

DE LA RECHERCHE À L'INDUSTRIE



Paris - Saclay

www.cea.fr

AMITEX_FFT training

-

General

L. Gélébart

FFT-based methods

General introduction

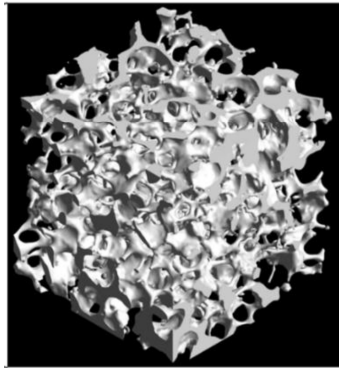
AMITEX specificities

Questions/answers in images

GENERAL INTRODUCTION

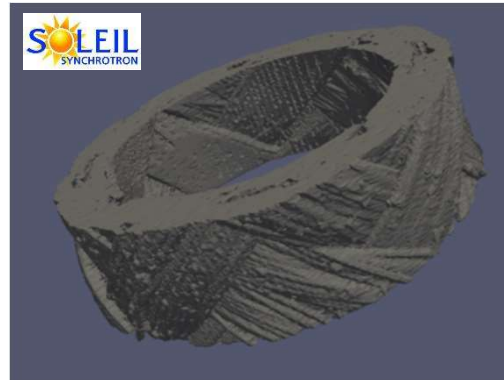
➤ Matériaux hétérogènes

☐ Céramique poreuse



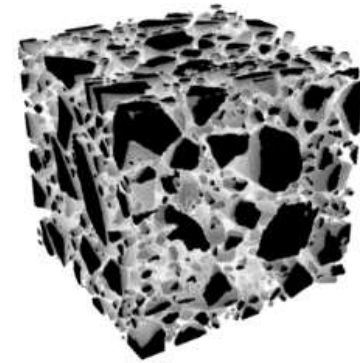
Ackermann & al. Materials 2014

☐ Tube Composite SiC/SiC



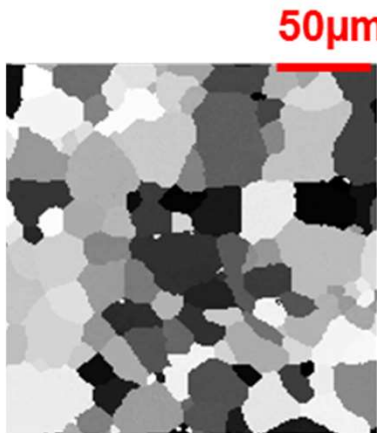
Thèse CHEN Y., CEA, ENPC, 2017

☐ Béton

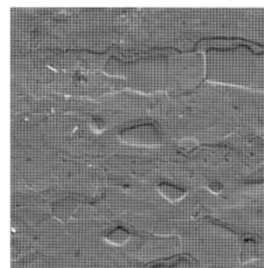


d'après F. Bernachy, CEA, 2017

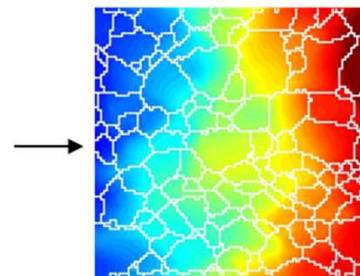
☐ Métaux polycristallins



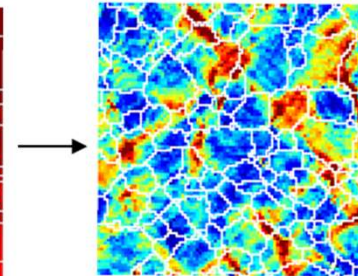
Thèse M. Dexet, CEA, LMS-X, 2006



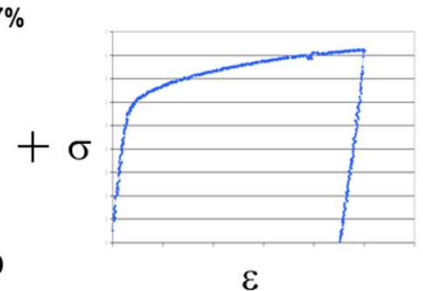
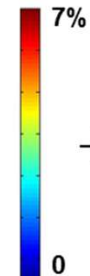
microgrille



champ de déplacement



champ de déformation
obtenu
expérimentalement

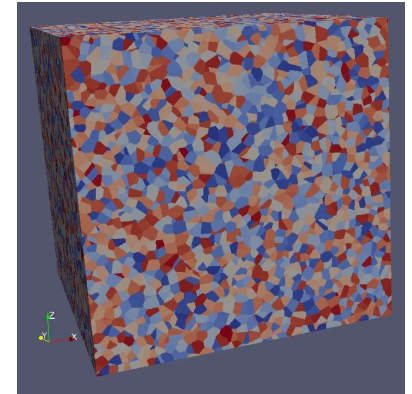


réponse mécanique
macroscopique

GENERAL INTRODUCTION

➤ Simulation de Matériaux hétérogènes

- Un Volume Élémentaire « Représentatif »
- Une Loi de Comportement pour chaque constituant
- Un Chargement « moyen » : traction uniaxiale par exemple
- Un type de Conditions aux Limites : **Périodique**, un des moins mauvais choix



