
Calcul scientifique

Jocelyne Erhel - projet ALADIN -
INRIA-RENNES

- Arithmétique flottante
- Résolution d'équations différentielles
- Résolution d'équations aux dérivées partielles
- Simulation de l'endommagement d'un matériau composite

Cours en mécanique - Novembre-Décembre 2001

Simulation de l'endommagement de composites

Travail de thèse de Mathias Brieu
thèse soutenance en janvier 1999 à l'ENS-Cachan
co-encadrement de F. Devries (LM2S, université de Paris 6)
et de J. Erhel (INRIA/IRISA - Rennes)
Mathias Brieu est Maître de Conférences à l'université de Lille

Utilisation de composites dans les transports



Industrie ferroviaire



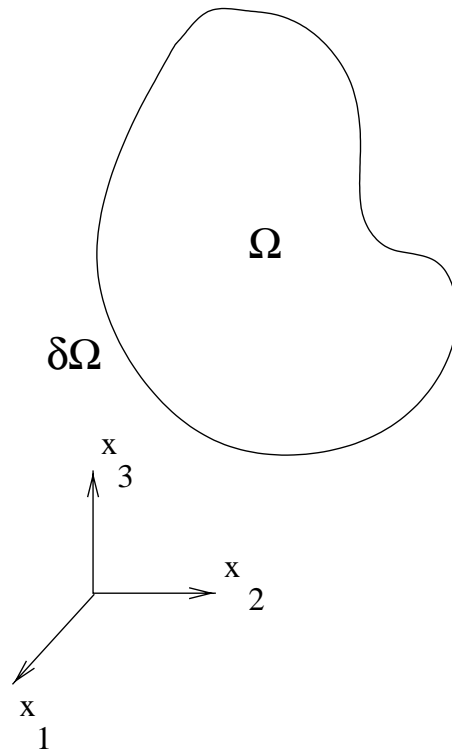
Industrie aéronautique



Industrie spatiale

Simulation du comportement

Problème hétérogène

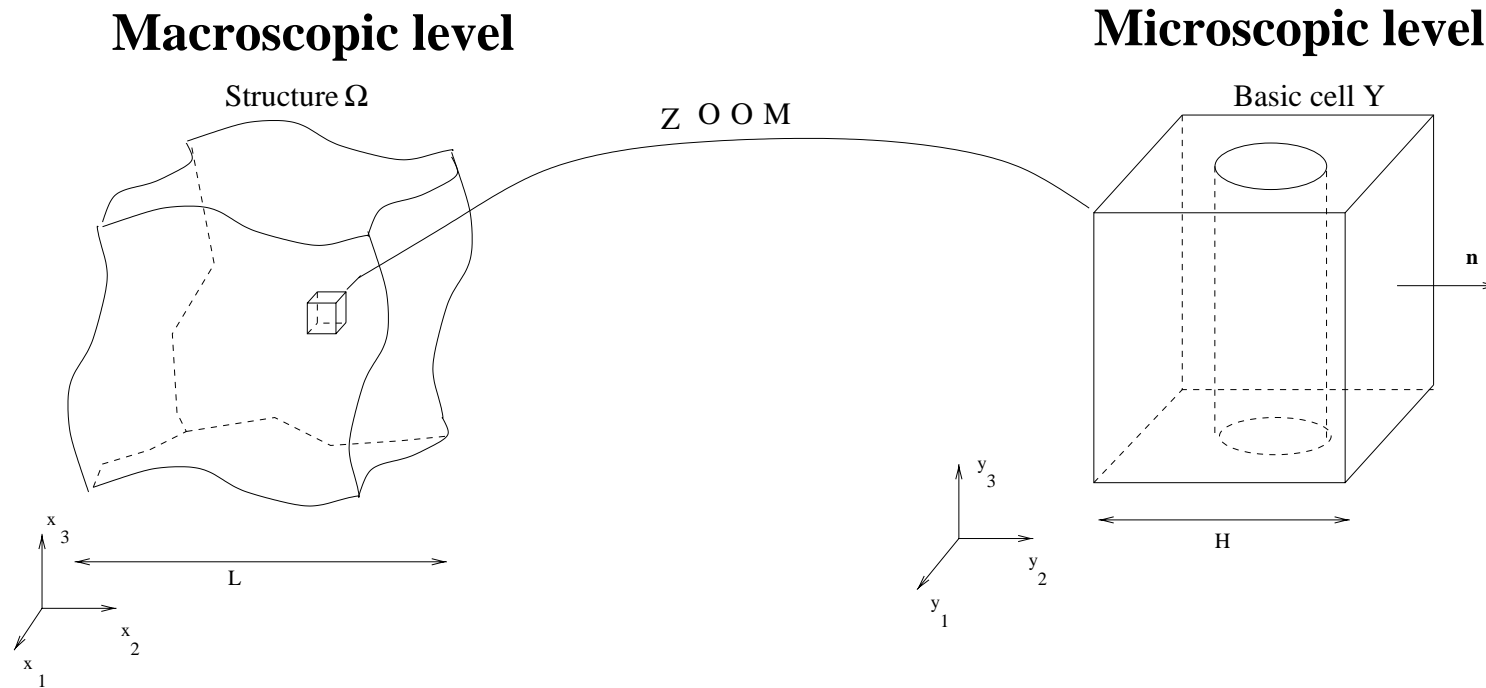


$$\begin{cases} ?? (\mathbf{T}^\varepsilon, U^\varepsilon) / \\ \operatorname{div}_x \mathbf{T}^\varepsilon = \mathbf{0} & \text{in } \Omega \\ \mathbf{T}^\varepsilon = \frac{\partial e^\varepsilon}{\partial \mathbf{F}^\varepsilon}(\mathbf{x}, \mathbf{F}^\varepsilon) & \text{dans } \Omega \\ \mathbf{F}^\varepsilon = \mathbf{1} + \nabla_x U^\varepsilon & \text{dans } \Omega \\ \text{conditions aux limites} & \text{sur } \partial\Omega \end{cases}$$

Avec $\varepsilon \ll 1$

Méthode d'Éléments Finis \Rightarrow Très grand système d'équations

Modélisation



Hypothèse 1 : Ω est Y périodique

$$\text{Hypothèse 2 : } \varepsilon = \frac{H}{L} \ll 1$$

Méthode d'homogénéisation

Développement asymptotique

$$\mathbf{U}^\varepsilon(x) = \mathbf{U}(x) + \varepsilon \mathbf{u}(x,y) + O(\varepsilon)$$

$\mathbf{U}(x)$ champ de déplacement macroscopique

$$y = \frac{x}{\varepsilon}$$

$\mathbf{u}(x,y)$ champ de déplacement microscopique

Lois de comportement

Densité d'énergie microscopique fixée par le matériau

Densité d'énergie macroscopique définie implicitement par des

Relations de moyenne entre les deux champs

Méthode d'homogénéisation

- Problème macroscopique

$$\begin{cases}
 \text{?? } (\mathbf{T}, \mathbf{U}) / \\
 \left\{ \begin{array}{ll}
 \operatorname{div}_x \mathbf{T} = \mathbf{0} & \text{dans } \Omega \\
 \mathbf{T} = \frac{\partial E}{\partial \mathbf{F}}(\mathbf{x}, \mathbf{F}) & \text{dans } \Omega \\
 \mathbf{F} = \mathbf{1} + \nabla_x \mathbf{U} & \text{dans } \Omega \\
 \text{conditions aux limites} & \text{sur } \partial\Omega
 \end{array} \right.
 \end{cases}$$

