à un flux de gaz interne à l'aube, qui ressort par un réseau de trous au niveau des extrémités de l'aube. Un autre élément décisif est le matériau lui-même. Les métallurgistes ont montré que les points faibles des traditionnels alliages de nickel, comportant quelques milliers de grains pour 1 mm³, sont les joints entre eux-ci.

Les aubes les plus chargées des réacteurs modernes utilisent donc des alliages à « solidification dirigée » (dits DS), qui ont une structure colonnaire (tous les grains ayant en commun un axe cristallographique confondu avec l'axe de l'aube, ce qui supprime les joints les plus vulnérables à la force centrifuge), voire des monocristaux : dans ce dernier cas, la pièce entière est constituée par un seul grain! (Fig. 2) Des revêtements protecteurs viennent compléter la liste des moyens mis en œuvre pour améliorer la tenue du système, qui est donc d'une extrême complexité.

Des modèles numériques spécifiques ont été développés pour représenter le comportement non linéaire très « typé » des matériaux « DS » et monocristallins, grâce à la

» CE QU'IL FAUT RETENIR

- Le calcul intensif permet de comprendre la réponse mécanique des matériaux et structures selon la distribution et le comportement individuel des constituants, grâce à des simulations numériques détaillées.
- En mécanique non linéaire des matériaux, réduction de modèles et calcul haute performance constituent deux approches complémentaires.
- Ces deux approches offrent de nouvelles possibilités de comprendre les modèles et l'effet de leurs paramètres.

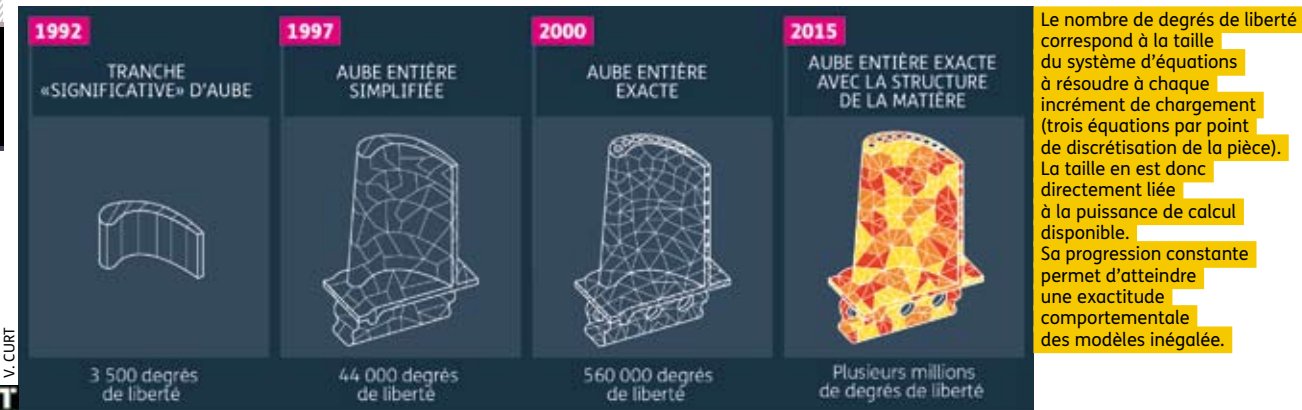
méthode des éléments finis. Ces modèles sont très gourmands en temps de calcul. Le processus de conception des aubes, qui nécessite la mise en place d'une boucle d'optimisation « multiphysique » enchaînant des calculs de thermique, de mécanique des fluides et de mécanique des solides, s'en trouve donc considérablement alourdi. Les dernières années du XX^e siècle ont été déterminantes dans ce domaine. En 1992, il fallait se restreindre à une « tranche » de l'aube, avec l'espoir que l'intuition de l'ingénieur allait lui permettre de choisir la coupe la plus critique! En 1997, une première génération de calculateurs parallèles a permis de passer à une aube complète, mais sans prendre en compte les détails géométriques. C'est en 2000 que, grâce à la génération suivante de calculateurs, le modèle numérique est devenu plus représentatif, incluant en particulier les trous de refroidissement.

