

Simulation multi échelles pour les matériaux : application à la propagation de fissures

O. Coulaud
Projet ScAIApplix

16 juin 2008

INSTITUT NATIONAL
DE RECHERCHE
EN INFORMATIQUE
ET EN AUTOMATIQUE



centre de recherche
BORDEAUX - SUD-OUEST

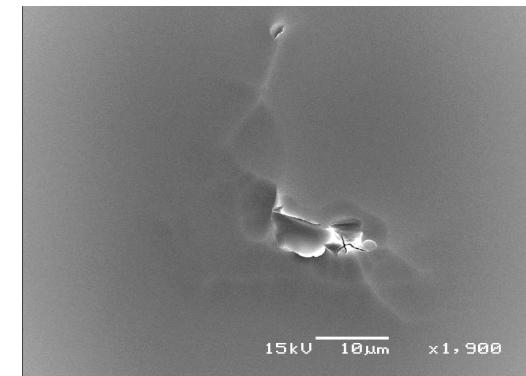
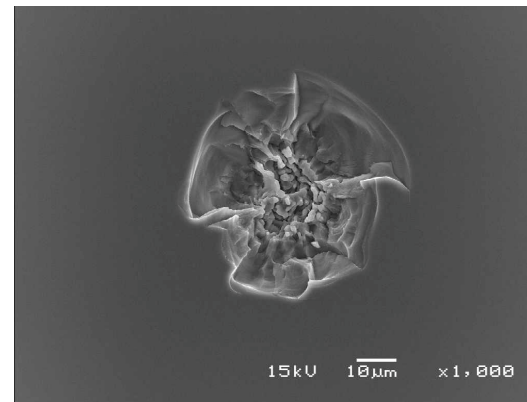
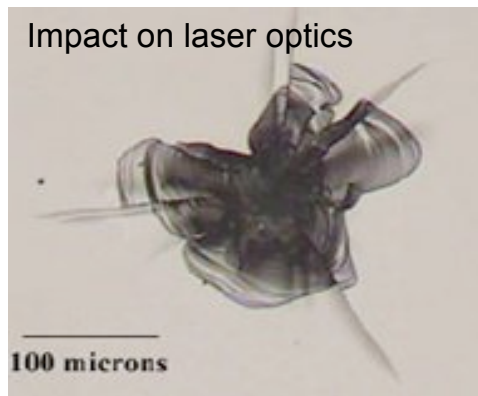
Simulations numériques et calcul intensif
Journées scientifiques de l'Université de Nantes

Contexte

Collaboration avec le CEA DIF-DPTA (G. Zerah) et INRIA (G. Anciaux et J. Roman)

But : Définir un modèle multi échelle pour

- Meilleure compréhension des défauts à l'échelle microscopique comme les fissures, impacts sur les lentilles et le hublot du Laser Mégajoule (LMJ)
 - La physique du phénomène n'est pas bien comprise.



- Réduire les temps de calcul des simulations de dynamique moléculaire.



Plan

Modélisation des matériaux

Approche multi échelles

- Notre modèle
- Aspects algorithmiques

Résultats

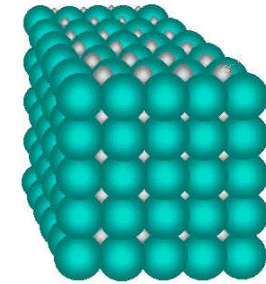
- Propagation d'ondes
- Cas d'une fissure

Conclusion



Modélisation des matériaux

Introduction : approche atomique



Le matériaux est discrétisé à l'échelle atomique

Étude par des simulations atomiques (dynamique moléculaire)

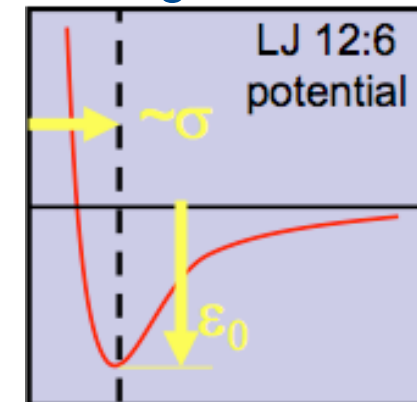
$$M \frac{d^2 q(t)}{dt^2} = F(q(t)) = -\nabla V(q(t)) + f^{ext}$$

où V est un potentiel empirique (Lennard-Jones, EAM, Stillinger-Weber, ...)

$$V(q) = \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \left(\frac{A_{i,j}}{|q_i - q_j|^{12}} - \frac{B_{i,j}}{|q_i - q_j|^6} \right)$$

Calcul des forces : interactions non locales (R_{cut})

Description fine du système.



Introduction : approche atomique

Avantages

- On peut capturer tous les phénomènes

Inconvénients

- Définition du potentiel, du système, ...
- Échelle en espace : des petits objets
 - un cube de 100 nm^3 de Si $\sim$ milliard d'atomes
- Échelle en temps : fortes oscillations des atomes
 - pas de temps = femto-seconde (10^{-15} sec.)
- Conditions aux limites (périodiques)
- Grandeurs statistiques
- Gros volume de données ~ 15.6 GigaOctets/pas
 - Comment trouver l'information pertinente ?
 - Que visualiser ?



Introduction : approche continue

Approche macroscopique du matériaux

Le système est régi par les lois de conservation de la mécanique continue

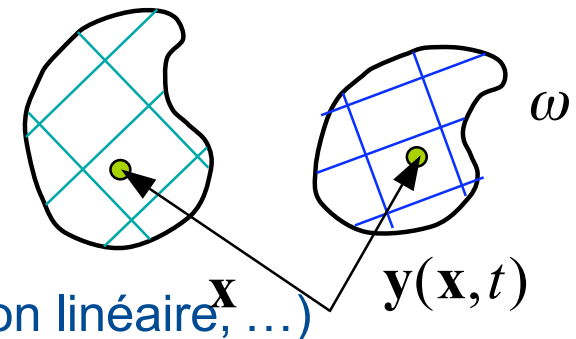
Élastodynamique :

- Formulation lagrangienne

$$\rho \ddot{\mathbf{y}} = \operatorname{div} \mathbf{T} + \mathbf{b}$$

$$\mathbf{T} = \mathbf{T}^T$$

Ω



- Loi de comportement du matériau (linéaire, non linéaire, ...)

$$\mathbf{T} = \mathbf{T}(\nabla \mathbf{y})$$

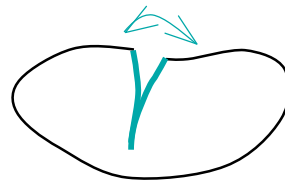
- Discrétisation :
 - Maillage en triangles ou en tétraèdre
 - Approche variationnelle - calcul local des forces
 - Éléments finis P1 - approximation linéaire sur un triangle.



Introduction : approche continue

Avantages

- Principe variationnel – minimisation de l'énergie
- Grande variété de conditions aux limites
- Permet de traiter de gros objets



$$[[y]] \neq 0$$

Limitations

- Nécessite un maillage très fin en cas de discontinuité
- La loi de comportement n'est plus valide au niveau des discontinuités du matériaux (la fracture, dislocation, défaut, ...)
il faut étendre le modèle (XFEM, ...) mais comment définir la dynamique du défaut ?
- Comment tenir compte du modèle atomique dans les grandeurs macroscopiques ?

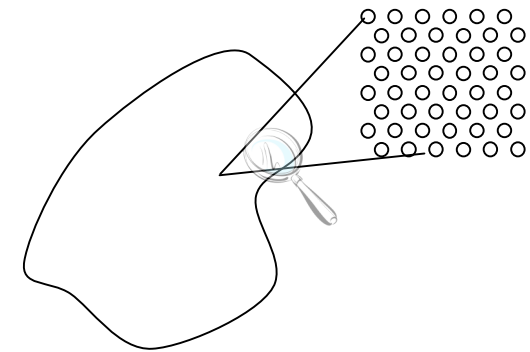


Introduction : approche multi échelles (1)

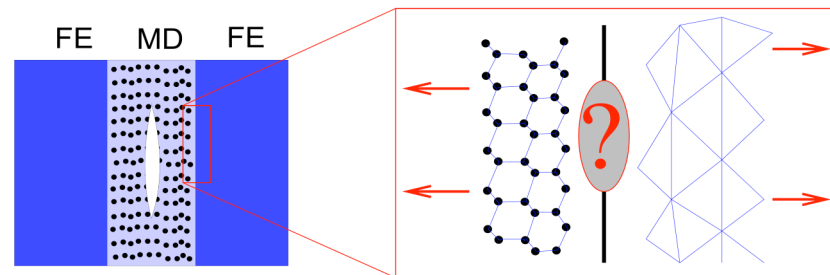
Les défauts dans le matériau que l'on étudie sont très localisés

Idée : utiliser les avantages des deux modèles

- modèle discret
 - Proche des discontinuités
- modèle continu
 - Diminuer la taille du domaine
 - Prise en compte des conditions aux limites.



Mais comment raccorder ces deux modèles ?



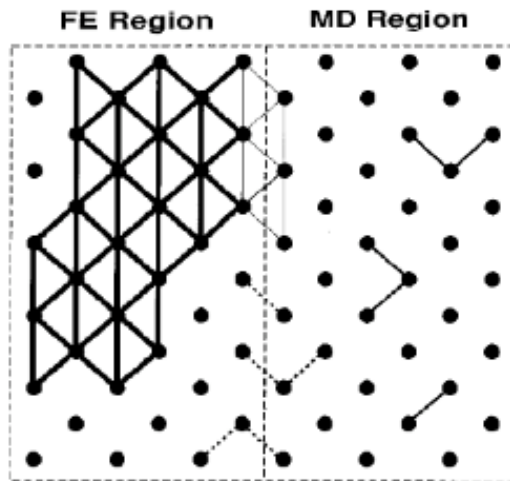
Et comment déterminer les différentes zones?



Introduction : approche multi échelles (2)

Deux types de couplage :

Frontière



Grandeurs

Déplacement

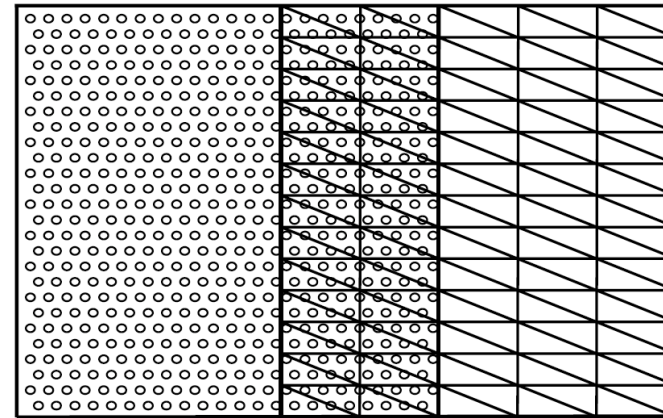
Vitesse

Atomique

fin

haute fréquence (r_0)

Recouvrement (hand-shake....)