➤ Tendances naturelles

- Augmentation de la résolution spatiale pour mieux décrire les champs locaux
- Augmenter la taille des VER (représentativité de matériaux complexes)
- Comportements à « bases physiques » de plus en plus complexes
- Vers le non-local, le multi-physiques, le couplage de code

➤ Solveurs EF standards

- Limites rapidement atteintes (taille et durée de calcul)



➤ Solveurs « FFT »

- Pas de maillage
- Beaucoup plus efficaces que solveurs EF standards
- Facile d'implémentation
- Bien adapté au Parallélisme => REPOUSSER LES LIMITES



GENERAL INTRODUCTION

➤ POINT FIXE sur LIPPMAN-SCHWINGER (Moulinec-Suquet 1994)

Problème à résoudre

$$\sigma(x) = c(x) : \varepsilon(x)$$

$$\operatorname{div}(\sigma(x)) = 0$$

$$\langle \varepsilon(u(x)) \rangle = E$$

+ periodicity + compatibility

$$\sigma(x) = c_0 : \varepsilon(x) + \underbrace{(c(x) - c_0) : \varepsilon(x)}_{\tau(x)}$$



Ré-écriture du problème

$$\sigma(x) = c_0 : \varepsilon(x) + \tau(x)$$

$$\tau(x) = (c(x) - c_0) : \varepsilon(x)$$

$$\operatorname{div}(\sigma(x)) = 0$$

$$\langle \varepsilon(u(x)) \rangle = E$$

+ periodicity + compatibility

Problème auxiliaire

$$\sigma(x) = c_0 : \varepsilon(x) + \tau(x)$$

$$\operatorname{div}(\sigma(x)) = 0$$

$$\langle \varepsilon(u(x)) \rangle = E$$

+ periodicity + compatibility



Solution du problème auxiliaire

$$\varepsilon(x) = -\Gamma_0 * \tau(x) + E$$

Applying the Green operator
Simple in Fourier space (FFT)
Mura 1997

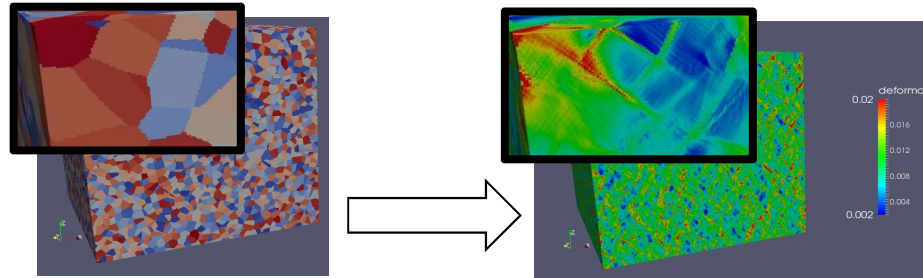
Moulinec-Suquet, 1994



$$\tau(x) = (c(x) - c_0) : \varepsilon(x)$$



AMITEX_FFTP SPECIFICITIES



➤ Parallélisme en Mémoire Distribuée (MPI)

➤ Modèles

- Mécanique Grandes Transformations
- Mécanique HPP
- Diffusion

➤ Algorithme

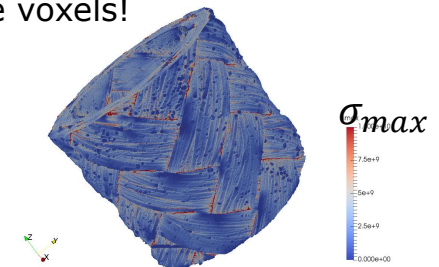
- Point fixe + accélération de convergence

➤ Comportement

- compatibilité umat => couplage **mfront**!
- Voxels « composites »

➤ Chargements variés (mécanique/diffusion + externe)

7 Milliards de voxels!



AMITEX_FFTP SPECIFICITIES

➤ Parallélisme en mémoire distribuée (2)

❑ Décomposition

- ✓ Décomposition 1D (en tranches)

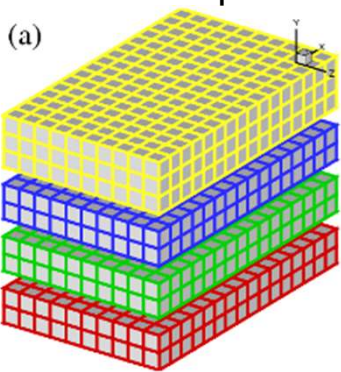


Image 1024^3
1024 processus max

Limite rapidement atteinte sur les machines actuelles et futures!