Quinze ans après, les puissances de calcul sont désormais suffisantes pour effectuer des simulations comportant plusieurs millions de points de discrétisation (Fig. 3). À ce stade, les simulations numériques commencent à prendre le pas sur les essais. Certes, ceux-ci ne sont pas en voie de disparition, car ils sont totalement indispensables pour qualifier la méthode numérique. Cependant, une fois que celle-ci est en place, elle permet d'examiner facilement des dizaines de situations diverses, ce qui est matériellement impossible avec les seuls moyens expérimentaux.

Pour ce qui concerne les pièces monocristallines, une fois qu'elles ont été certifiées dans leur configuration « idéale » (un axe cristallographique confondu avec l'axe de l'aube), il importe de se soucier de la tenue de celles qui auraient un défaut. Trancher est facile pour les valeurs extrêmes. Ainsi, une désorientation d'un degré ne semble pas problématique, et, à l'inverse, une désorientation de trente degrés ne serait certainement pas acceptable. Mais où situer la frontière entre la pièce acceptable et celle qui va au rebut? Par ailleurs, est-il acceptable ou non de tolérer la présence d'un petit grain parasite? Toujours, jamais, en certaines zones seulement? Toutes ces configurations doivent donner lieu à des simulations approfondies, car il est hors de question de sacrifier la sécurité.

Le problème est sans doute encore plus crucial pour les alliages à solidification directionnelle. Toutes les aubes sont en effet différentes. Elles sont constituées d'un nom-

Fig. 3
Évolution de la taille des simulations numériques



bre relativement restreint de grains colonnaires, dont la longueur vaut plusieurs centimètres, et le diamètre en général un peu inférieur au millimètre. Cela conduit à une ou quelques centaines de grains seulement sur l'ensemble de l'aube. En certains endroits, la paroi est tellement mince qu'elle ne comporte qu'un seul grain, traversant. Il est impossible dans ces conditions de tester au moyen d'essais de laboratoire toutes les configurations possibles. En revanche, une recherche de ce type peut être effectuée par

le calcul. Le problème peut être illustré sur un spécimen de laboratoire (Fig. 4), en forme de croix, que l'on suppose constitué de 90 grains colonnaires, et qui est destiné à la réalisation d'essais biaxiaux. En raison de la forte hétérogénéité de contrainte, la contrainte maximale atteinte peut dépasser de 20 % celle qui serait observée dans le calcul « homogène » classique. Cet écart peut avoir un effet considérable (plus qu'un facteur 10) sur la durée de vie prévue pour la pièce.

Dans le domaine automobile, chez Renault le calcul intensif permet par exemple la prévision des contraintes résiduelles dans une culasse de moteur thermique à l'aide d'un calcul parallèle thermomécanique élasto-viscoplastique. En accédant à l'information sur l'état de contrainte et de déformation plastique de la pièce lorsque son refroidissement est terminé, les ingénieurs peuvent optimiser la géométrie de la culasse (Fig. 5).

Le processus de « downsizing » des moteurs (réduction de la cylindrée) conduit à des élévations de leur température de fonctionnement. Les cycles thermiques sévères appliqués aux culasses génèrent un champ de déformation plastique qui peut conduire à l'amorçage de fissures. Aujourd'hui, nous disposons d'outils de modélisation robustes, permettant de prévoir l'apparition de fissures, leur chemin de propagation et leur arrêt éventuel, en présence de chargements thermomécaniques cycliques. Ils sont utilisés au stade de la conception industrielle.