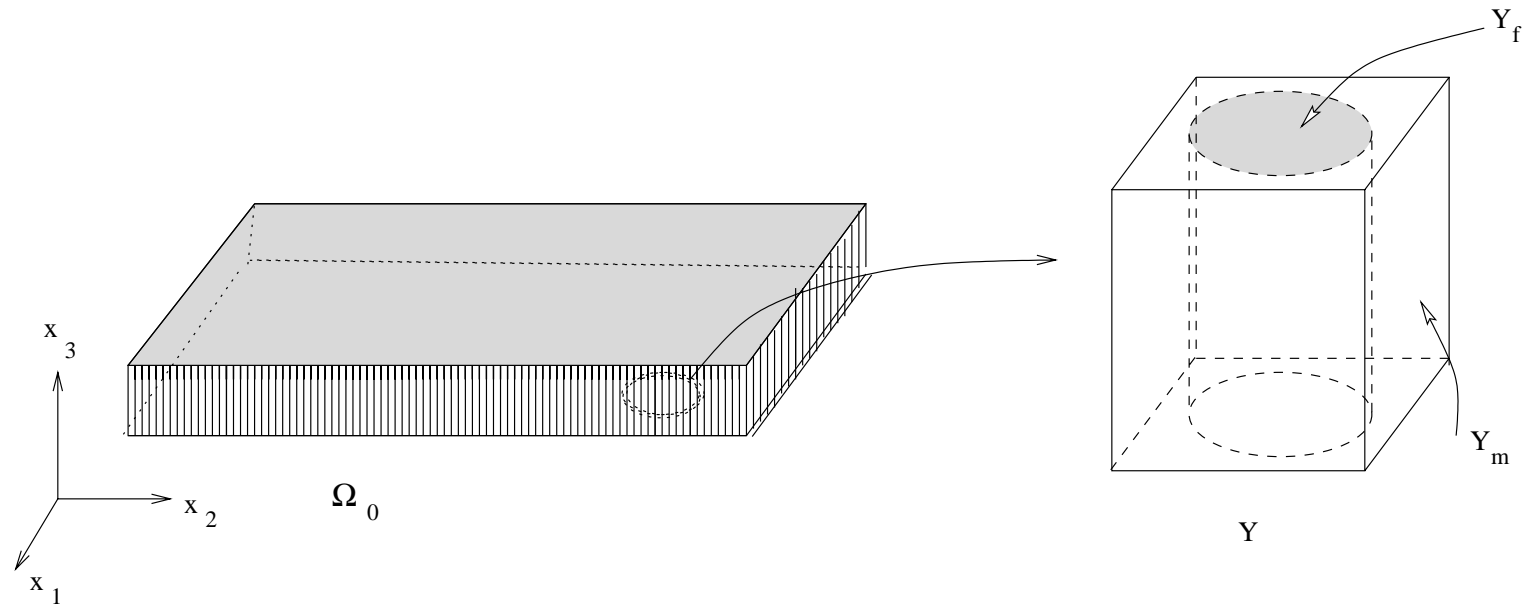
- Problème microscopique

$$\begin{cases}
 \text{?? } (\boldsymbol{\tau}, \mathbf{u}) / \\
 \left\{ \begin{array}{ll}
 \operatorname{div}_y \boldsymbol{\tau} = \mathbf{0} & \text{dans } Y \\
 \boldsymbol{\tau} = \frac{\partial e}{\partial \mathbf{f}}(\mathbf{y}, \mathbf{f}) & \text{dans } Y \\
 \mathbf{f} = \mathbf{F} + \nabla_y \mathbf{u} & \text{dans } Y \\
 \mathbf{u} & Y \text{ périodique} \\
 \boldsymbol{\tau}(\mathbf{n}) & Y \text{ anti-périodique}
 \end{array} \right.
 \end{cases}$$

- Relations de moyenne *définition implicite de E*

$$\begin{cases}
 \mathbf{F} = \langle \mathbf{f} \rangle_Y \\
 \mathbf{T} = \langle \boldsymbol{\tau} \rangle_Y
 \end{cases} \quad \forall g, \quad \langle g \rangle_Y = \frac{1}{|Y|} \int_Y g dy$$

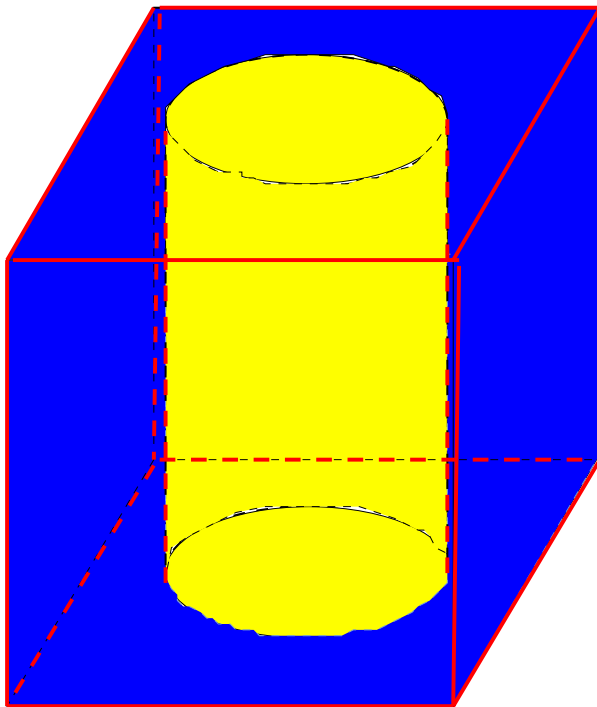
Exemple : composite unidirectionnel



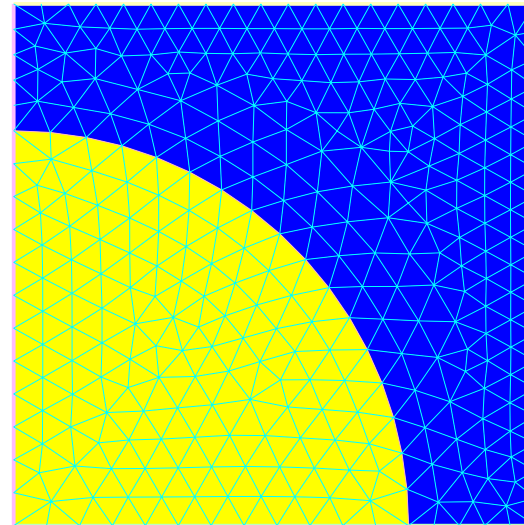
Exemple : composite unidirectionnel - une cellule

Fibres infiniment longues \Rightarrow problème 2D

Matériau isotrope et symétries \Rightarrow quart du plan

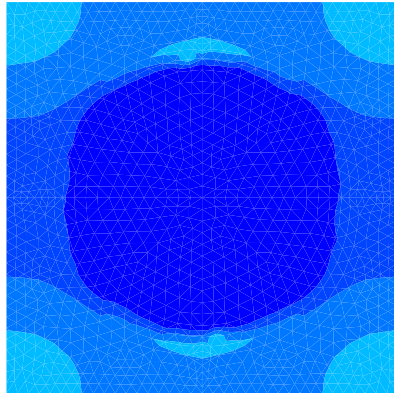


Basic cell Y

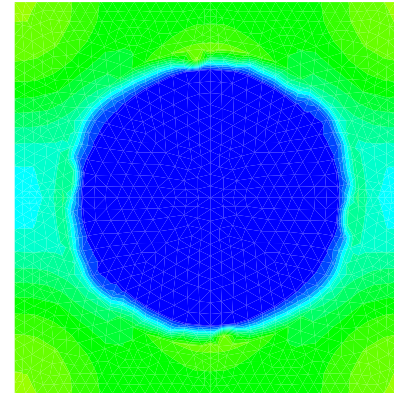


Distribution des contraintes

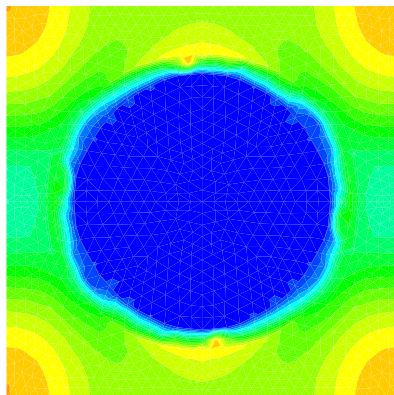
Traction uniaxiale perpendiculaire aux fibres