Continue

moyen

basse fréquence (h)

Challenges :

- Éviter les réflexions des ondes à l'interface
- La réduction des DDLs nécessite de développer des filtres



Notre Approche

INSTITUT NATIONAL
DE RECHERCHE
EN INFORMATIQUE
ET EN AUTOMATIQUE



centre de recherche
BORDEAUX - SUD-OUEST

Notre approche multi échelles

Basé sur la « Bridging Method » introduite par T. Belytschko

- Zone de recouvrement
- Pondération de l'énergie dans le recouvrement

$$H_{\text{multi}} = \alpha H_a + (1-\alpha) H_c$$
- Les deux modèles sont recollés en appliquant des contraintes sur les déplacements. E. D. A.
- Loi de comportement donnée par la règle de Cauchy-Born.
- On suit le formalisme de la dynamique moléculaire
 - Hamiltonien
 - Algorithme de Shake

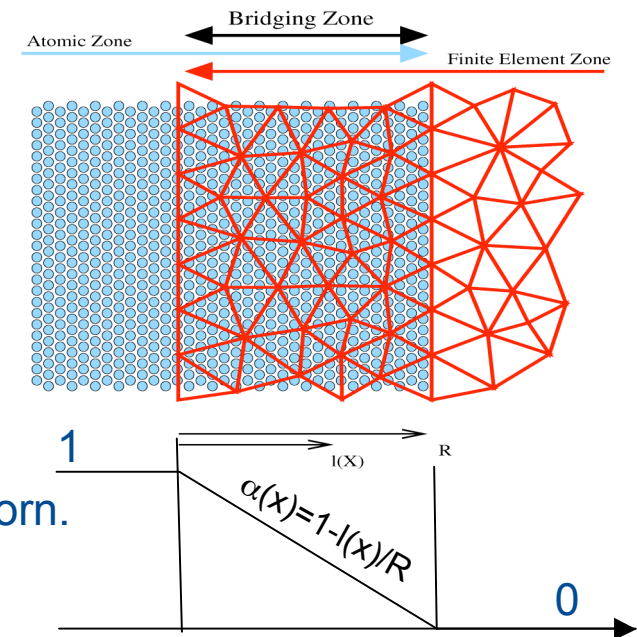


Schéma d'intégration en temps

Idée: utiliser l'algorithme de Shake

- Un pas de Leap-frog $(y^n, y'^n, d^n, d'^n) \Rightarrow (y^{n,*}, y'^{n,*}, d^{n,*}, d'^{n,*})$

- Applique les contraintes sur les vitesses du déplacement

$$y'^{n+1}(x_i) - d'^{n+1}_i = 0 \quad \forall i = 1, \dots, m$$

Calculer m multiplicateurs de Lagrange solution

$$A\lambda = rhs = \left(y'^*_h(x_i) - d'^*_i \right)_{i=1 \dots m}$$

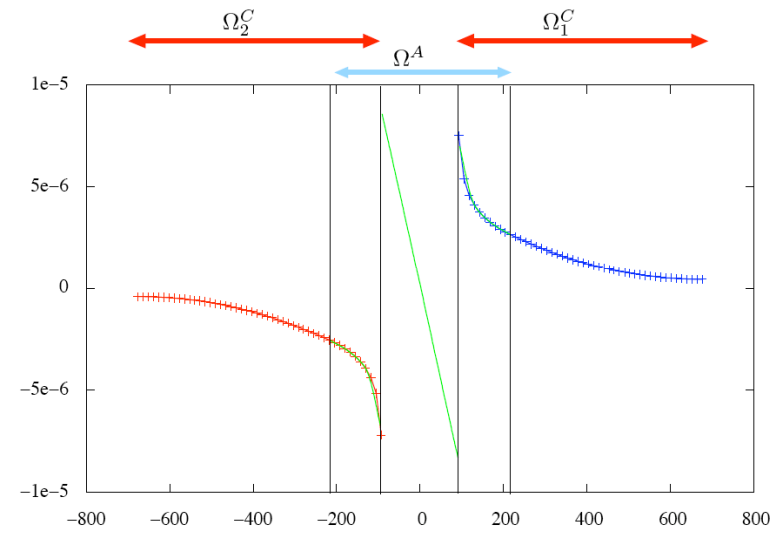
- Mise à jour des vitesses

$$y'^{n+1}_I = y'^*_I + \frac{\Delta t}{\alpha_I M_I} \sum_{j=1}^m \lambda_j \varphi_I(x_j) \quad d'^{n+1}_i = d'^*_i - \frac{\Delta t}{(1 - \alpha_i) m_i} \lambda_i$$



Amélioration

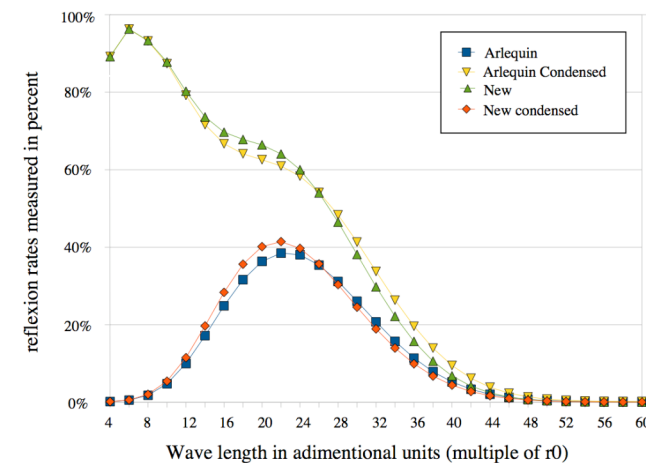
1) Supprimer les forces fantômes



2) Si la matrice des contraintes est condensée sur la diagonale nous avons un amortissement des hautes fréquences.

Cas test

- chaîne d'Argon : 210 atomes
- Taille du recouvrement : 72 atomes
- $h = 6r_0$
- $R = (K_{\text{mult}} - K_{\text{md}}) / K_{\text{init}}$