2. DU MATÉRIAU VIRTUEL À LA MATIÈRE

Combiner mathématique et science des matériaux

L'étape de la conception est aussi celle du choix du matériau et de sa structure. La connaissance fine des matériaux permet concevoir des architectures nouvelles de la matière, inspirées des microstructures existantes et de modèles morphologiques mathématiques. Nous illustrons

ici cette stratégie de conception de matériaux virtuels à l'aide d'exemples variés. Ils concernent trois domaines: la mécanique des crèmes glacées, celle des mousses métalliques pour le stockage d'énergie et les méta-matériaux dits auxétiques, aux propriétés inédites.

A. La mécanique des crèmes glacées

L'industrie agroalimentaire représente un nouveau terrain d'application de la mécanique des matériaux. Les propriétés sensorielles de consistance et de texture des aliments s'interprètent en termes de propriétés mécaniques telles que l'élasticité, la viscosité et la ductilité des matériaux constitutifs. Une large gamme de propriétés sensorielles peut être obtenue en mélangeant les cristaux de glace durs et rigides avec la crème élasto-visco-plastique dans le cas des crèmes glacées. Les industriels jouent avec ce fort contraste de propriétés comme l'illustrent deux microstructures très différentes (Fig. 6), l'une contenant de la glace dont les cristaux morcelés sont organisés en un réseau percolant (interconnecté), l'autre des cristaux arrondis baignant dans une matrice de crème. L'analyse mécanique réalisée à partir de ces images met en évidence la plus grande souplesse de la seconde microstructure. À nouveau, le calcul par éléments finis à grand nombre de degrés de liberté est mis à contribution pour évaluer la réponse mécanique globale d'une lamelle de crème glacée, mais aussi les champs locaux de déformation, particulièrement intenses au sein de la phase crème. Ces propriétés élastiques sont confirmées expérimentalement par des essais de flexion à trois points sur des barreaux de crème glacée testés à -18 °C.

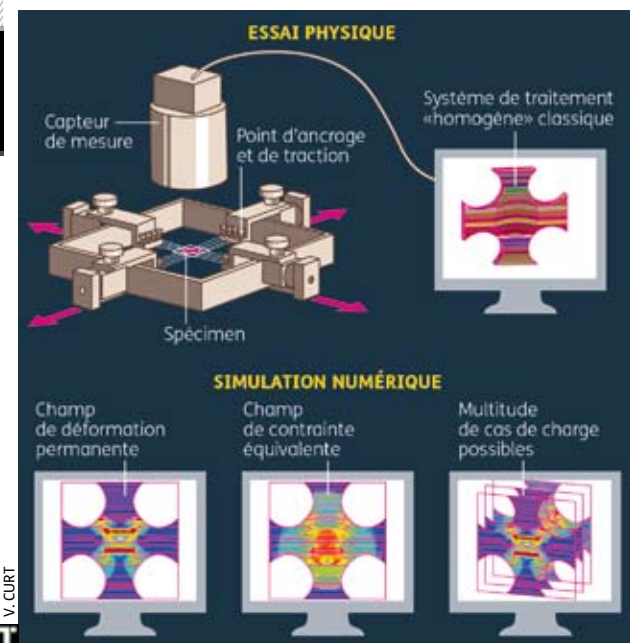
B. La mécanique des mousses de métal

Les mousses de métal ont une morphologie proche de celles des mousses de savon ou de bière. Elles résultent de la solidification d'une écume de métal liquide, ou bien s'obtiennent par dépôt électrolytique de métal sur un précurseur en mousse de polyuréthane (Fig. 7). Celles obtenues par cette dernière technique sont largement utilisées dans les batteries NiMH des téléphones portables et d'ordinateurs comme conteneur de la pâte électrolyte et collecteur de courant. Les cellules de la mousse sont ouvertes et les brins sont creux, comme le montre l'imagerie tridimensionnelle par micro-tomographie aux rayons X appliquée à la mousse réalisée au synchrotron ESRF à Grenoble. La résistance mécanique de ce matériau joue un rôle crucial sur les propriétés de la batterie. Les brins rompus lors de l'écrasement et de l'enroulement de la mousse nécessaires à la réalisation de la pile conduisent à une réduction de sa performance. La résistance mécanique peut être estimée grâce au calcul intensif sur les maillages par éléments finis construits à partir des images de micro-tomographie. La finesse des maillages requise conduit à la résolution numérique d'un système à près de quinze millions d'inconnues. La décomposition en une douzaine de sous-domaines permet de distribuer la tâche sur plusieurs processeurs d'une machine parallèle. Ce type de calcul est aujourd'hui réalisable en contexte industriel.