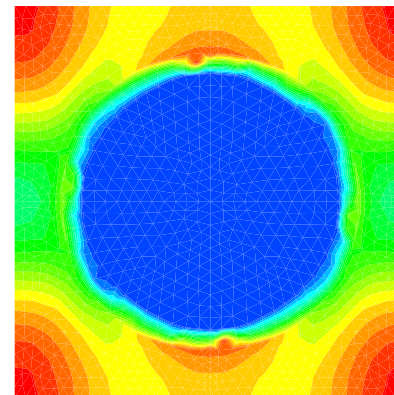
10 %



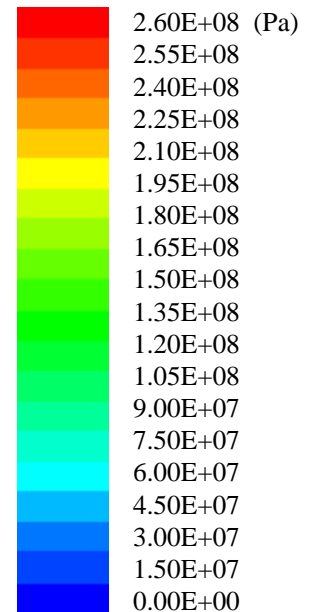
20 %



30 %



40 %



Méthode de résolution

Discrétisation par méthode d'éléments finis

Systeme d'équations non linéaires de très grande taille

$$F(u) = 0, u \in \mathbb{R}^N, F(u) \in \mathbb{R}^N$$

Méthode itérative de **Newton** (tangente en dimension 1)

$$u_{n+1} = u_n - J(u_n)^{-1} F(u_n)$$

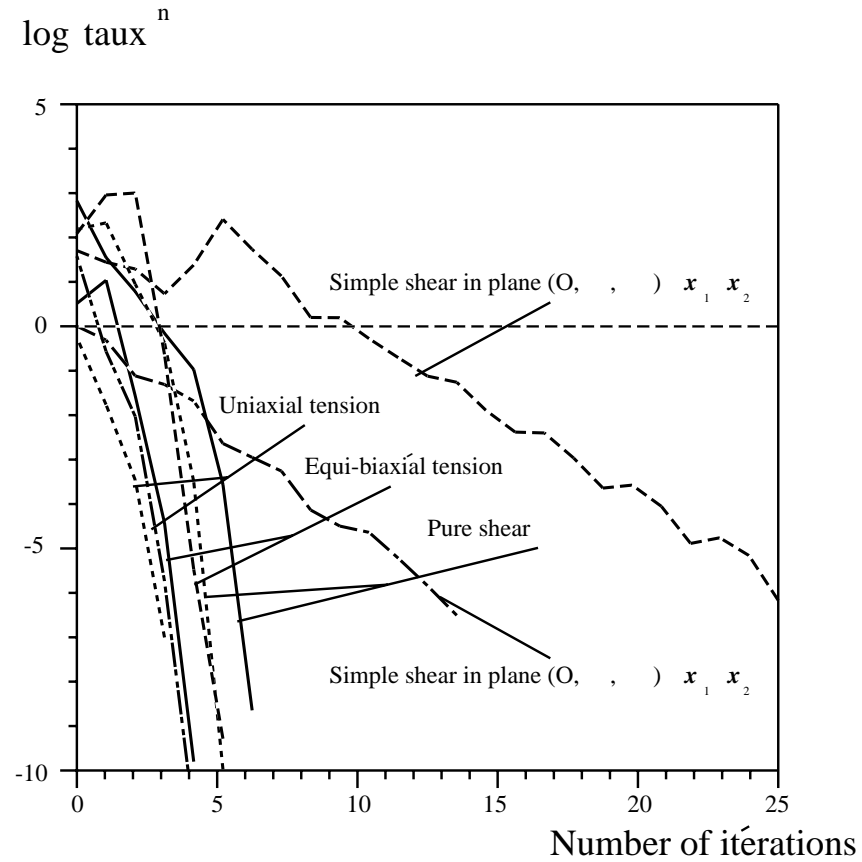
Systeme linéaire à résoudre à chaque itération

$J(u_n)$ matrice creuse

Résolution du système linéaire par méthode de **Gauss**

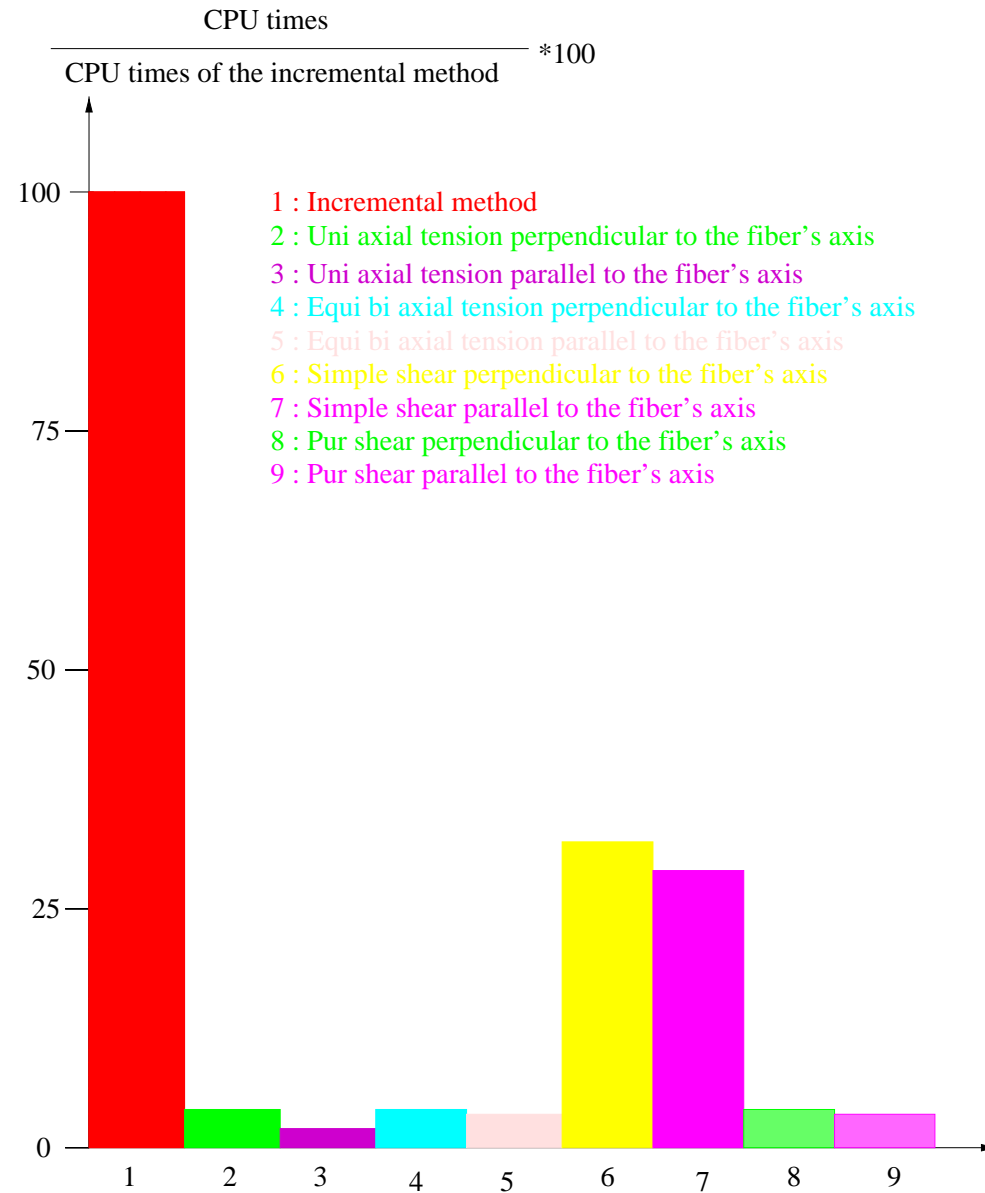
adaptée aux **matrices creuses**

Convergence



Convergence quadratique

Comparaison avec une méthode incrémentale



Simulation de l'endommagement

Problème d'endommagement

$$\left\{ \begin{array}{ll} \operatorname{div}_{\mathbf{x}} \mathbf{T} = 0 & \text{dans } \Omega_0 \\ \mathbf{T} = \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial \mathbf{F}}(\mathbf{x}, \mathbf{F}, \mathbf{D}_k) & \text{dans } \Omega_0 \\ \mathbf{F} = \mathbf{1} + \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{U} & \text{dans } \Omega_0 \\ \mathbf{U} = \mathcal{U}(t) & \text{sur } \partial\Omega_u \\ \mathbf{T}(\mathbf{N}) = \mathbf{g}(t) & \text{sur } \partial\Omega_g \\ \mathcal{F}_k = -\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial \mathbf{D}_k}(\mathbf{x}, \mathbf{F}, \mathbf{D}_k) & \text{dans } \Omega_0 \\ \frac{\partial \mathbf{D}_k}{\partial t} = \frac{\partial \phi^*}{\partial \mathcal{F}_k}(\mathcal{F}_k) & \text{dans } \Omega_0 \\ \mathbf{D}_k(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{D}_{0,k}(\mathbf{x}) & \text{dans } \Omega_0 \end{array} \right.$$