- ✓ Décomposition 2D (en pincesaux)

<http://www.2decomp.org/>

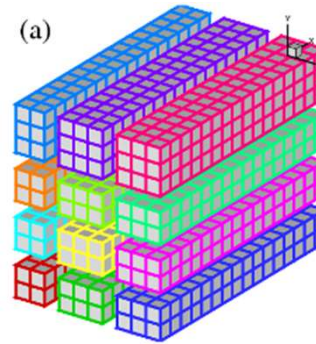


Image 1024^3
 1024^2 processus max

Limite repoussée !

❑ Résolution parallèle

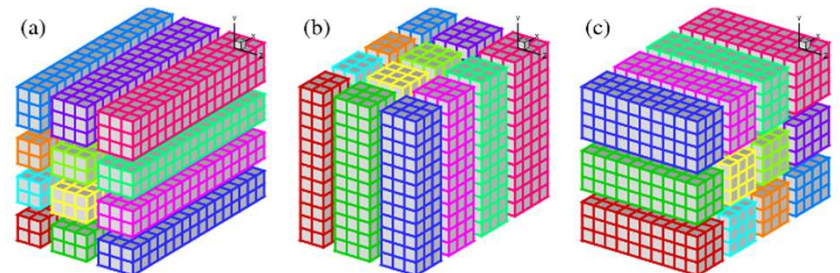
- Solveur // 'classique' : locale par domaine + interface entre domaines
- Solveur FFT : directement sur tout le domaine (passage dans le domaine fréquentiel)

❑ FFT 3D = succession de FFT 1D

<http://www.2decomp.org/>

Nécessité de transposer les données

- Communications (MPI_ALLTOALL)!
 - Librairie 2decomp



AMITEX_FFTP SPECIFICITIES

■ Scalabilité (faible)

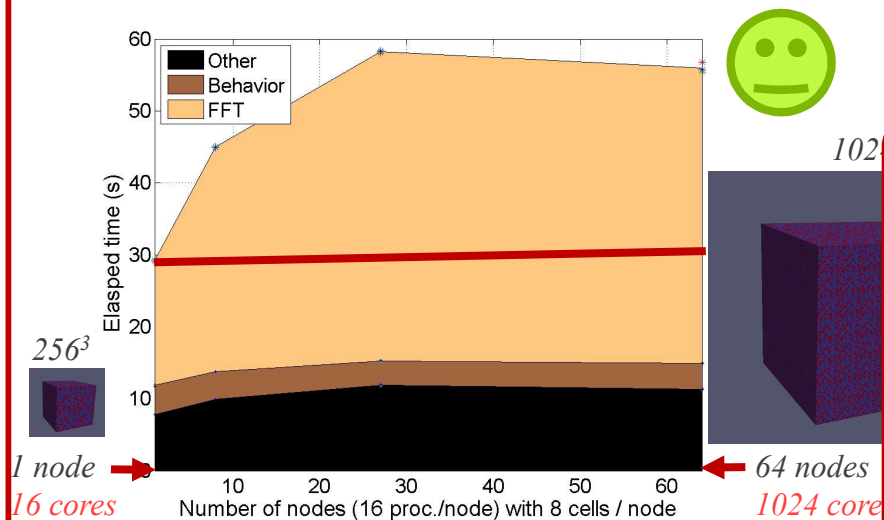
Nombre de noeuds = N , Taille du pb = $N \times K0$