C. La mécanique des auxétiques

La connaissance acquise en explorant la réponse mécanique de matériaux hétérogènes très variés de l'industrie, à partir de leur microstructure tridimensionnelle, permet de passer à l'étape de conception de morphologies optimales pour des propriétés cibles. De tels matériaux composites sont dits architecturés, car la géométrie et le choix des matériaux sont choisis en fonction des objectifs multifonctionnels visés (mécanique, thermique, électrique, sensoriel, etc.). Dans ce cas, les microstructures périodiques sont plus faciles à concevoir, puisque le problème se réduit alors au choix d'une cellule de base qu'il s'agira de répliquer. Les structures en nids d'abeilles représentent une architecture bien connue dans de nombreuses réalisations techniques alliant légèreté, rigidité et résistance au flambage. Elles servent de base à l'invention d'architectures plus savantes telles que celles des matériaux dits auxétiques, littéralement « qui s'étendent » (Fig. 8). Contrairement aux matériaux courants, les auxétiques se dilatent latéralement quand on les étire longitudinalement et, au contraire, la compression longitudinale entraîne un rétrécissement latéral. Cette propriété remarquable résulte de la structure dite hexachirale, c'est-à-dire caractérisée par une symétrie hexagonale (comme les nids

Fig. 4
Spécimen cruciforme sollicité en traction biaxiale



La réaction d'un spécimen cruciforme sollicité en traction peut être mesurée par des capteurs (en haut) ou simulée numériquement. Les simulations numériques donnent aujourd'hui des résultats beaucoup plus précis, surtout dans les cas très hétérogènes, que les essais physiques, avec une rapidité sans égale.

Fig. 5
Contraintes résiduelles dans une culasse de moteur diesel

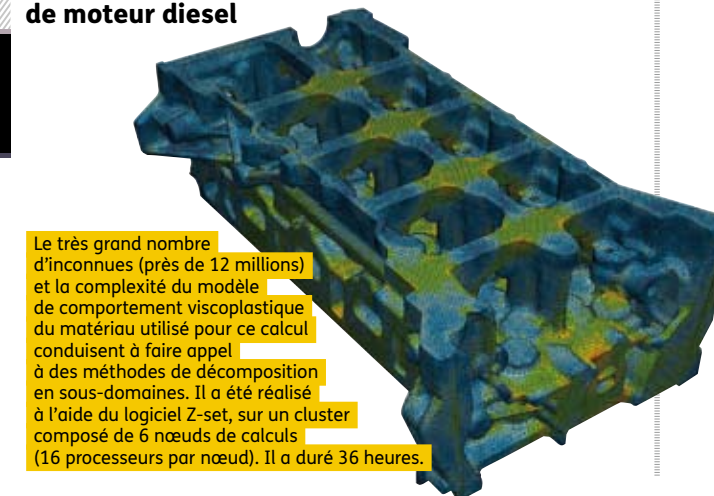
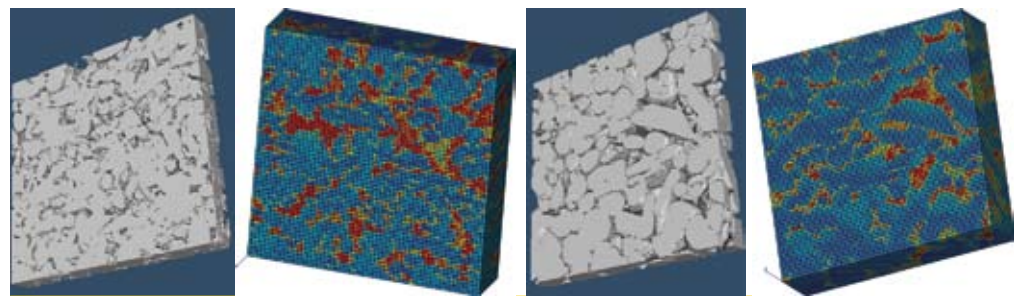