\mathbf{D}_k sont les variables d'endommagement

\mathcal{F}_k sont des variables de pseudo-dissipation énergétique

Méthode d'homogénéisation

• Problème macroscopique

$$\left\{ \begin{array}{ll} \operatorname{div}_x \mathbf{T} = 0 & \text{dans } \Omega_0 \\ \mathbf{T} = \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial \mathbf{F}}(\mathbf{x}, \mathbf{F}, \mathbf{D}_k) & \text{dans } \Omega_0 \\ \mathbf{F} = \mathbf{1} + \nabla_x \mathbf{U} & \text{dans } \Omega_0 \\ \mathbf{U} = \mathcal{U}(t) & \text{sur } \partial\Omega_u \\ \mathbf{T}(\mathbf{N}) = \mathbf{g}(t) & \text{sur } \partial\Omega_g \\ \mathcal{F}_k = -\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial \mathbf{D}_k}(\mathbf{x}, \mathbf{F}, \mathbf{D}_k) & \text{dans } \Omega_0 \\ \frac{\partial \mathbf{D}_k}{\partial t} = \frac{\partial \phi^*}{\partial \mathcal{F}_k}(\mathcal{F}_k) & \text{dans } \Omega_0 \\ \mathbf{D}_k(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{D}_{0,k}(\mathbf{x}) & \text{dans } \Omega_0 \end{array} \right.$$

• Problème microscopique

$$\left\{ \begin{array}{ll} \operatorname{div}_y \boldsymbol{\tau} = 0 & \text{dans } Y \\ \boldsymbol{\tau} = \frac{\partial e}{\partial \mathbf{f}}(\mathbf{y}, \mathbf{f}) & \text{dans } Y \\ \mathbf{f} = \mathbf{F} + \nabla_y \mathbf{u} & \text{dans } Y \\ \mathbf{u} & Y \text{ périodique} \\ \boldsymbol{\tau}(\mathbf{n}) & Y \text{ anti-périodique} \\ \text{Conditions aux limites} & \\ \text{d'endommagement} & \end{array} \right.$$

• Relations de moyenne

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{E}(\mathbf{x}, \mathbf{F}, \mathbf{D}_k) = \mathcal{E}(Y, \mathbf{e}, \mathbf{D}_k) \\ \mathbf{T} = \mathcal{T}(Y, \boldsymbol{\tau}, \mathbf{D}_k) \\ \mathbf{F} = \mathcal{G}(Y, \mathbf{f}, \mathbf{D}_k) \end{array} \right.$$

Méthode de résolution

Discrétisation en espace par Éléments Finis

Systeme algébro-différentiel d'indice 1 et non linéaire

$$\begin{cases} u'(t) = f(u(t), v(t)) \\ g(u(t), v(t)) = 0 \end{cases}$$

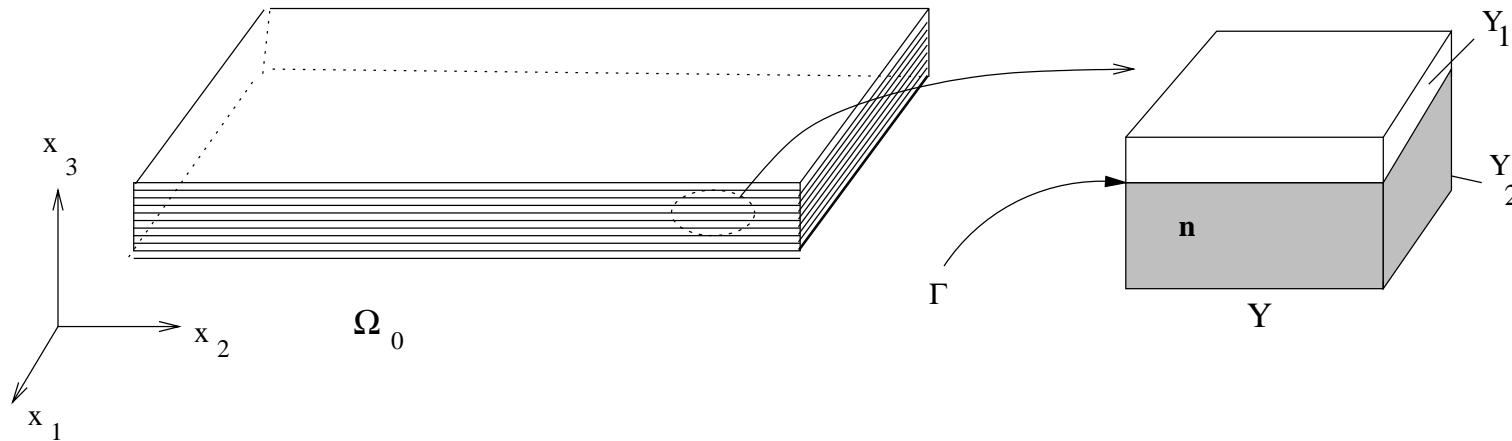
Discrétisation en temps par Euler explicite (par exemple)

Systeme d'équations non linéaires (partie algébrique)

Méthodes précédentes à chaque pas de temps

$$\begin{cases} u_{n+1} = u_n + \Delta t f(u_n(t), v_n(t)) \\ g(u_{n+1}, v_{n+1}) = 0 \end{cases}$$

Exemple : composite stratifié



Phénomène de décohésion

glissement aux interfaces par contact imparfait
déplacement tangentiel discontinu : paramètre D

Exemple : composite stratifié

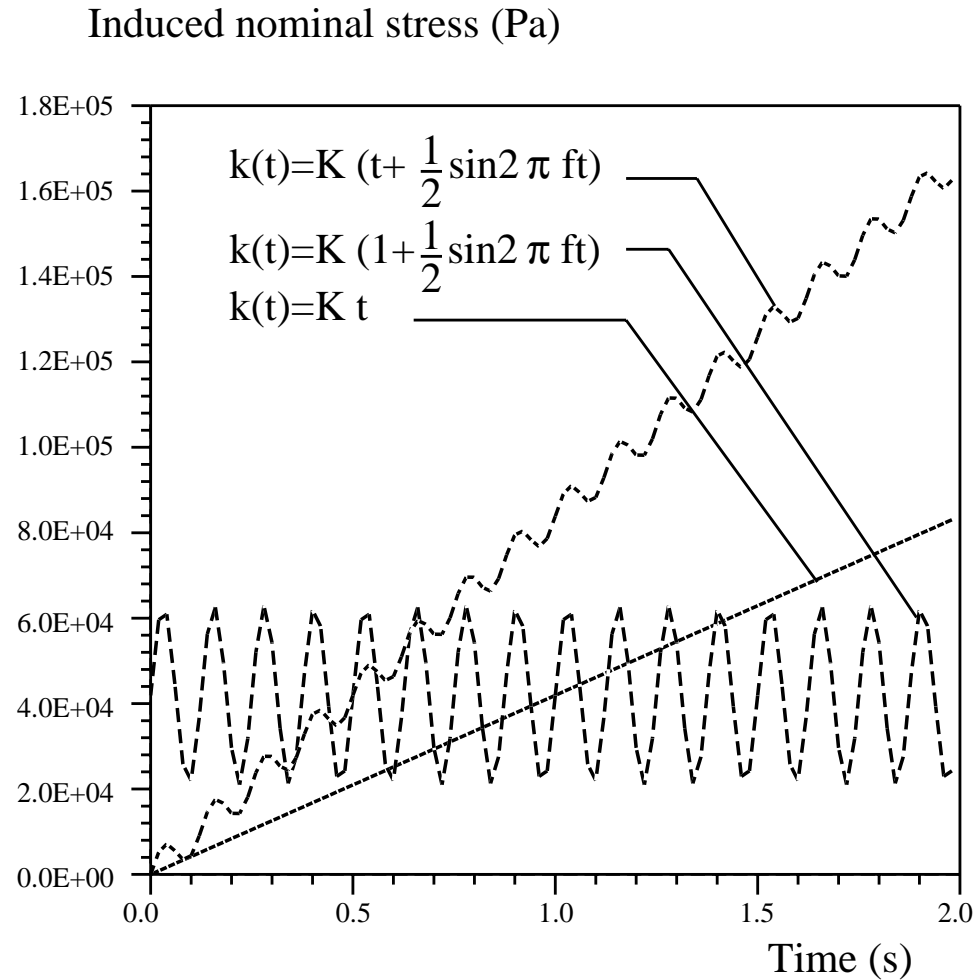
- Conditions aux limites
- Relations de moyenne

$$\left\{ \begin{array}{ll} \llbracket u_N \rrbracket = 0 & \text{sur } \Gamma \\ \llbracket u_T \rrbracket = D \tau_T & \text{sur } \Gamma \\ \llbracket \tau \rrbracket (n) = 0 & \text{sur } \Gamma \end{array} \right. \quad \left\{ \begin{array}{l} T = \langle \tau \rangle_{Y/\Gamma} \\ F = \langle f \rangle_{Y/\Gamma} + \frac{1}{|Y|} \int_{\Gamma} \llbracket u_T \rrbracket \otimes n \, d\gamma \\ E = \langle e \rangle_{Y/\Gamma} + \frac{1}{2|Y|} \int_{\Gamma} \llbracket u_T \rrbracket \tau_T \, d\gamma \end{array} \right.$$