Temps sur N noeuds : t_N

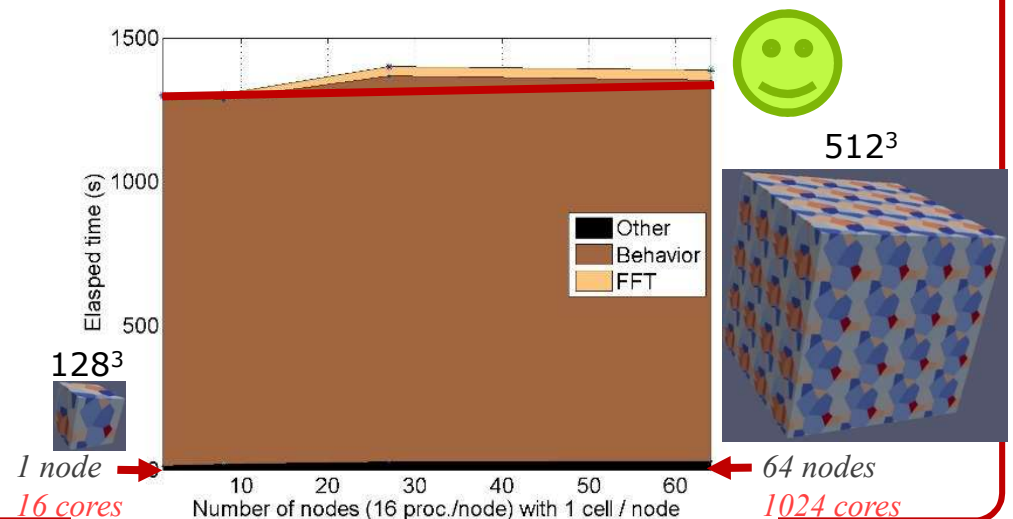
➤ Scalabilité parfaite: $t_N = t_1$

Cluster poincare (Maison de la Simulation)
16 cores (2x8) / node sandy bridge E5-2670

“light behavior” Elasticity



“heavy behavior” Crystal plasticity



AMITEX_FFTP SPECIFICITES

➤ Extension en grandes transformations

□ HPP

$$\left\{ \begin{array}{l} \operatorname{div}(\sigma) = 0 \\ \sigma = \sigma(\nabla u^{\text{sym}}) \\ u = \overline{\nabla u^{\text{sym}}} \cdot x + u^* \\ u^* \text{ périodique} \\ \sigma \cdot n \text{ \# périodique} \end{array} \right.$$

$$\begin{array}{l} \tau = \sigma(\nabla u^{\text{sym}}) - c_0 : \nabla u^{\text{sym}} \\ \nabla u^{\text{sym}} = -\Gamma_0 * \tau + \overline{\nabla u^{\text{sym}}} \end{array}$$

□ Grandes Transformations

Configuration Initiale

$$\left\{ \begin{array}{l} \operatorname{div}(\pi) = 0 \\ \pi = \pi(\nabla u) \\ u = \overline{\nabla u} \cdot X + u^* \\ u^* \text{ périodique} \\ \pi \cdot N \text{ \# périodique} \end{array} \right.$$

$$\begin{array}{l} \tau = \pi(\nabla u) - c_0 : \nabla u \\ \nabla u = -\Gamma_0^{GT} * \tau + \overline{\nabla u} \end{array}$$

➤ Algorithmes IDENTIQUES : UNIQUE implémentation

$$\sigma \leftrightarrow \pi$$

$$\nabla u^{\text{sym}} \leftrightarrow \nabla u$$

$$\Gamma_0 \leftrightarrow \Gamma_0^{GT}$$

AMITEX_FFTP SPECIFICITIES

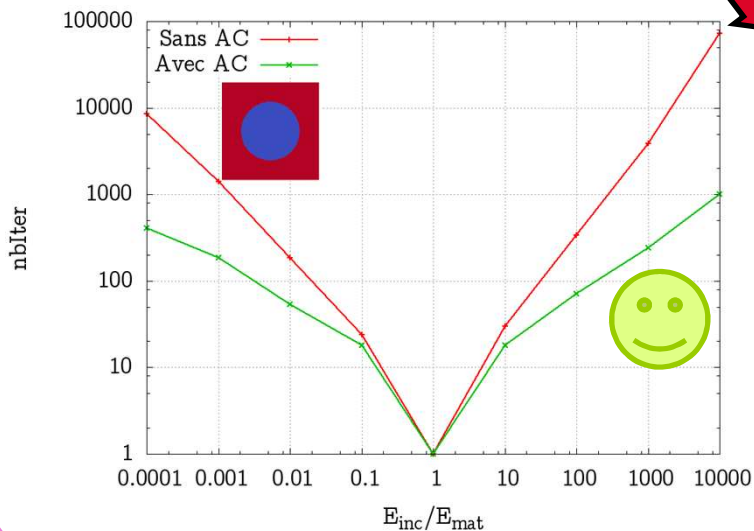
➤ Accélération de Convergence (© CAST3M) du POINT FIXE(1)

$$\begin{aligned}\tau^i &= \sigma^i - C_0 : \varepsilon^i \\ \varepsilon^{i+1} &= -\Gamma_0 * \tau^i + E\end{aligned}$$