Aspects algorithmiques

Le couplage

Stratégie : deux ensembles de processeurs distincts pour chaque modèle

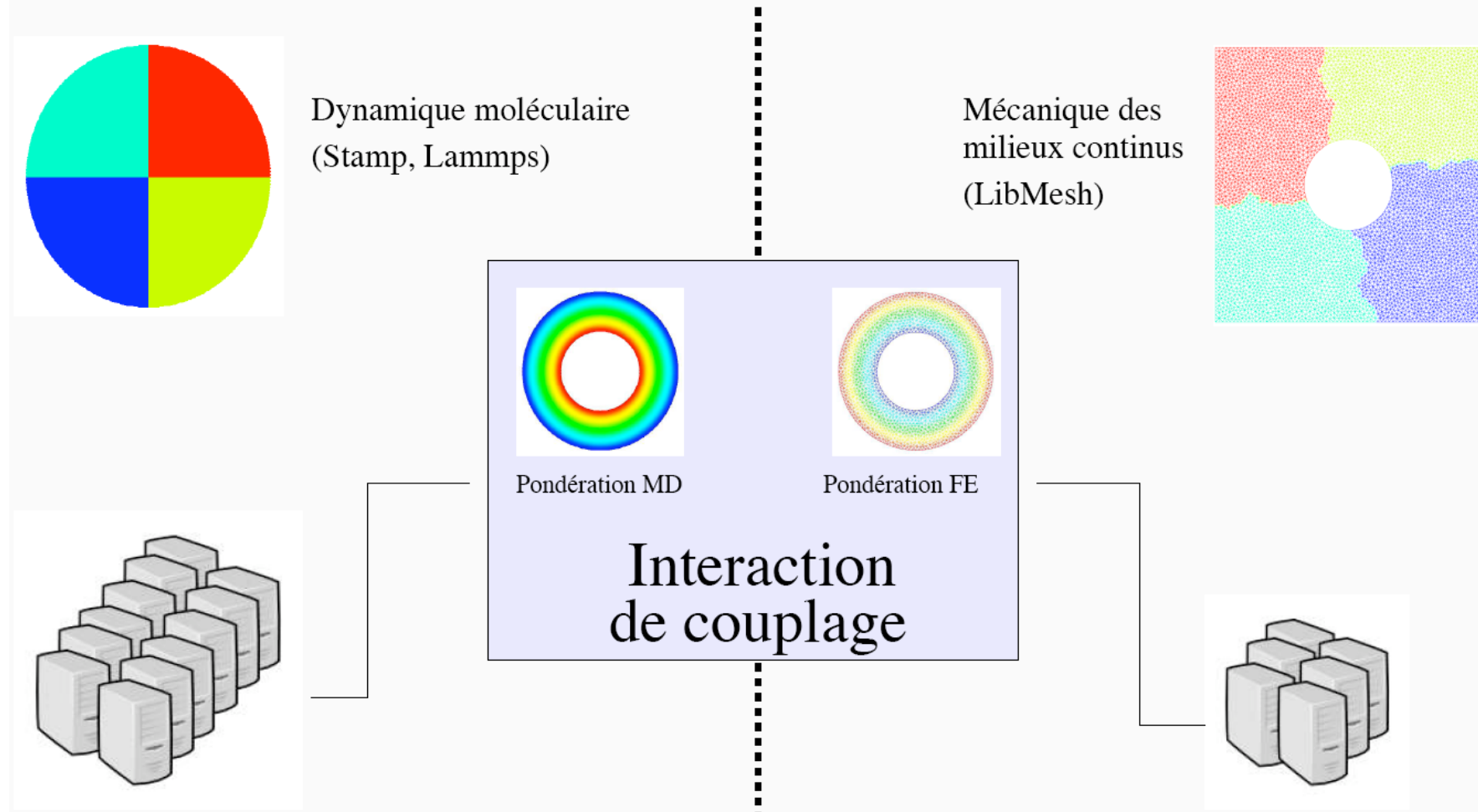
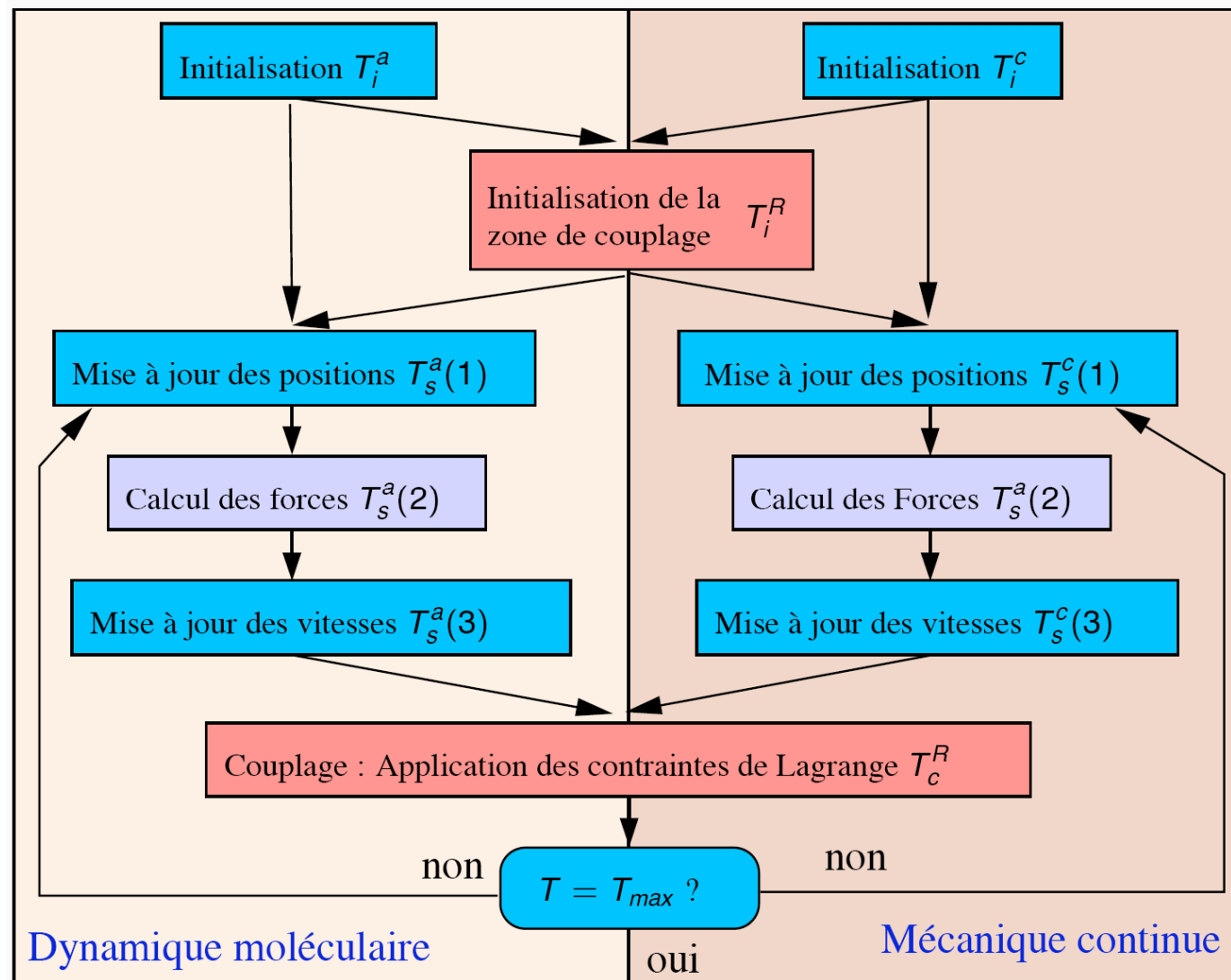
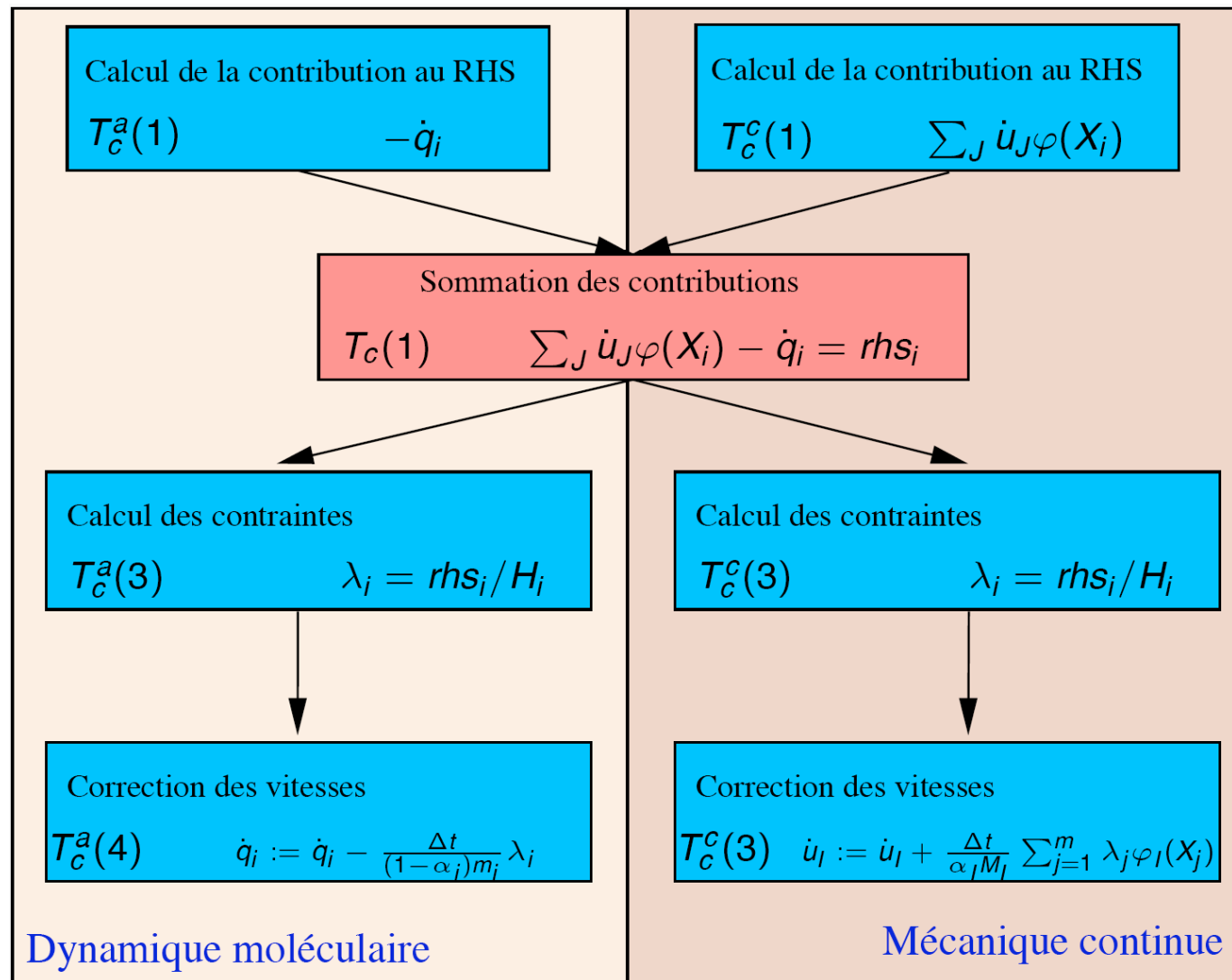