- Endommagement

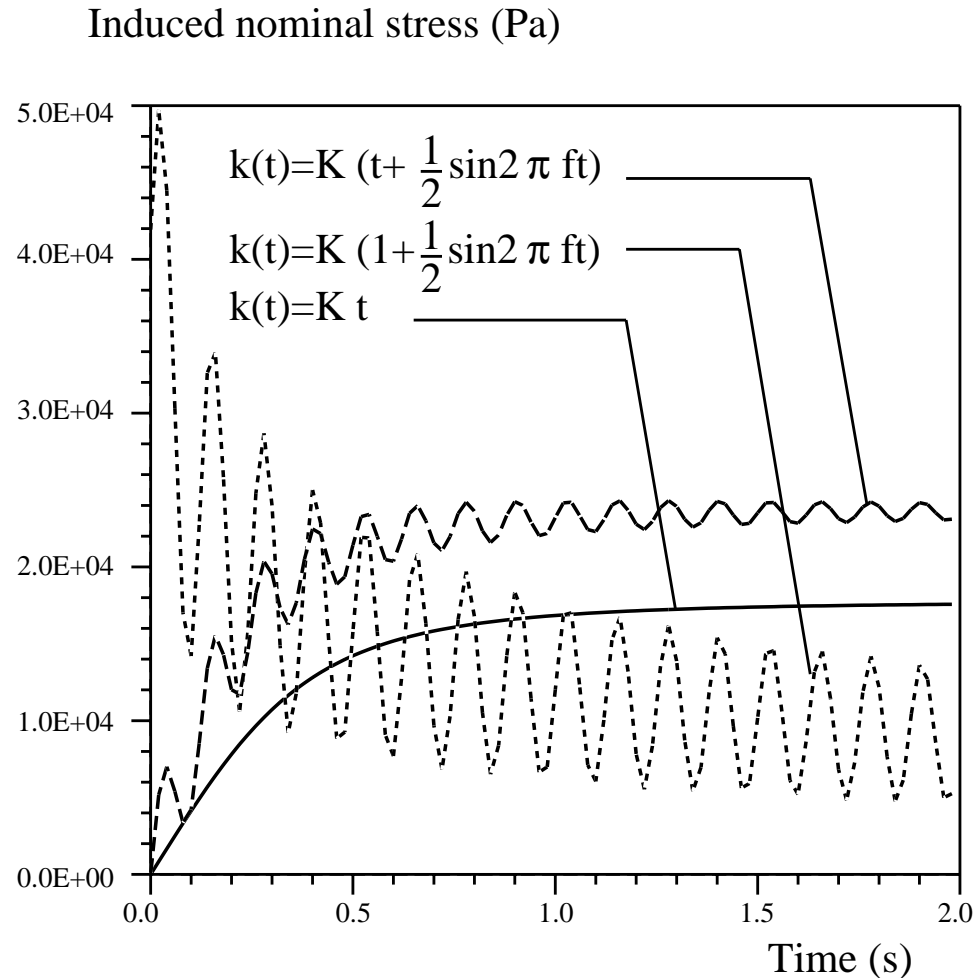
$$\left\{ \begin{array}{l} \mathcal{F} = \frac{1}{2|Y|D^2} \int_{\Gamma} \llbracket u_T \rrbracket \llbracket u_T \rrbracket \, d\gamma \\ \phi^*(\mathcal{F}) = \frac{\alpha}{\beta + 1} |\mathcal{F}|^{\beta}, \quad \alpha \geq 0, \beta > 0 \\ \frac{\partial D}{\partial t} = \frac{\partial \phi^*}{\partial \mathcal{F}}(\mathcal{F}) \text{ dans } \Omega_0 \\ D(x, 0) = D_0(x) \text{ dans } \Omega_0 \end{array} \right.$$

Comportement du stratifié sans endommagement



Sans endommagement ($\alpha = 0$)

Comportement du stratifié avec endommagement



Avec endommagement ($\alpha = 10^{-20}$ and $\beta = 0.7$)

Parallélisation du logiciel de simulation

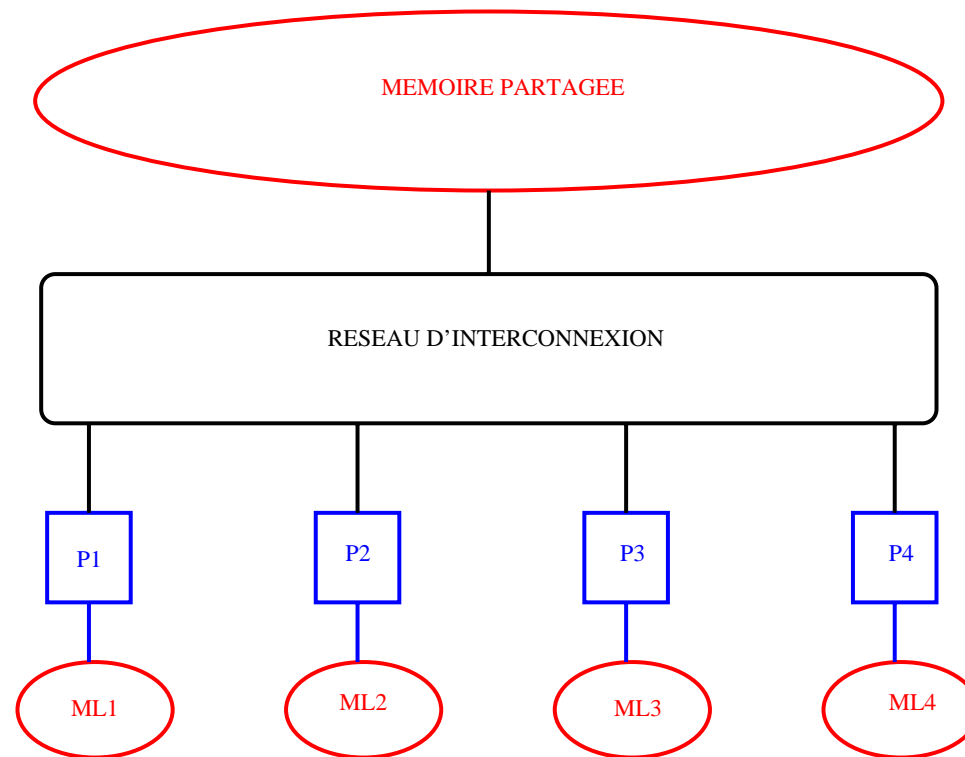
Machines parallèles

Architectures parallèles

MIMD : plusieurs processeurs de calcul

Mémoire partagée ou mémoire distribuée

Réseau d'interconnexion



Performances

Accélération et efficacité

Nombre de processeurs P - Temps CPU sur P processeurs T_P

Accélération $S_P = \frac{T_1}{T_P}$ - Efficacité $E_P = \frac{S_P}{P}$

Choix de l'algorithme

Parfois, l'algorithme séquentiel est différent de l'algorithme parallèle

Loi d'Amdhal

Pourcentage séquentiel α alors $S_P = \frac{P}{(1-\alpha)+\alpha P}$

Synchronisations et communications

Surcoût modélisé par $\beta(P)$ alors $S_P = \frac{P}{(1-\alpha)+\alpha P+\beta(P)P}$