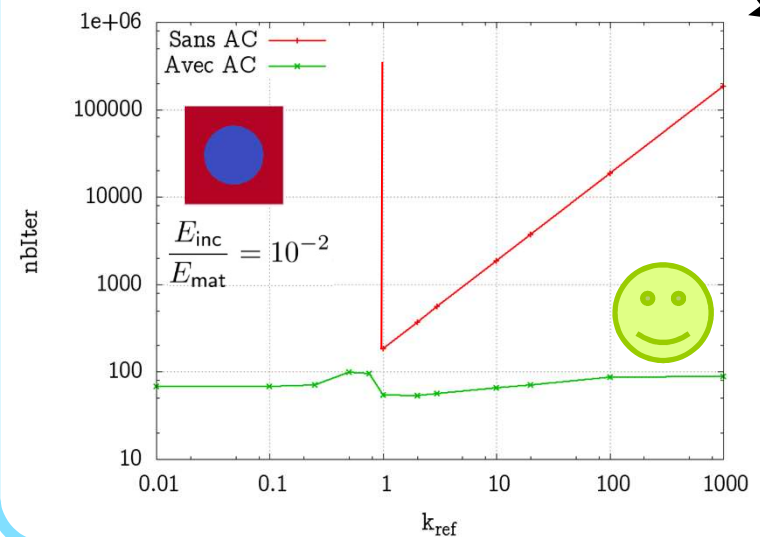
If $i + 1 \equiv 0[3]$ $\varepsilon^{i+1} = \sigma(\varepsilon^k, \varepsilon^{k+1} - \varepsilon^k \mid k = i, \dots, i - 3)$
 $\sigma^{i+1} = c(\varepsilon^{i+1})$

- Mémoire : 4 couples (Résidu/Solution) stockés ☹️
- Efficacité! 😊
- Pas de comportement tangent à évaluer! 😊

Sensibilité au contraste mécanique



Sensibilité au Matériau de Référence



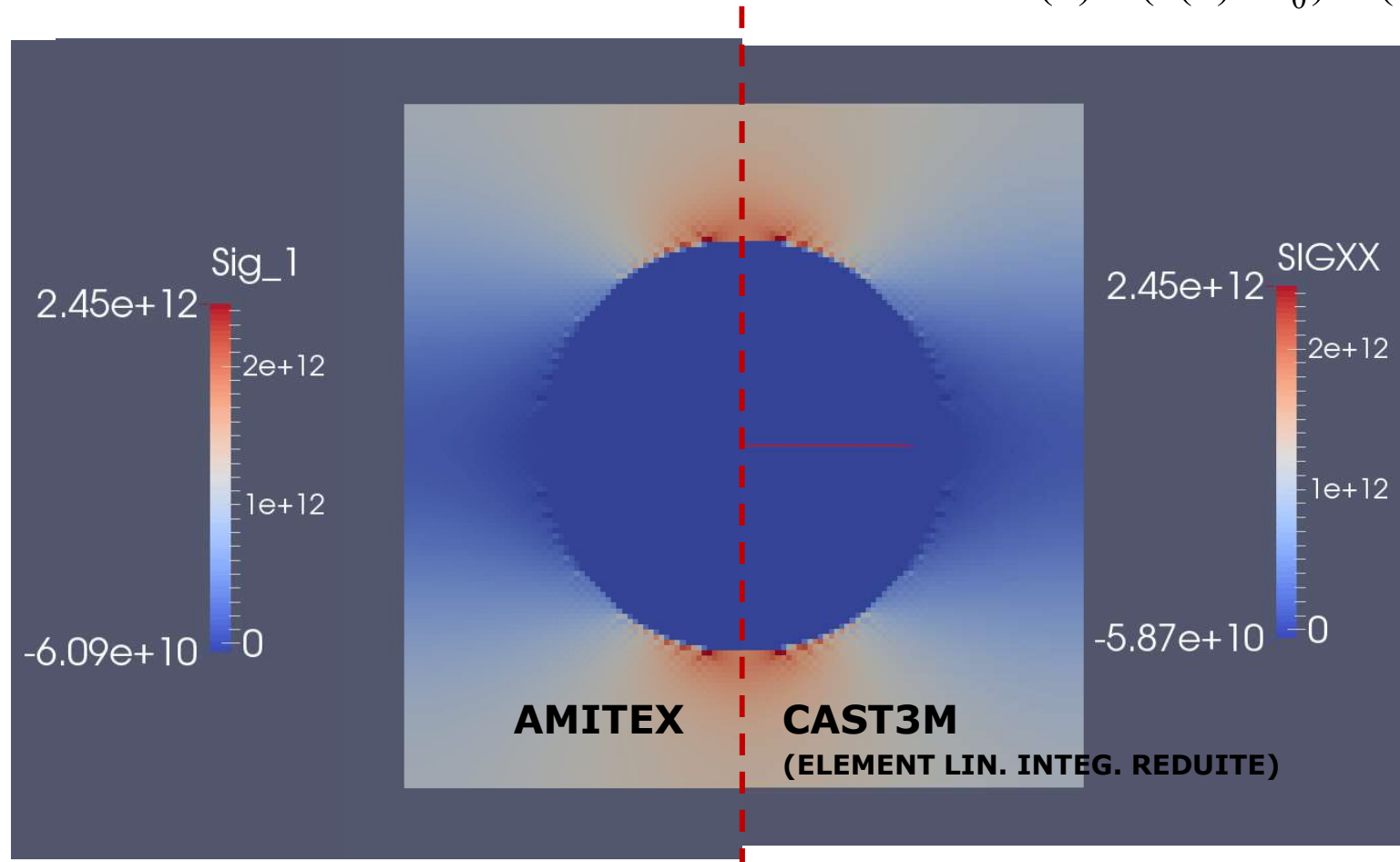
QUESTIONS – ANSWERS WITH IMAGES

- Quelle différence avec les différences finies et éléments-finis?