Fig. 6
La mécanique des crèmes glacées



Vues en microscopie optique confocale de deux microstructures tridimensionnelles de crèmes glacées obtenues par des procédés différents. Sur le calcul par éléments finis de la compression d'une lamelle de crème (à droite), la couleur rouge indique les zones subissant des grandes déformations. L'épaisseur réelle des lamelles est de 0,3 mm. (thèse T. Kanit)

d'abeilles) et le mécanisme d'enroulement des poutres autour de nœuds cylindriques dans un sens fixé par l'architecture. Le prototypage rapide et la fabrication additive permettent aujourd'hui de tester rapidement la pertinence des architectures de matériaux conçus sur ordinateur grâce au calcul intensif.

3. LE RÔLE DU CALCUL INTENSIF

Démultiplier les prévisions

En mécanique non linéaire des matériaux, la réduction de modèles et le calcul haute performance constituent deux approches complémentaires et nécessaires. Les travaux récents en réduction de modèles non linéaires ont montré que les modèles simplifiés étaient obtenus en ayant recours à un échantillonnage des prévisions possibles des modèles, au travers par exemple de la méthode de décomposition orthogonale aux valeurs propres. Or cet échantillonnage ne peut se faire de façon sérieuse qu'en ayant recours au calcul haute performance, afin de réaliser un nombre suffisant d'échantillons de prévisions possibles. Donc, le calcul haute performance est amené à se développer dans le cadre de la réduction des modèles non linéaires.

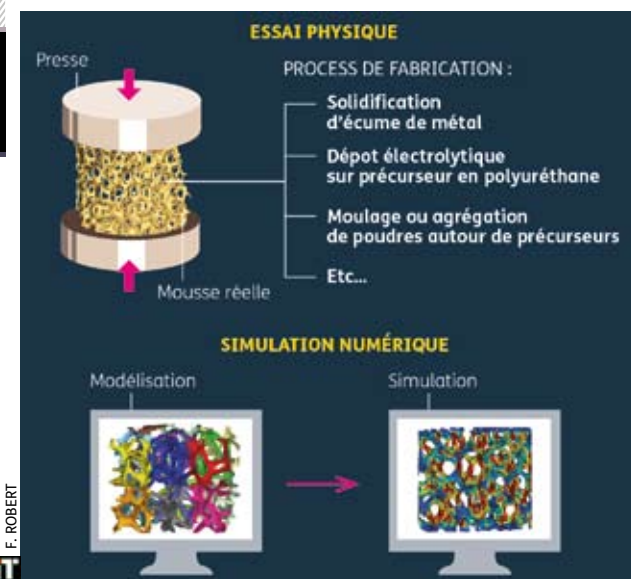
La réduction de modèles non linéaires en mécanique des matériaux consiste à voir les résultats de simulations comme des données dont on peut extraire des bases réduites. Ainsi, certains calculs permettent de réduire les modèles pour réaliser les simulations restant à faire.

Une avancée majeure a été obtenue dans ce domaine en étendant le traitement de données incomplètes par la méthode dite Gappy POD (voir vocabulaire professionnel) à l'hyper-réduction de modèles élastoplastiques. Initialement proposée pour reconstruire des images masquées ou ayant des pixels manquants, la Gappy POD a été par la suite utilisée pour réduire des maillages en soustrayant délibérément des éléments. En pratique cela permet de réduire encore plus les modèles en simplifiant le domaine à mailler pour traiter les équations de bilan mécanique.