Diagramme du schéma d'intégration



Les étapes du couplage

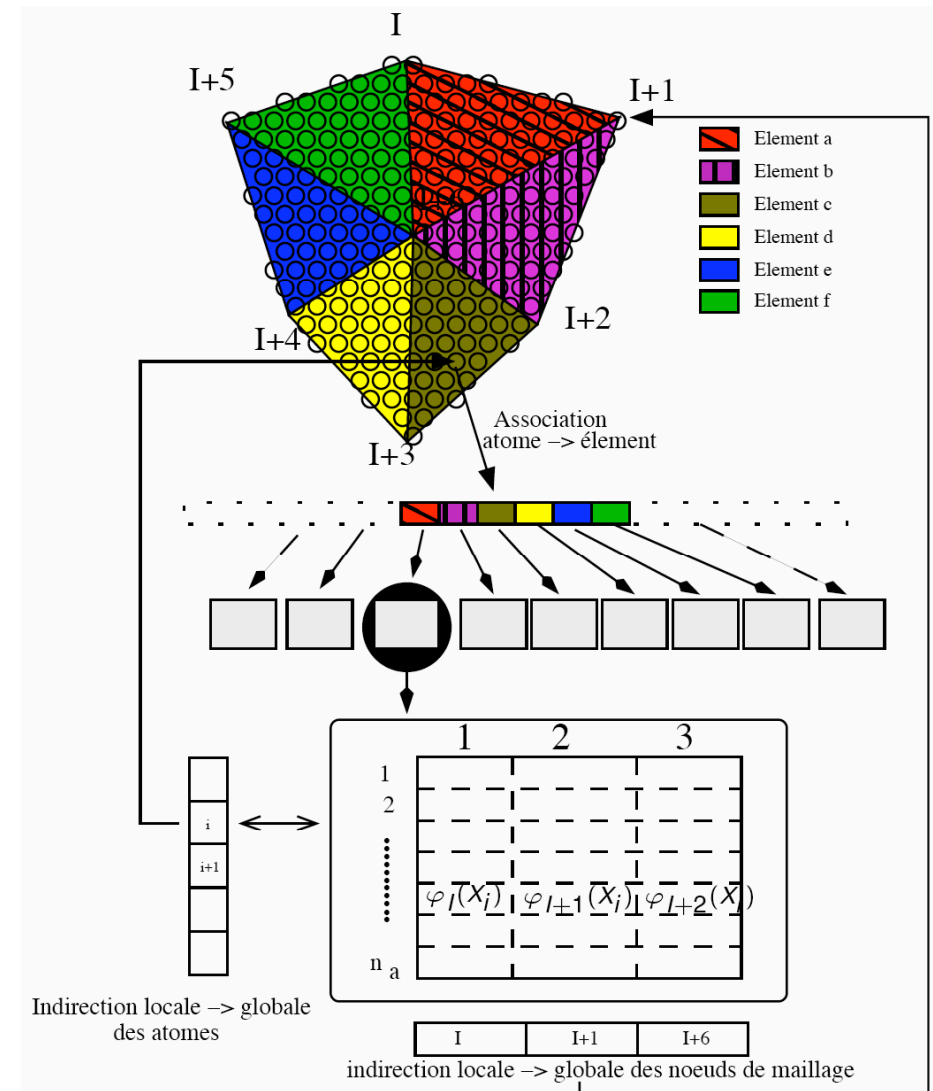


Structure de données

But : accélérer l'Interpolation de y sur les atomes

Accès rapide $At \in \text{Elément}$

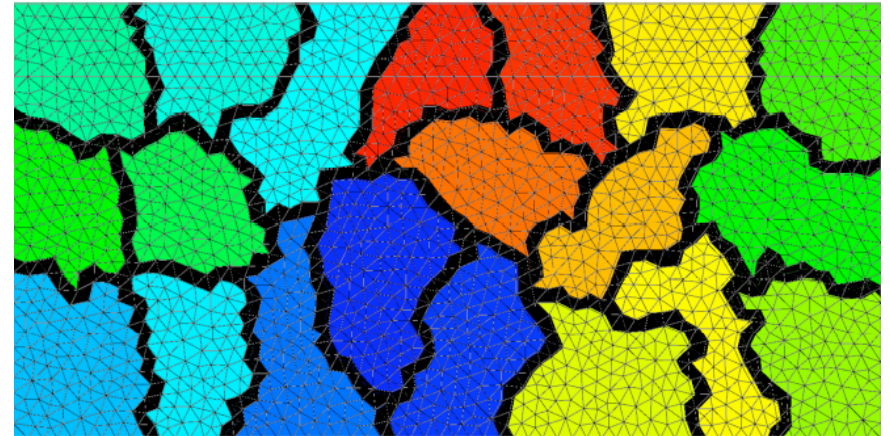
Pré calcul des fonctions de bases



Parallélisme

Éléments finis

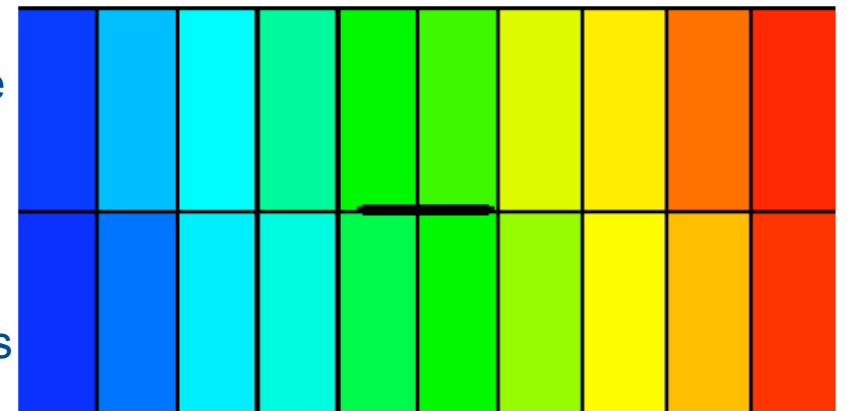
- Décomposition de domaine
 - Échanges avec les voisins
 - Communications locales
- Méthodes directes
 - Distribution de la matrice



Partitionnement de graphe du maillage et pondération nœuds / arêtes

Dynamique moléculaire

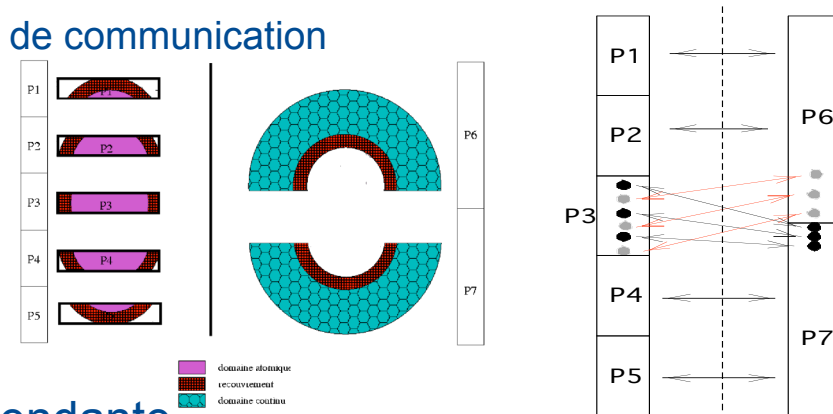
- Approche décomposition spatiale du domaine
 - Découpage en boîtes
 - Une boîte par processeur
 - Les atomes sont libres
 - Migration entre deux processeurs



Problèmes liés à la migration des atomes

La migration des atomes entraîne

- la perte de la cohérence du schéma de communication
- Des messages imbriqués

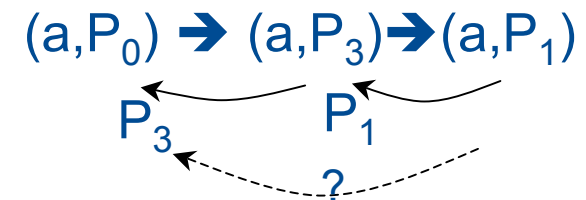


En général la procédure est code dépendante

- Directe P_0 à P_1
- Indirecte : migration par rapport aux axes X,Y puis Z on peut passer par P_3

Problème pour le cas indirecte

- Perte de cohérence
- On doit savoir où est envoyé l'atome
 - mettre à jour le schéma de communication
 - Renommer le vecteur du rhs et des contraintes



nécessite de modifier la procédure de migration



Résultats

INSTITUT NATIONAL
DE RECHERCHE
EN INFORMATIQUE
ET EN AUTOMATIQUE



centre de recherche
BORDEAUX - SUD-OUEST

Le coupleur LibMultiscale

Coupleur parallèle en C++

éléments finis : libmesh

dynamique moléculaire : Stamp (CEA) et Lammmps (Sandia)

Disponible à <http://libmultiscale.gforge.inria.fr/index.html>

Cluster d'opteron 2.2 Ghz interconnecté par un réseau Myrinet 2000.



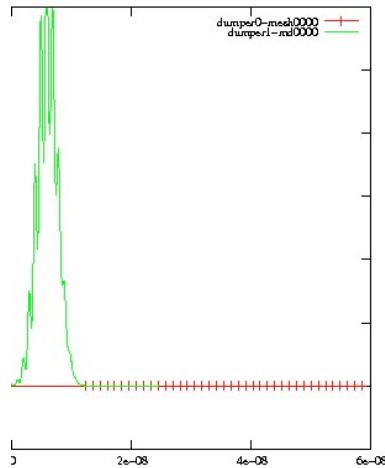
Absorption 1D

chaîne d'Argon : 210 atomes

Taille du recouvrement : 72 atomes

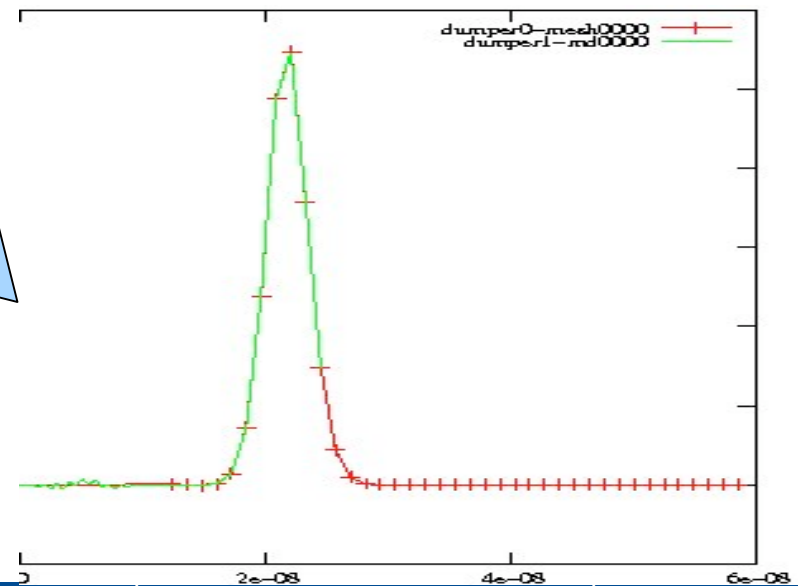
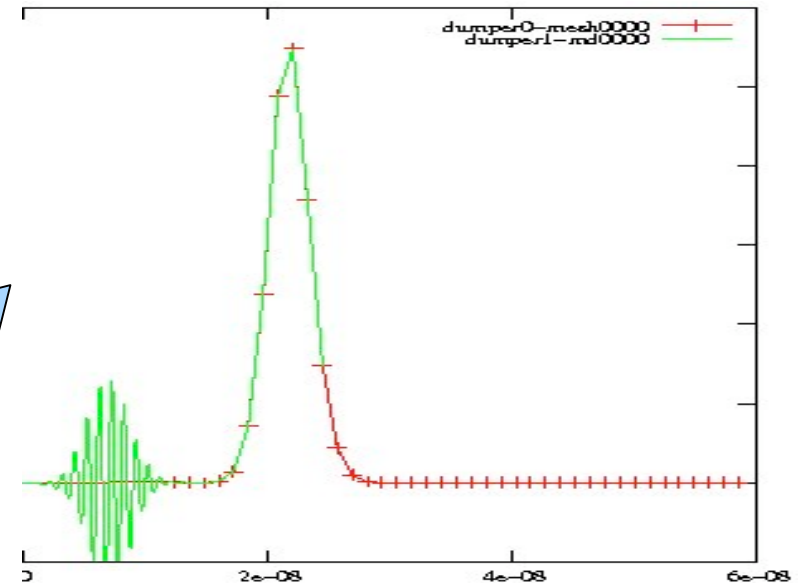
$$h = 6r_0$$

condition initiale



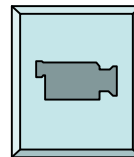
Couplage non adapté

Couplage adapté

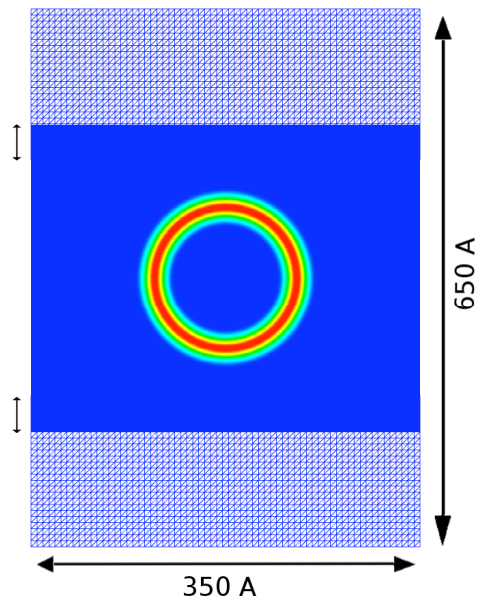


Impédance dépend de :