➡ **Potentiellement* AUCUNE**

* : adapter l'opérateur de Green discret à l'EF/DF

$$\begin{aligned} \varepsilon(x) &= -(\Gamma_0)^* \tau(x) + E \\ \tau(x) &= (c(x) - c_0) : \varepsilon(x) \end{aligned}$$



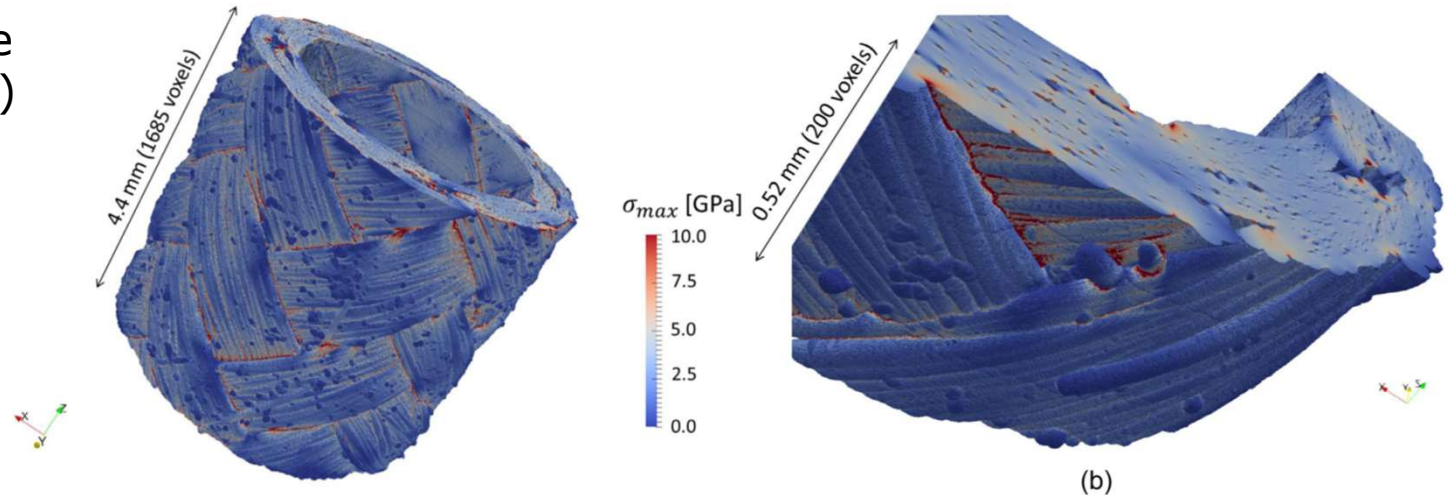
QUESTIONS – ANSWERS WITH IMAGES

■ Peut-on s'affranchir des CL périodiques? ➔

Oui, partiellement

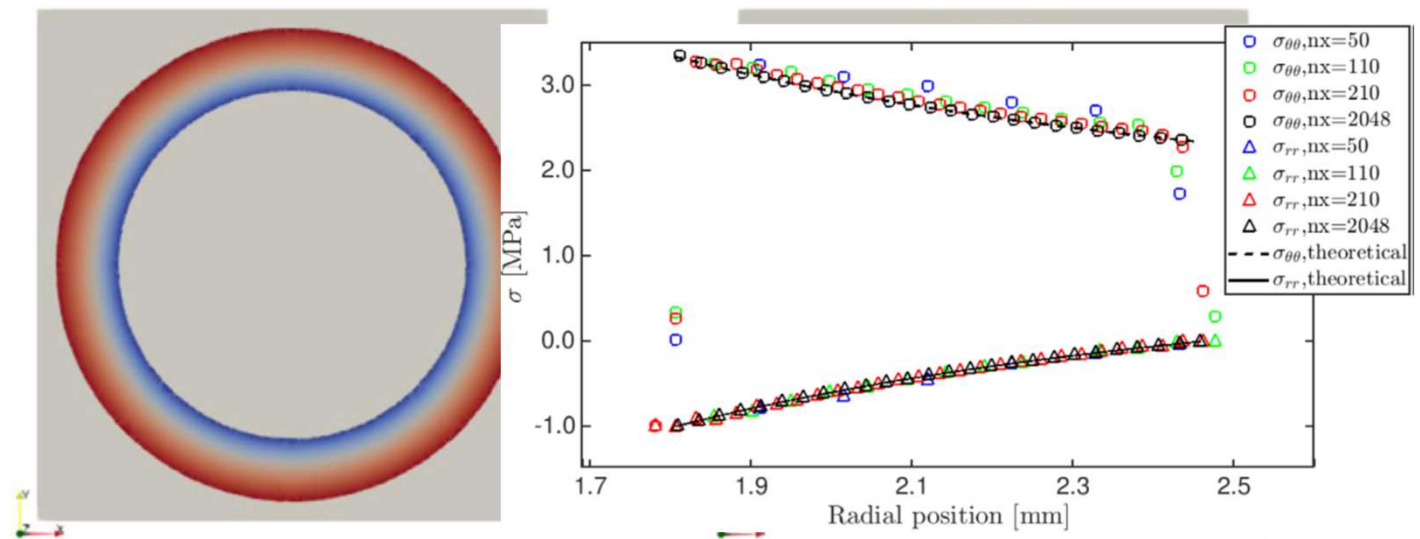
Traction sur tube
SiC/SiC (tomo X)