Parcimonieux ou peu coûteux, cet échantillonnage lors de la construction des bases réduites permet d'envisager, grâce au calcul intensif, l'association de méthodes de décomposition tensorielle pour les prévisions mécaniques. Nous poussons plus loin l'analyse des résultats de calcul en les considérant comme des données à traiter avec des méthodes récentes d'analyse de gros volumes de données.

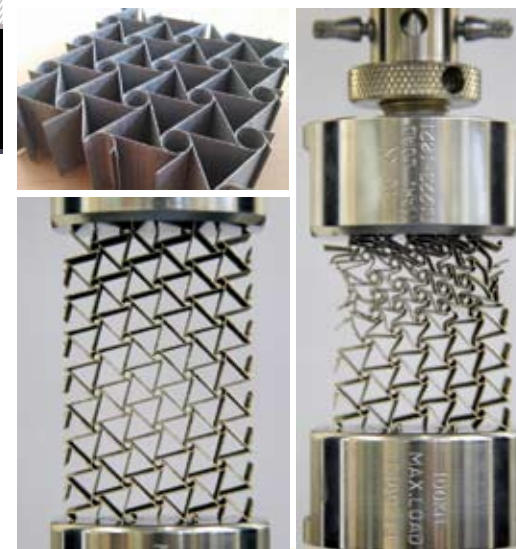
C'est un nouveau paradigme pour la simulation numérique. L'approche retenue jusque-là a, en effet, plutôt consisté à profiter du calcul intensif pour arriver au même résultat à moindre frais et en limitant le volume de données à stocker. La démarche consistant à réaliser davantage de calculs, en revanche, n'avait pour l'instant pas été retenue. Elle est sur le point de se développer, car

Fig. 7
La mécanique des mousses de métal



Le calcul de compression de la mousse impliquant la déformation plastique des brins de métal a nécessité 15 heures de calculs, sur une machine disposant de 12 processeurs ayant 8 Go de RAM chacun. (thèse T. Kanit)

Fig. 8
La mécanique des matériaux auxétiques



Le matériau à structure périodique dite hexachirale (en haut à gauche, largeur 100 mm) est soumis à un essai de compression simple conduisant à un écrasement avec enroulement des motifs de la microstructure. (thèse J. Dirrenberger)

aujourd'hui on a la possibilité de faire de nombreux calculs, on a les moyens de stocker de façon compressée de gros volumes de données et on commence à développer des moyens de factoriser ce qu'il y a de commun entre différentes prévisions mécaniques.

Il s'agit d'une compréhension nouvelle des méthodes de réduction de modèle, en y associant les méthodes de décomposition de tenseurs d'ordre élevé. Qu'est-ce qu'un tenseur ? Un tenseur d'ordre 1 a une représentation numérique sous la forme d'une colonne de valeurs numériques à plusieurs lignes. Un tenseur d'ordre 2 peut être représenté par un tableau de valeurs ou une matrice, à plusieurs lignes et plusieurs colonnes. Un tenseur d'ordre 3 peut être imaginé comme un cube en ajoutant une dimension supplémentaire à la matrice. Pour les tenseurs d'ordre supérieur à trois, il est très difficile de s'en faire une représentation géométrique. D'ailleurs, la majorité des méthodes numériques ne dépasse pas la vision matricielle des données. Il y a donc beaucoup à faire pour développer ces approches. On peut envisager qu'elles deviennent vraiment opérationnelles dans quelques années.

Les conséquences sont connues pour le traitement de certains problèmes simples, faiblement non linéaires comme l'ont montré les travaux récents de l'institut de recherche en génie civil et mécanique Gem, rattaché à l'École centrale de Nantes. Ces conséquences seront un changement radical dans la façon de prendre des décisions. Si l'on peut stocker en mémoire un très grand nombre de prévisions que l'on a pu réaliser à un prix raisonnable, alors la lecture en temps réel de ces prévisions change la façon d'étudier des hypothèses, de tester des variations de paramètres et de décider. >>>

D.R.