Voir demo sous Matlab

Performances et taille de problème

Modèle simplifié

Taille de problème N

Pourcentage séquentiel nul et surcoût de parallélisation $\beta(P,N)$

Temps séquentiel $T_1 = kN^d$ et temps parallèle $T_P = kN^d/P + \beta(P,N)$

$$S_P = \frac{P}{1+\gamma(P,N)}, \quad \gamma(P,N) = \frac{\beta(P,N)P}{kN^d}$$

Passage à l'échelle

Choisir P fonction de N tel que γ pas trop grand

Exemple : $d = 3$, $\beta(P,N) = kcN^2$, $P = P_0N$, $S_P = \frac{P_0N}{1+cP_0}$

Nombre de processeurs et accélération
proportionnels à la taille du problème

Programmation parallèle

Modèle SPMD : Single Program Multiple Data

Un même programme exécuté sur différents processeurs
Avec des données différentes

Distribution de tâches ou de données

Une tâche par processeur - Exécution indépendante et asynchrone
Par exemple, découpage d'indices de boucles ou de vecteurs

Synchronisations

Architecture à mémoire partagée : variables partagées
Par exemple, synchronisation globale pour un produit scalaire

Communication

Architecture à mémoire distribuée : échange de messages
Par exemple, communication de produits scalaires locaux

Analyse des dépendances de données

Trouver des tâches indépendantes

Déterminer les points de synchronisation ou communication

Choix d'algorithmes

Par exemple, méthode de sous-domaines

Parallélisation du problème d'endommagement

Différentes étapes

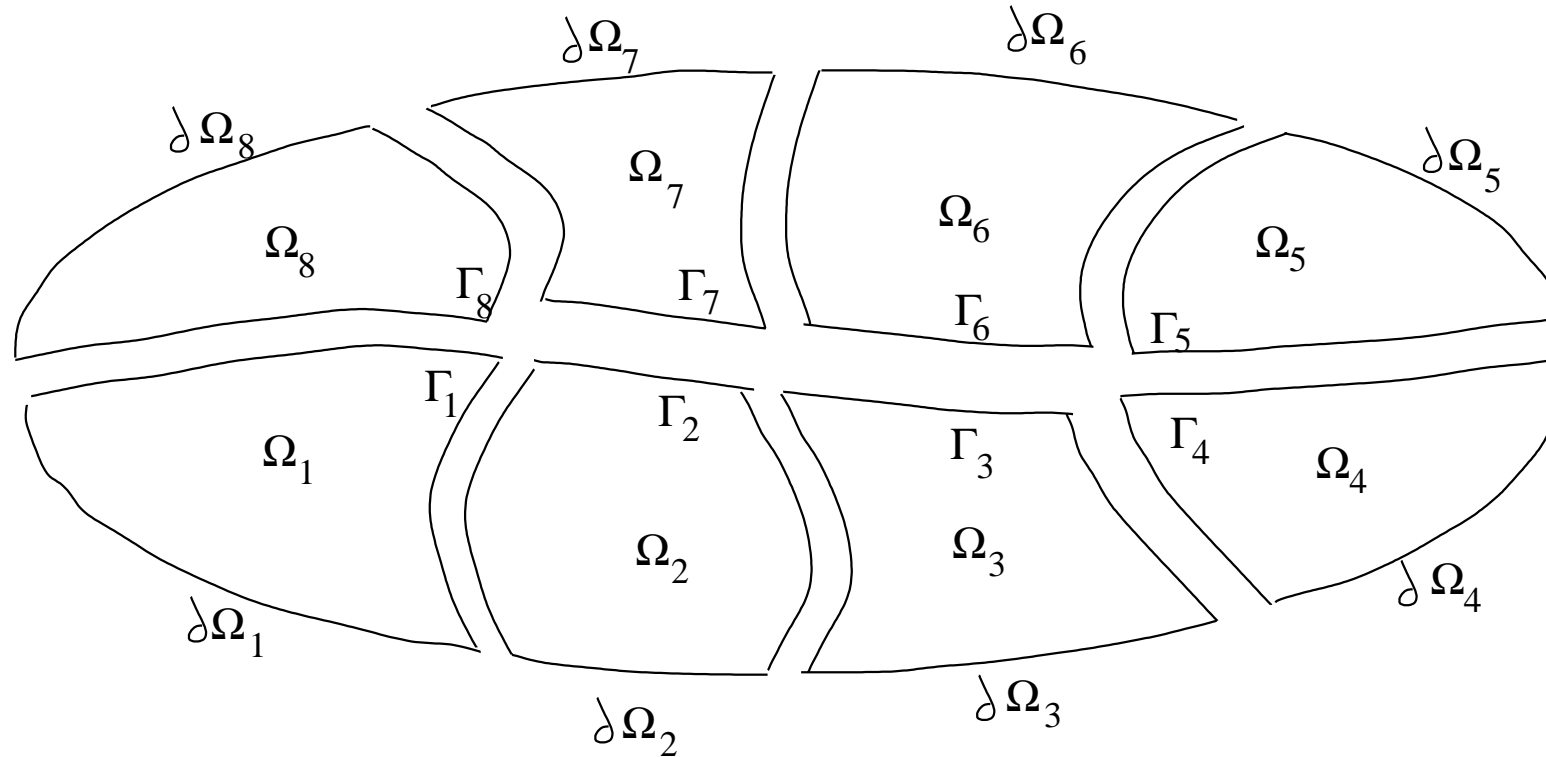
Étape	Méthode	Équations
Modélisation	Homogénéisation	Système d'EDP
Discrétisation en espace	Éléments Finis	Système d'EDA
Discrétisation en temps	Schéma à un pas	Système non linéaire
Résolution non linéaire	Newton	Système linéaire
Résolution linéaire	Gauss	Système triangulaire

Parallélisation

Gauss remplacé par la **méthode des sous-domaines**

Méthode de sous-domaines

Décomposition en sous-domaines

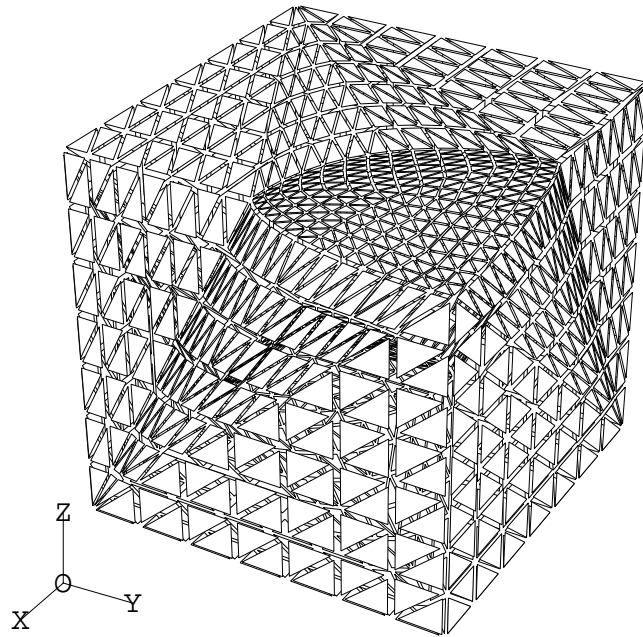


Relations à l'interface

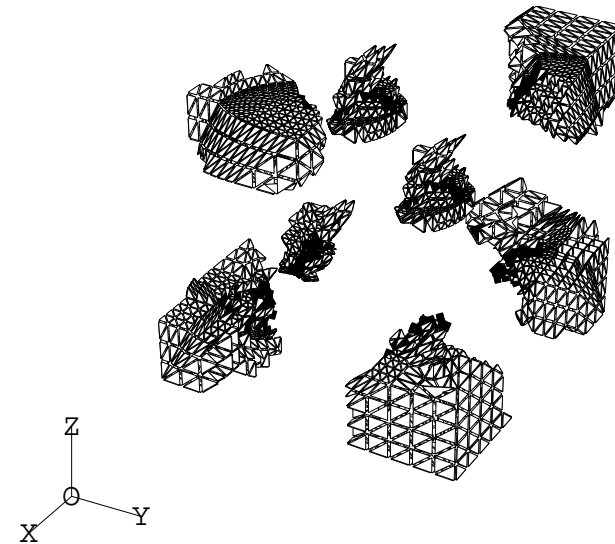
Continuité des déplacements

Continuité des contraintes

Un exemple de décomposition



25200 éléments, 4965 noeuds,
14895 inconnues



décomposition en 8 sous-domaines

Méthode du complément de Schur

Interface et sous-domaines

Γ interface globale et Γ^i interface frontière du sous-domaine i

Restriction $R^i : u \text{ sur } \Gamma \rightarrow u \text{ sur } \Gamma^i$

Extension $(R^i)^t : v \text{ sur } \Gamma^i \rightarrow v \text{ sur } \Gamma$

Continuité des déplacements

$\Lambda = u \text{ sur } \Gamma$

$u^i = R^i(\Lambda) \text{ sur } \Gamma^i$

Continuité des contraintes

$\tau^i = \mathcal{S}^i(u^i) + F^i \text{ sur } \Gamma^i$

$\sum_{i=1}^N (R^i)^t \tau^i = 0 \text{ sur } \Gamma$

Complément de Schur pour un problème linéaire

Problème microscopique linéaire

$$\begin{cases} \operatorname{div} \tau = 0 & \text{dans } \Omega \\ \tau = p - q \nabla u & \text{dans } \Omega \\ \text{Cond. aux limites} & \text{sur } \partial\Omega \end{cases}$$