- Taille du recouvrement
- Taille d'un élément

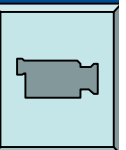
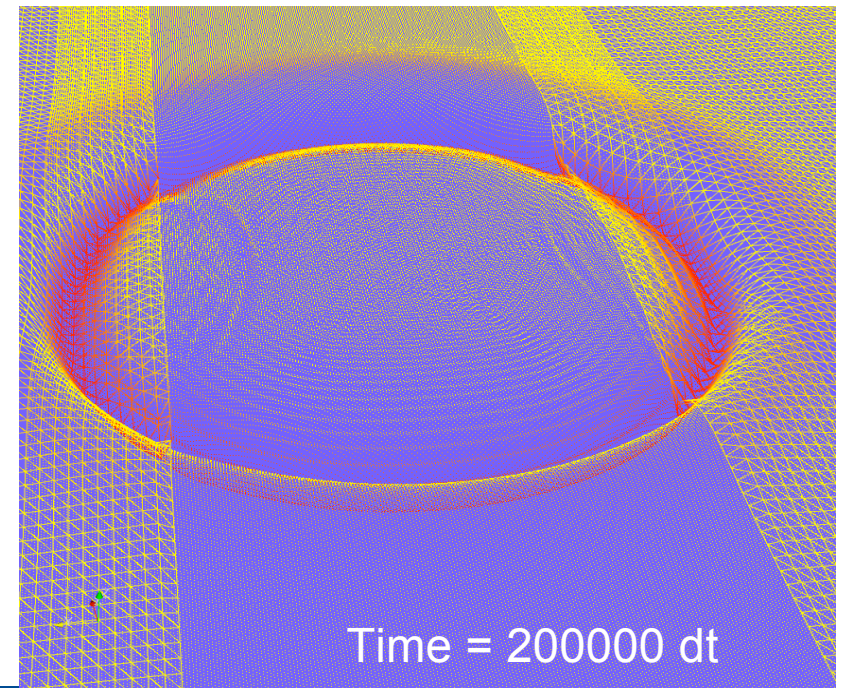
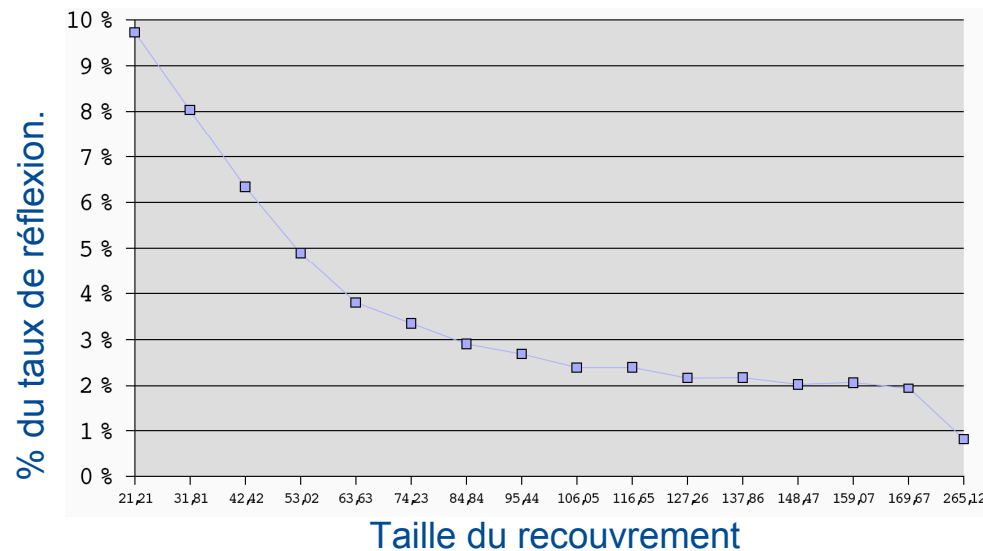


Modèle 2D : propagation d'ondes



Quelques nombres

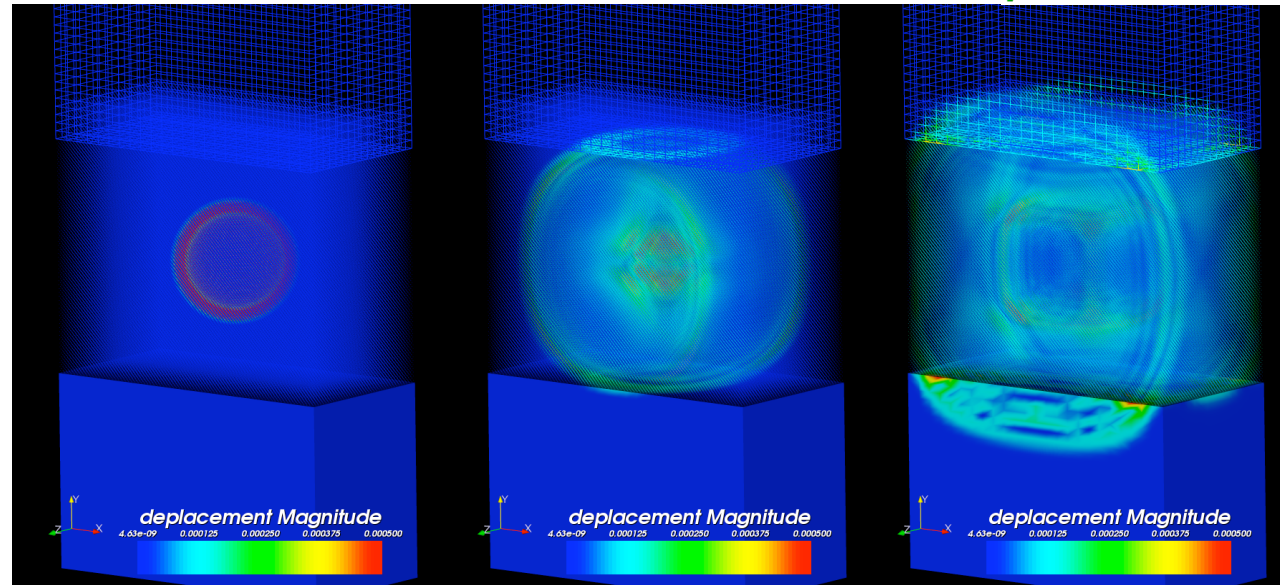
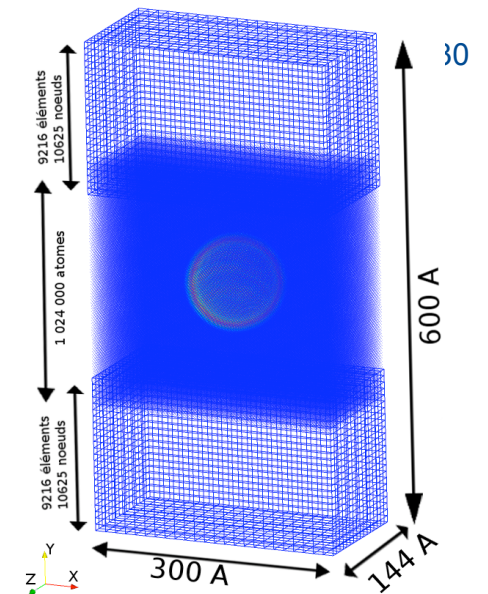
- Atomes : 296 400 (Lennard Jones)
- Éléments finis : 2x(1716 noeuds, 3250 éléments)
 - P1 élément, « Cauchy-Born rule »
- condition Initiale : Gaussienne
- 36 processeurs, 2 s par pas de temps



Propagations d'ondes 3D

Simulation

- Condition aux limites périodique en X et Y.
- Cristal de cuivre: 1 million atomes, 2x10 000 noeuds
- Difficilement accessible par une simulation tout atome
- 48 processeurs (32+16)



Commentaires

- les réflexions d'ondes sont limitées
- Influence des conditions périodiques en Y est trop forte => La zone MD doit être entourée par le domaine d'éléments finis.



Cristal 3D de cuivre

Taille du system

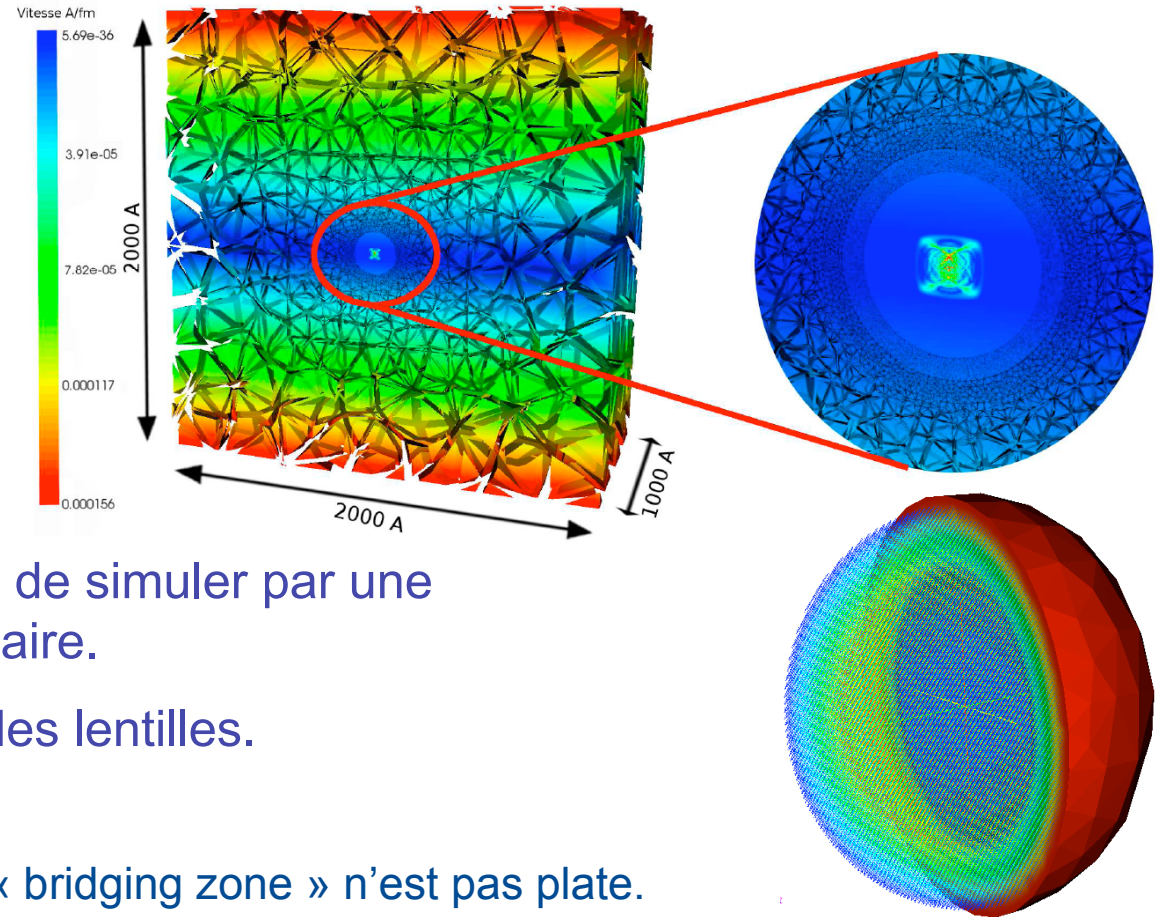
Boite $0.2 \times 0.1 \times 0.2 \mu\text{m}^3$

~ 2 800 000 atomes

~ 600 000 éléments,

~ 93 000 noeuds

Potentiel EAM



Très gros modèle, impossible de simuler par une approche dynamique moléculaire.