MESURE DE PUISSANCE ET D'ÉNERGIE



WE INNOVATE!

La solution simple et intégrée

- Mesure non intrusive, grâce aux baucles de Rogowski
- Centrale de mesure intégrée avec les barres de mesure de puissance
- Analyse complète, jusqu'au 41^e harmonique
- Configuration et visualisation par serveur web



POUR ALLER PLUS LOIN

Bibliographie Une référence sur l'endommagement des structures

Le livre *Mécanique non linéaire des matériaux*,

paru aux Éditions Hermès, dont les auteurs Jacques Besson, Georges Cailletaud,

Jean-Louis Chaboche et Samuel Forest appartiennent au Centre des matériaux de Mines ParisTech et à l'Office national d'études et recherches aérospatiales (Onera), est un ouvrage de référence qui propose une mise à jour des connaissances requises pour comprendre et utiliser les modélisations les plus récentes du comportement et de l'endommagement des matériaux dans les structures. Après un exposé sur les outils numériques et la visco-plasticité classique, il donne successivement une description de la mécanique de l'endommagement, de la mécanique des matériaux hétérogènes, des transformations finies, du calcul de structures en non linéaire, et des phénomènes de localisation de la déformation, en cherchant l'équilibre entre énoncés théoriques et modèles de matériaux réels. ✕



Web Illustration par l'exemple

Le site Internet de présentation du logiciel Z-set,



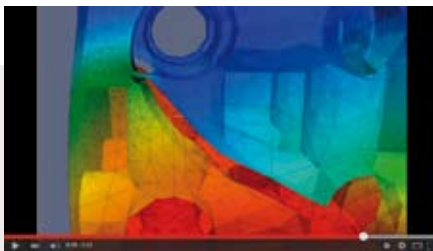
fruit de trente ans de collaboration étroite entre Mines ParisTech, l'Onera puis de l'éditeur américain NW Numerics & Modeling, illustre parfaitement le propos de ce cahier technique en présentant de nombreuses applications à la fois dans le domaine de l'étude des structures et celle des matériaux qui les composent.

Les exemples présentés permettent de mieux appréhender l'apport du calcul intensif pour comprendre l'interdépendance qui existe entre la géométrie de la pièce et la structure cristalline de la matière. ✕

IT WEB Vidéo

Recherche de fissure

Suivez la simulation numérique de la propagation d'une fissure dans un bloc foré.



Fissure

industrie-techno.com

Vocabulaire professionnel

➤ MATÉRIAU ARCHITECTURÉ

Matériau composite ou poreux dont la géométrie des constituants internes a été optimisée pour obtenir des propriétés macroscopiques physiques et mécaniques particulières. Exemple: les sandwichs à cœur en nid-d'abeilles en aluminium, utilisés dans l'aéronautique.

➤ **MÉTAMATÉRIAU** Matériau architecturé dont les propriétés effectives sont surprenantes. Exemple: un composite dont la masse dynamique et le module de Young apparent sont négatifs!

➤ **MATÉRIAU AUXÉTIQUE** Matériau architecturé qui se dilate aussi latéralement quand on l'allonge. Une propriété due à la conception de sa structure géométrique interne, qui permet un déroulement pré-programmé des cellules géométriques qui le composent.

➤ **MÉTHODE GAPPY POD** Développée pour isoler et caractériser des structures cohérentes dans des écoulements instationnaires, la méthode mathématique de Décomposition orthogonale aux valeurs propres (POD) est aujourd'hui étendue aux données incomplètes (Gappy-POD).

➤ **HYPER-RÉDUCTION DES MODÈLES** Méthode adaptative mathématique de réduction de modèles non linéaires avec construction automatique d'un domaine d'intégration réduite. L'adaptation du modèle d'ordre réduit permet de commencer une étude en base réduite sans effectuer une simulation numérique préalable sur un problème similaire au problème à traiter.