Problème d'un sous-domaine

$$\begin{cases} \operatorname{div} \tau^i = 0 & \text{dans } \Omega^i \\ \tau^i = p - q \nabla u^i & \text{dans } \Omega^i \\ u^i = R^i(\Lambda) & \text{sur } \Gamma^i \\ \text{Cond. aux limites} & \text{sur } \partial\Omega^i - \Gamma^i \end{cases}$$

Problème de l'interface

$$\sum_{i=1}^N (R^i)^t (\mathcal{S}^i(R^i(\Lambda)) + F^i) = 0$$

Méthode de résolution

Discrétisation par Éléments Finis

Continuité des contraintes

Système linéaire dense à l'interface $Sx = b$, $S = \sum_{i=1}^N (R^i)^t S^i R^i$

Matrice symétrique définie positive

Matrice non calculée - Calcul de Su seulement

Continuité des déplacements

Produit $v = Su$: calcul des déplacements sur chaque sous-domaine

Systèmes linéaires creux sur chaque sous-domaine

Méthode du Gradient Conjugué Préconditionné

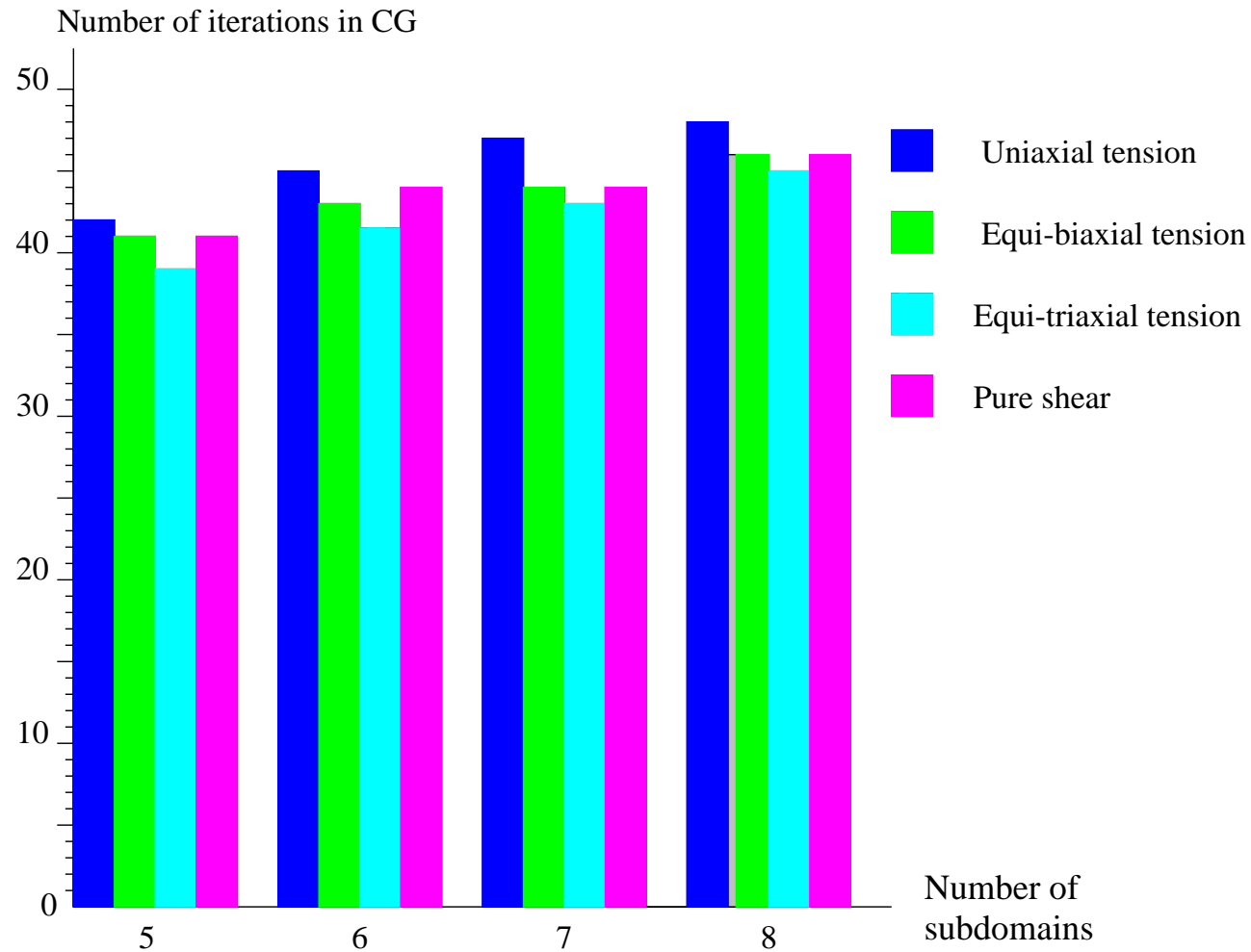
Méthode itérative

Produit $v = Su$ à chaque itération

Préconditionnement : Nombre d'itérations presque indépendant du nombre de sous-domaines