Thèse Y. Chen



Pression interne sur
tube

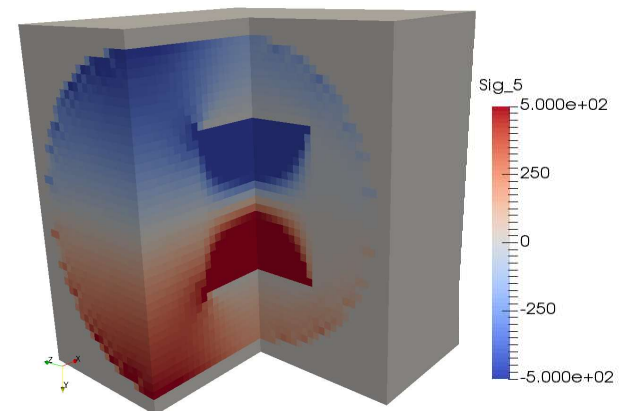
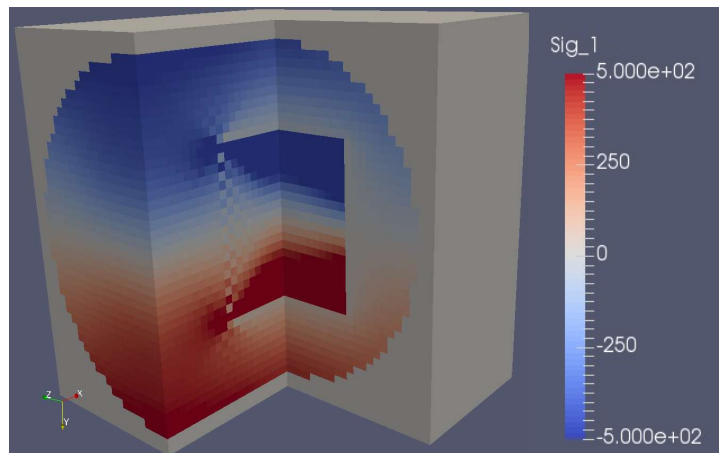
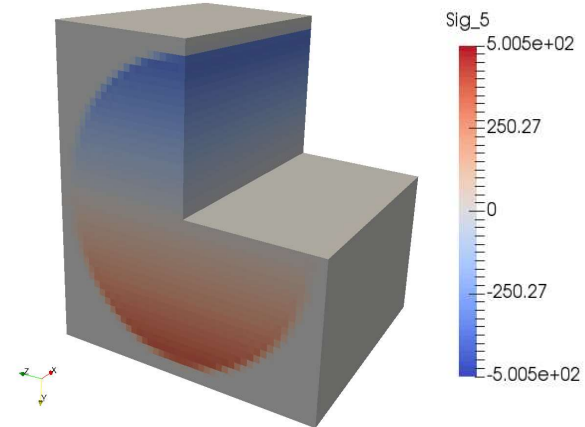
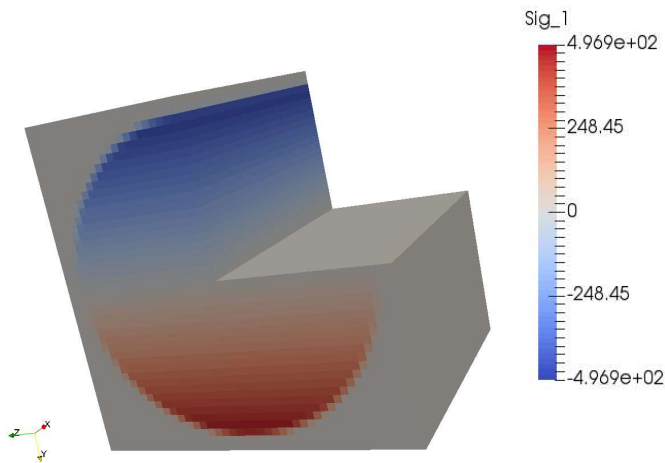
Thèse Y. Chen



QUESTIONS – ANSWERS WITH IMAGES

■ Et de la flexion, torsion, de plaque, poutre

➔ Oui

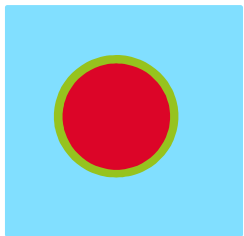


To be published...