Presque la taille d'un défaut des lentilles.

Difficultés

- La frontière de la « bridging zone » n'est pas plate.
- Construire une condition initiale à l'équilibre.
- Nécessité de développer des outils pour trouver l'information pertinente
 - Ligne de dislocation, naissance d'une fissure, ...



Propagation d'une fissure dans un cristal d'Argon 2D

Description

Boite de 600nm x 800nm

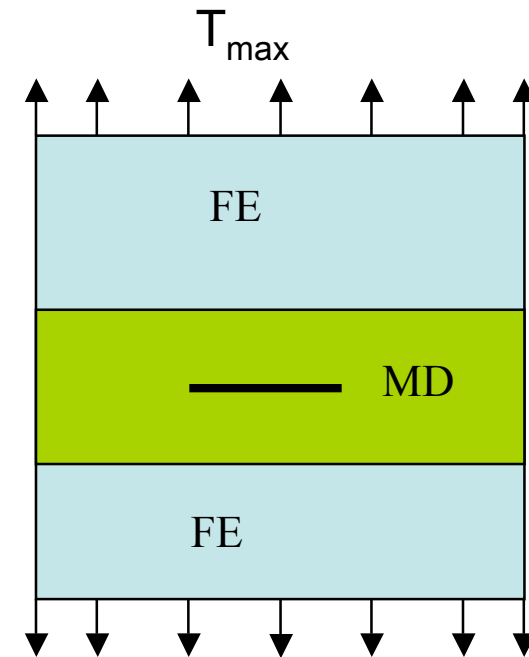
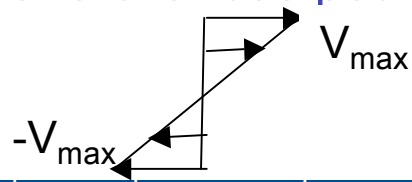
- 91 556 atomes (Lennard Jones)
- 1 129 noeuds, 2 082 éléments

Zone de recouvrement :

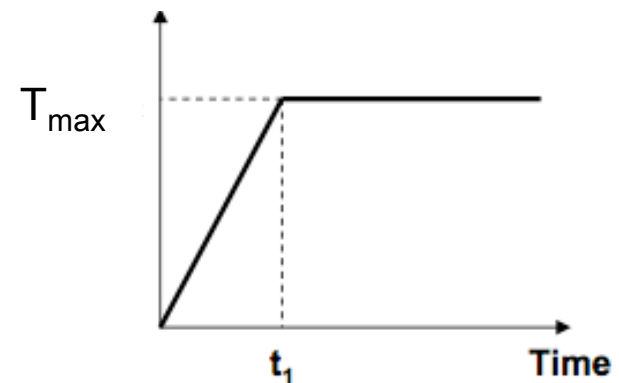
- 45 732 atomes (50% d'atomes)
- 912 noeuds et 1 582 éléments

Une pré fissure « Penny shaped » est créée en enlevant les atomes dans une ellipse 50Å x 2.5Å

Méthode de la matière lancée pour accélérer les calculs



Traction

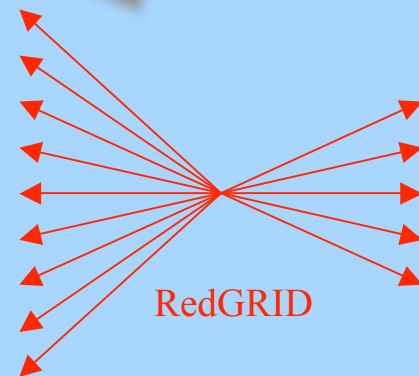


EPSN : A Computational Steering Environment for Numerical Simulations

Legacy Codes in
Astrophysics, Molecular
Dynamics, Fluid
Mechanics, ...



Parallel Simulation
(M processes)



Monitoring

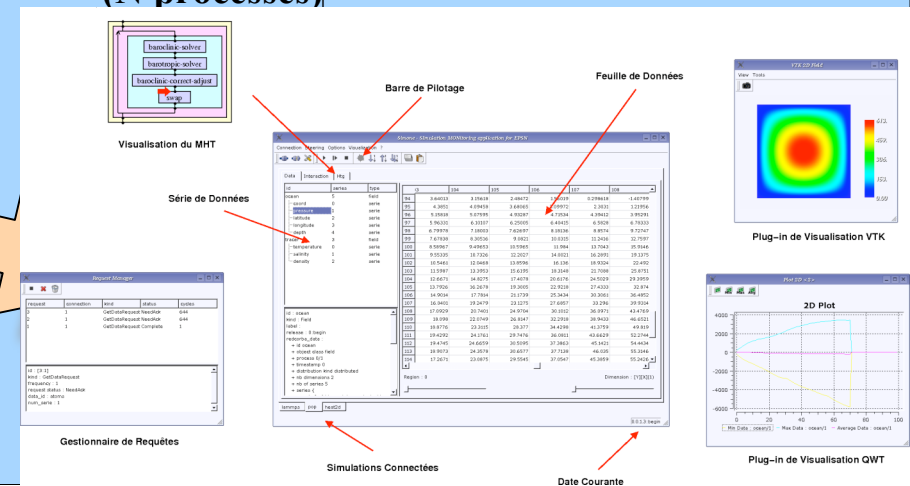


Parallel on-line
visualization of
intermediate results on
a tiled-display wall.

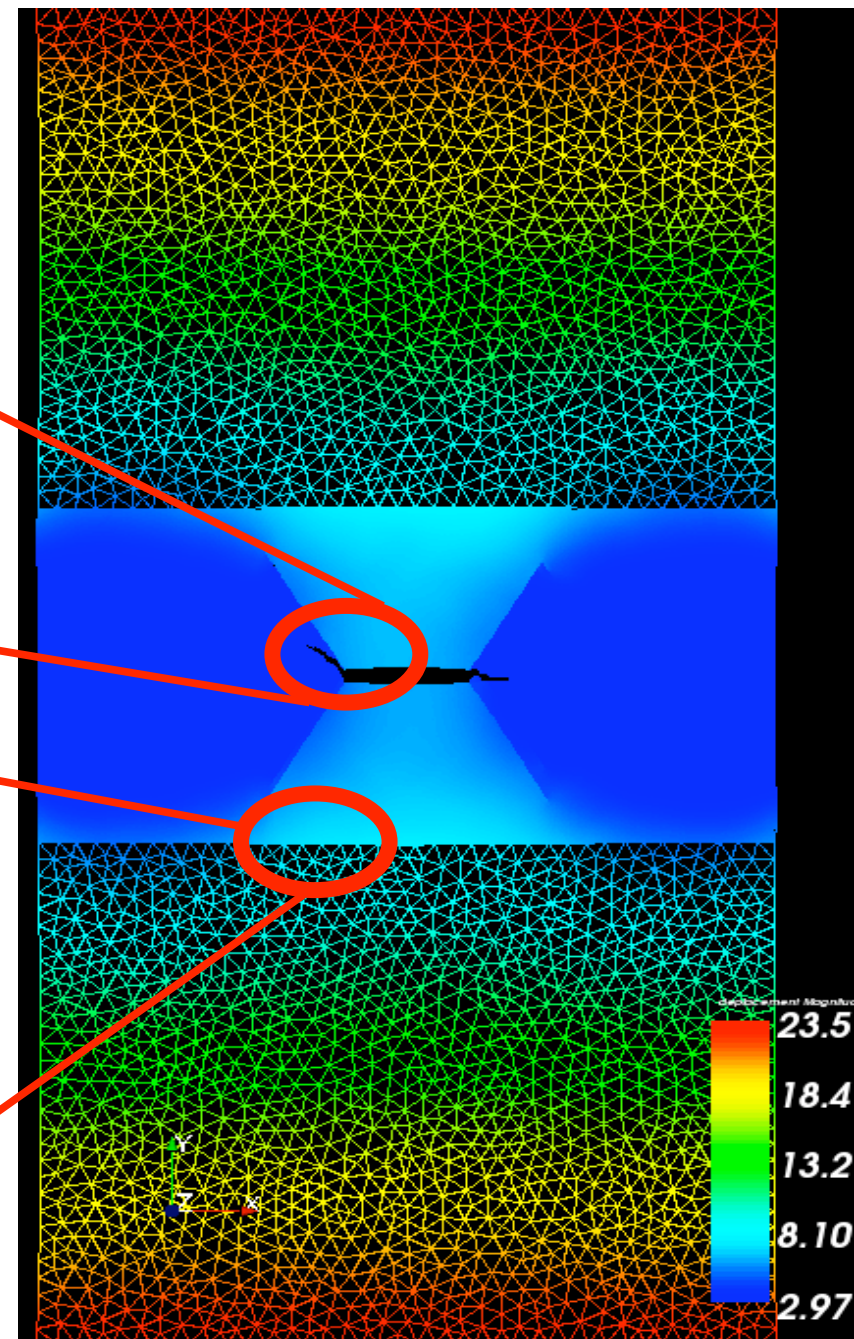
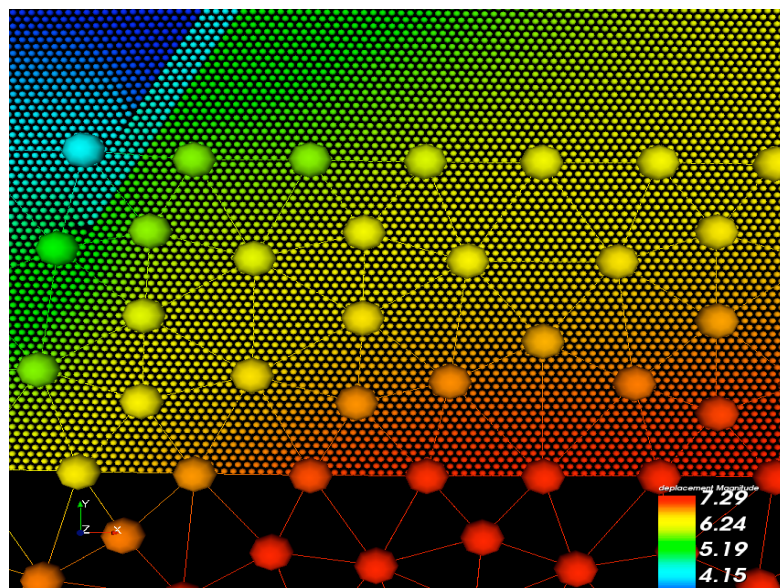
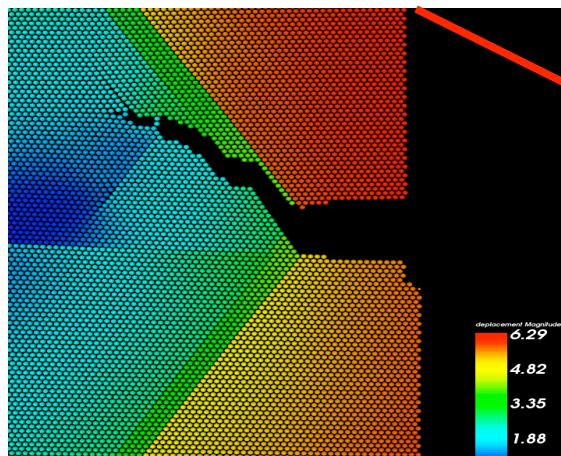