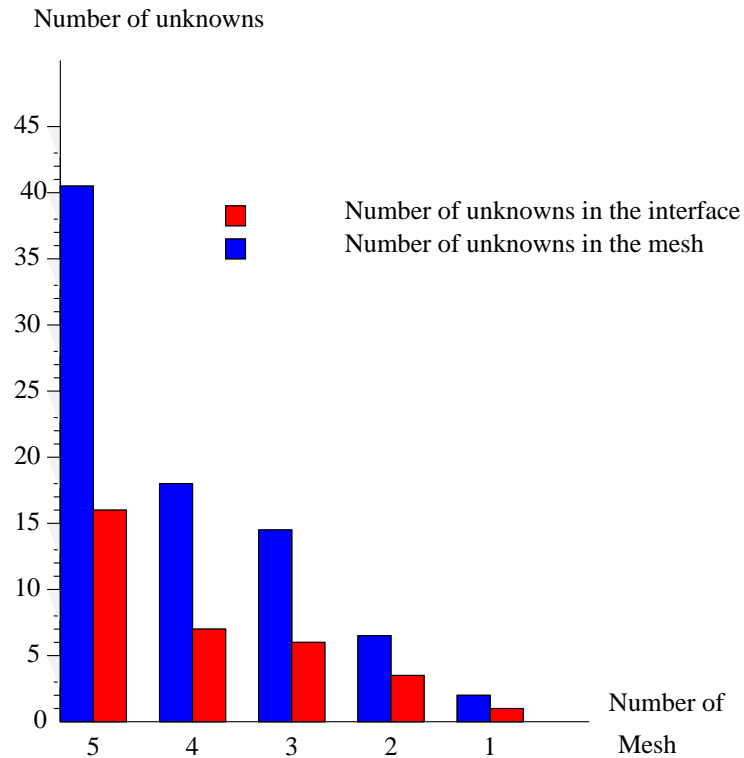
Convergence et nombre de sous-domaines

Un problème microscopique linéaire

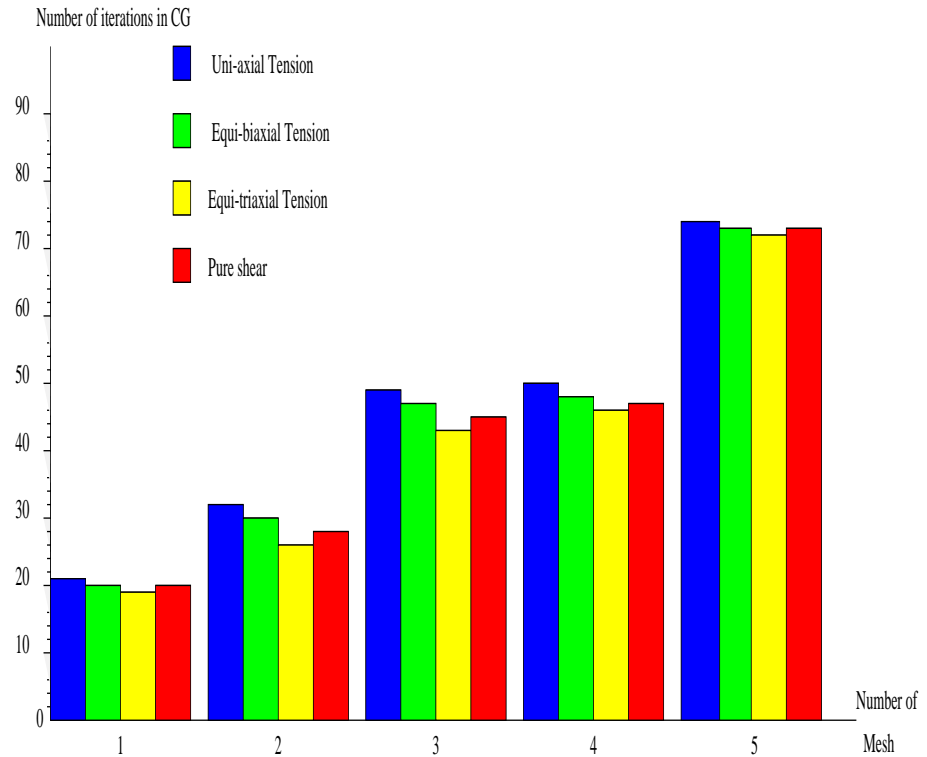


Convergence et taille du maillage

Un problème microscopique linéaire



Mesh sizes



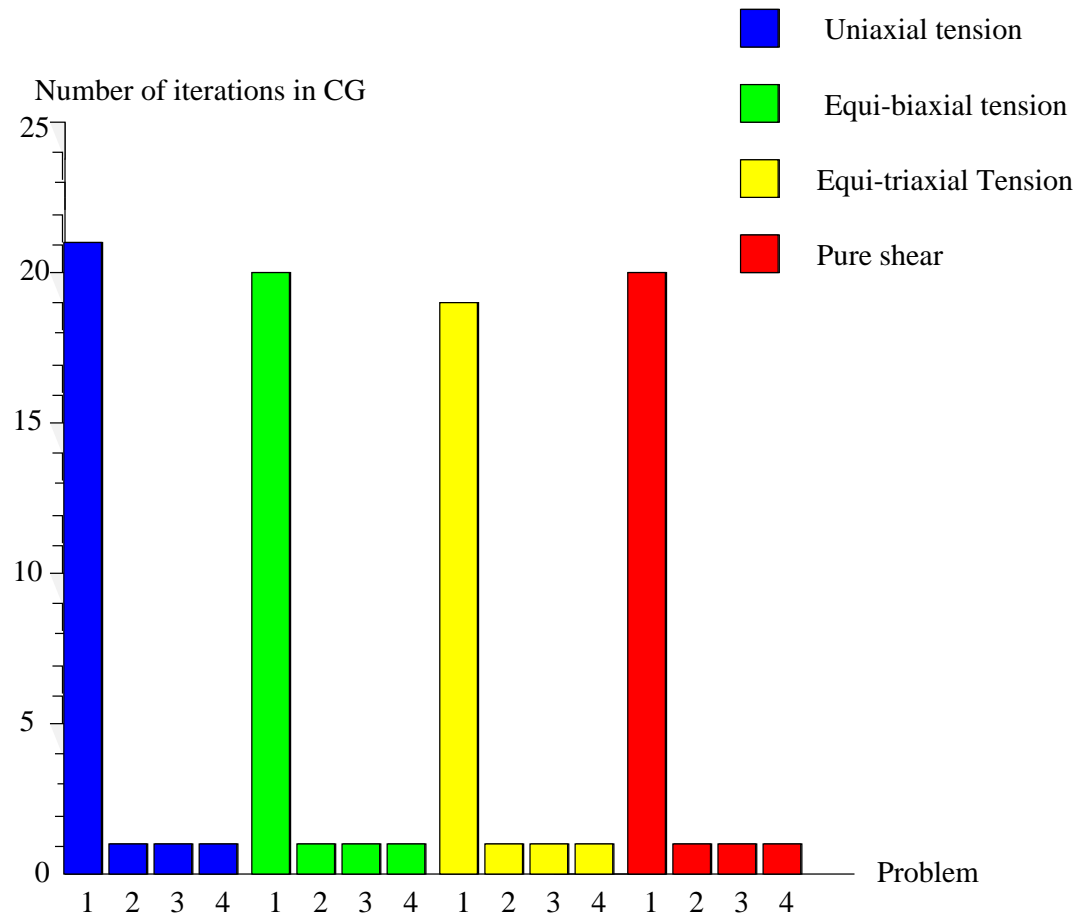
Convergence

Accélération du Gradient Conjugué

Problème non linéaire homogénéisé

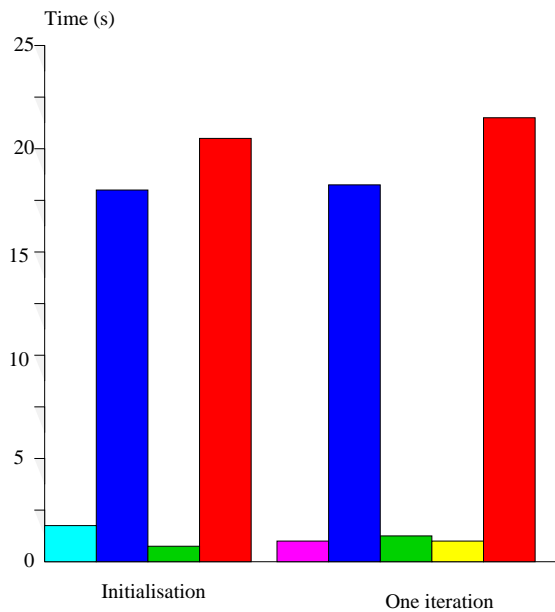
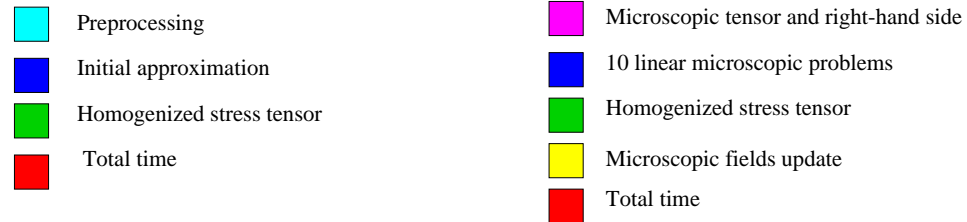
4 problèmes non linéaires microscopiques avec la même matrice

⇒ Accélération de la convergence

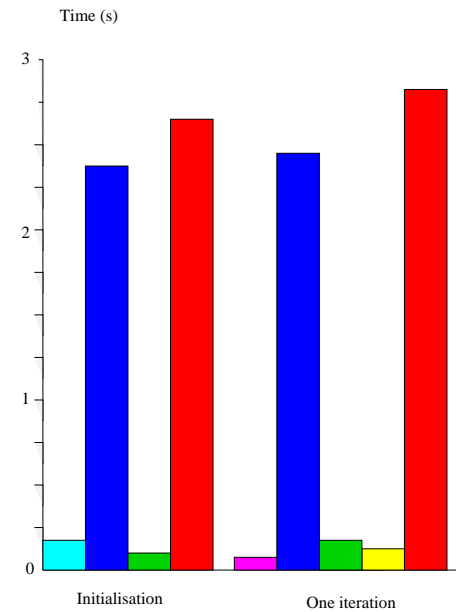


Performances parallèles

Problème non linéaire homogénéisé



temps CPU séquentiel



temps CPU parallèle

avec 8 sous-domaines, accélération de 7.5

Pour en savoir plus

<http://www.irisa.fr/aladin/>