Parallel Visualization
(N processes)

Lightweight Steering & Monitoring



EPSN : Computational Steering Framework



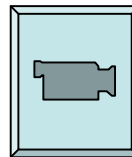
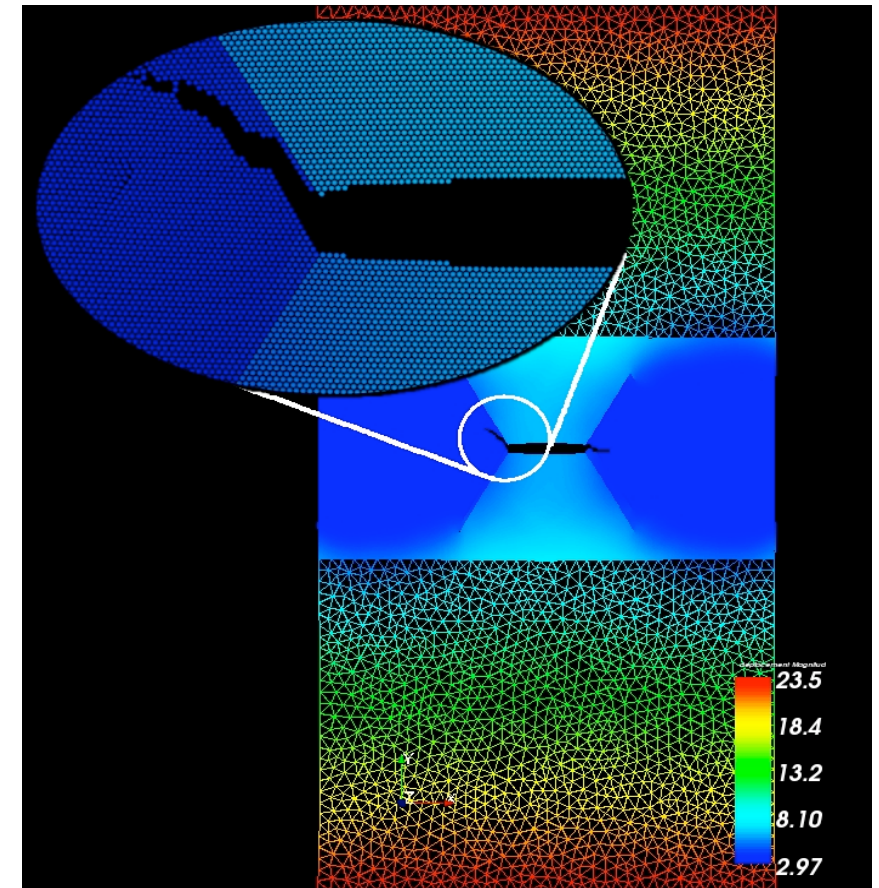
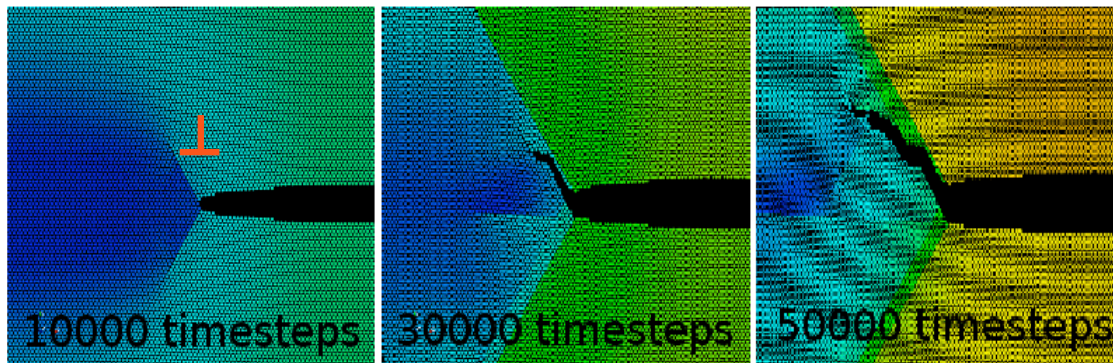
INSTITUT NATIONAL
DE RECHERCHE
EN INFORMATIQUE
ET EN AUTOMATIQUE



centre de recherche
BORDEAUX - SUD-OUEST

Propagation d'une fissure dans un cristal d'Argon 2D

35

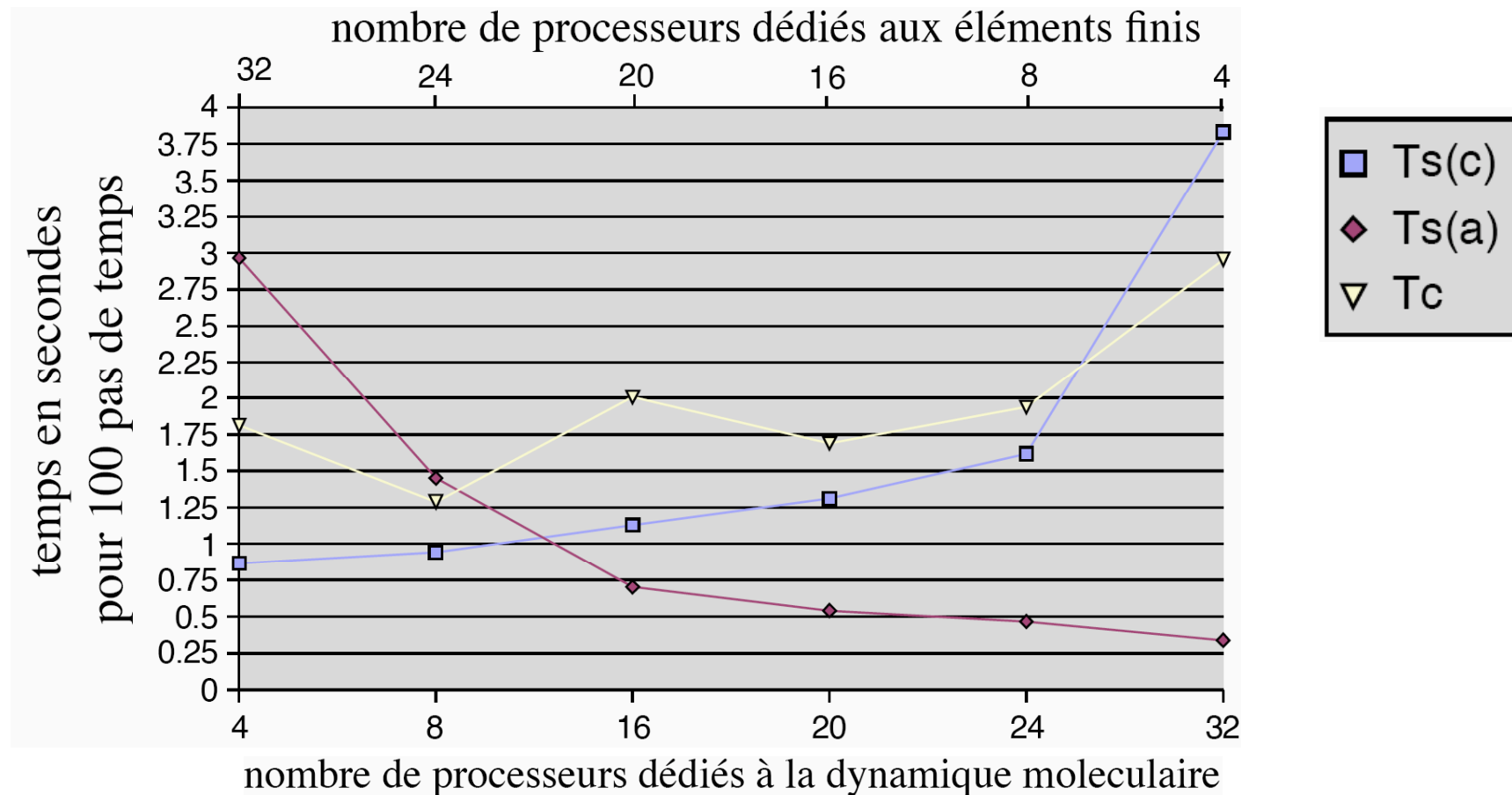


INSTITUT NATIONAL
DE RECHERCHE
EN INFORMATIQUE
ET EN AUTOMATIQUE

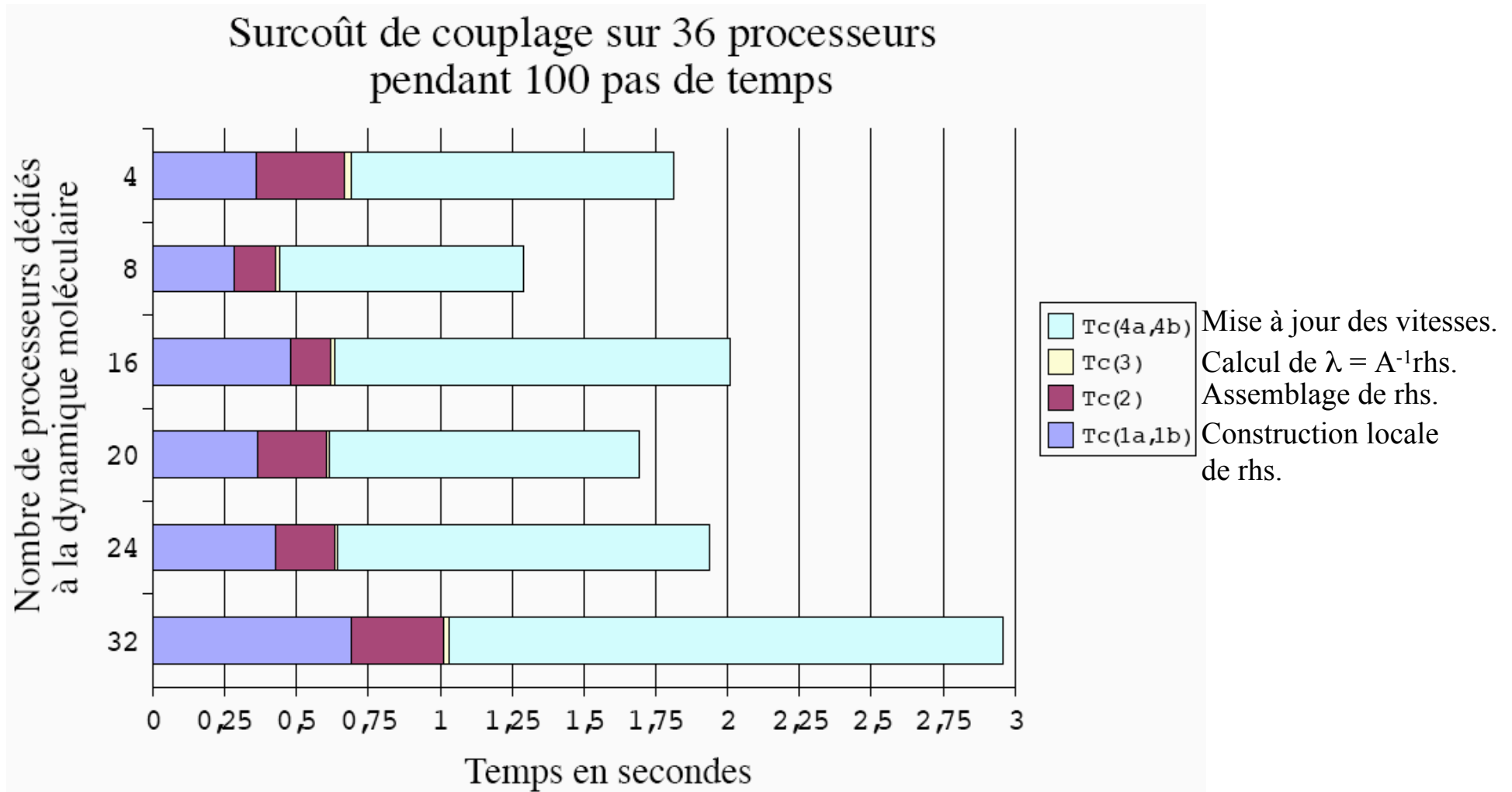


centre de recherche
BORDEAUX - SUD-OUEST

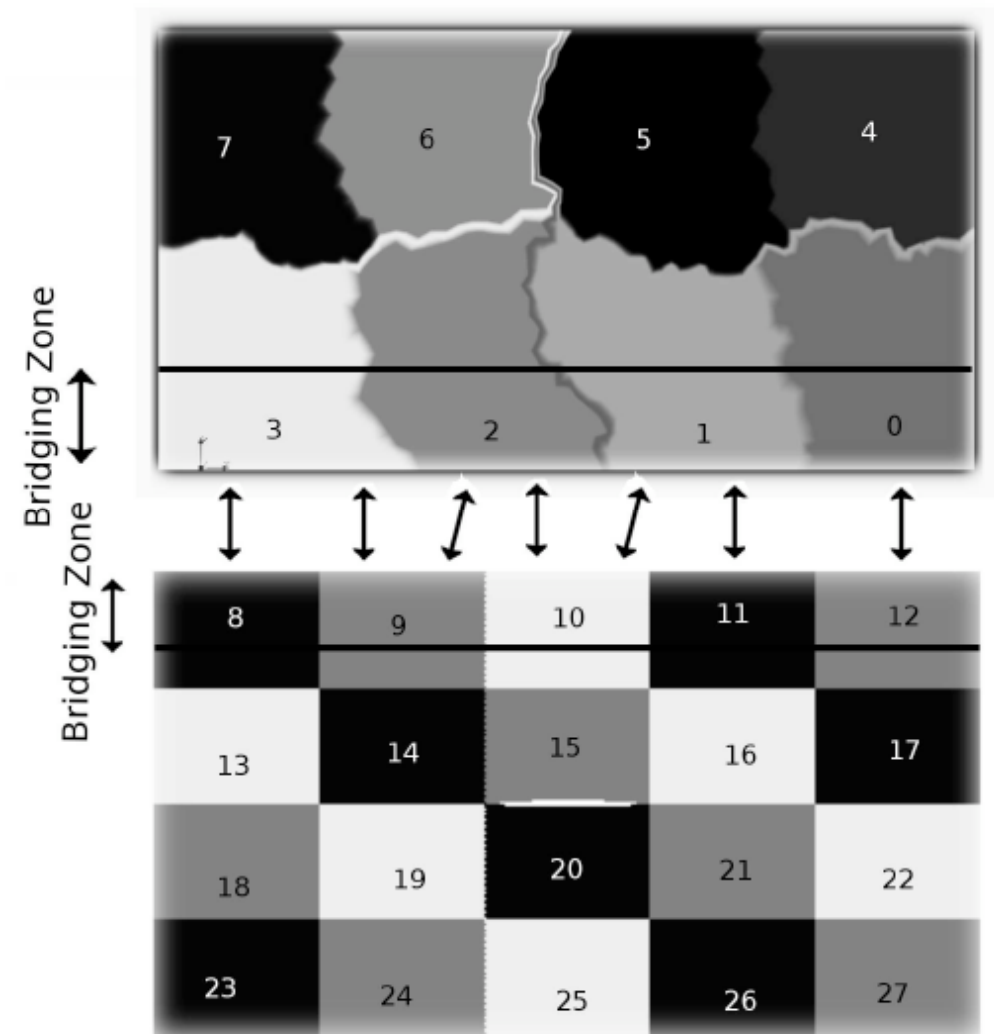
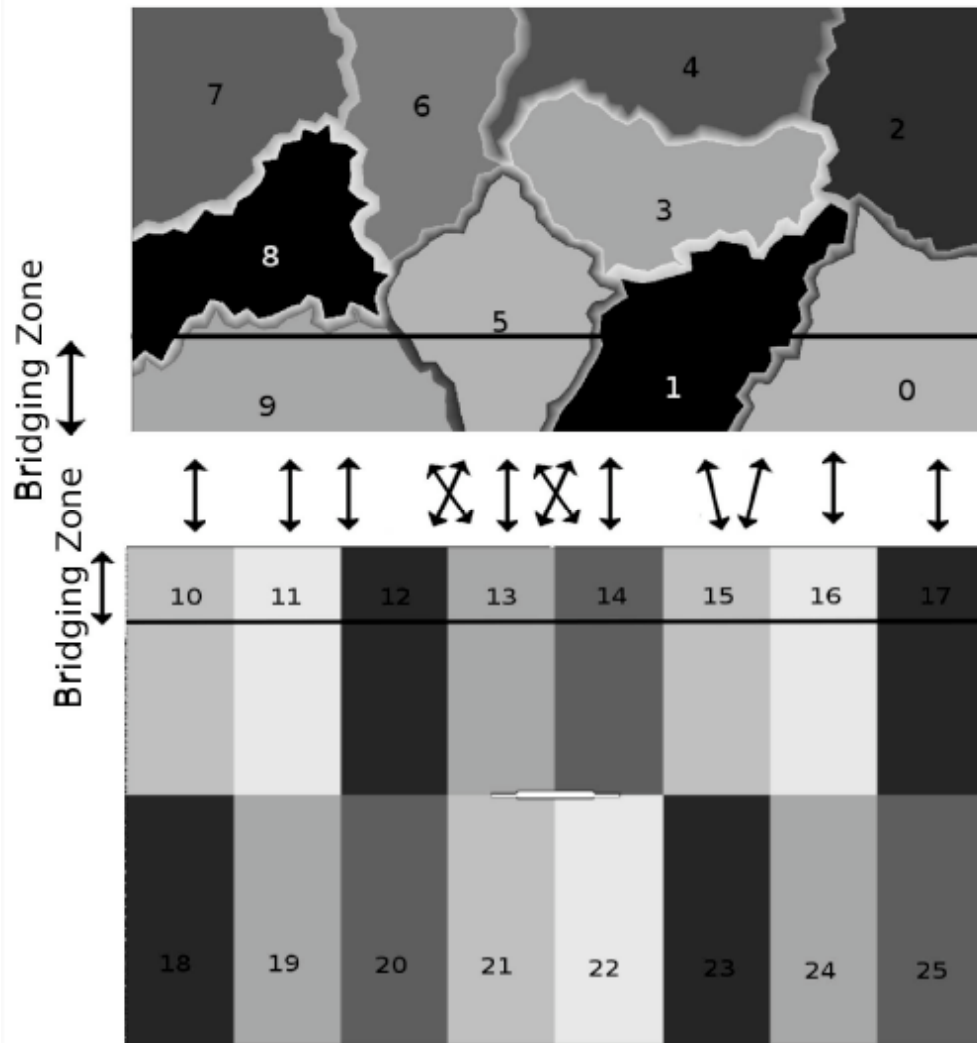
Temps de simulation des tâches sur 36 processeurs



Performance : propagation 2D (2)



Problème de partitionnement



Conclusions

Un modèle de couplage qui limite les réflexions d'onde

Une implémentation efficace

Des résultats intéressants en 2d et 3d

Modèle doit être enrichi

- Prise en compte des pas multiples $\Delta t_a \ll \Delta t_{ef}$
- Introduire la température
- Poly cristaux, amorphe (verre)

Accroître la parallélisme dans le coupleur.