QUESTIONS – ANSWERS WITH IMAGES

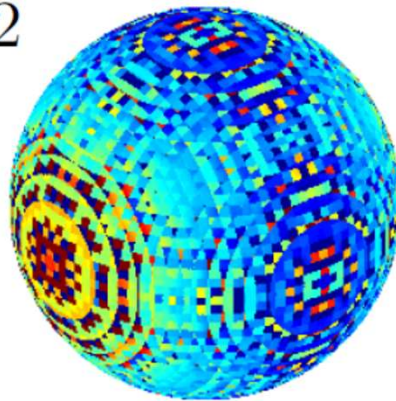
■ Peut-on évaluer des contraintes aux interfaces ? ➔ **Oui si, voxels composites**

✓ Application Mousse Syntactique (thèse R. Charière)

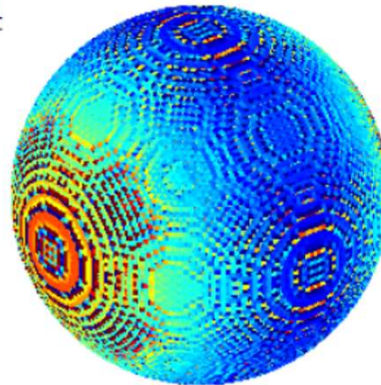


$E_{vide} = 0 \text{ GPa}$
 $E_{verre} = 69 \text{ GPa}$
 $E_{poly} = 1 \text{ GPa}$

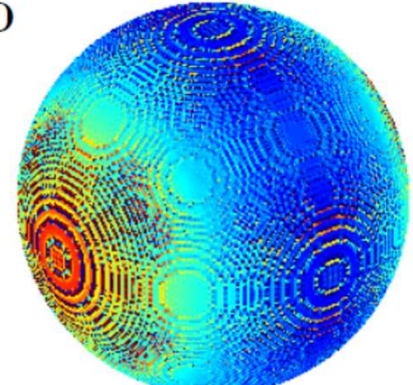
2



4

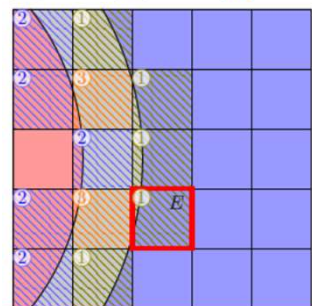


6

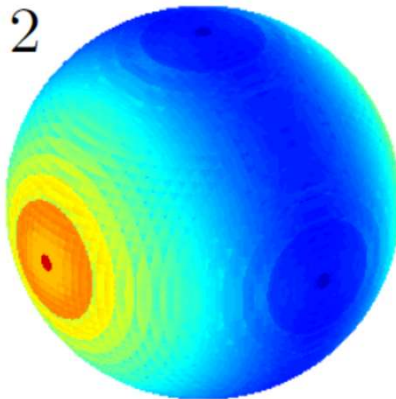


AVEC VOXELS COMPOSITES

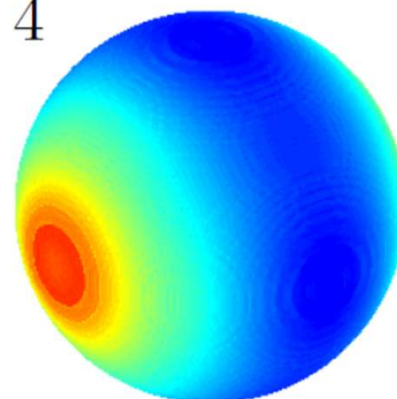
MS : MS SG : SG MSG : MSG



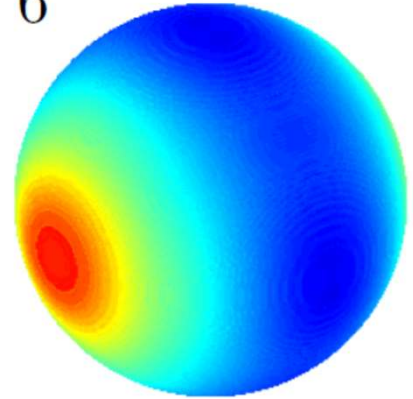
2



4



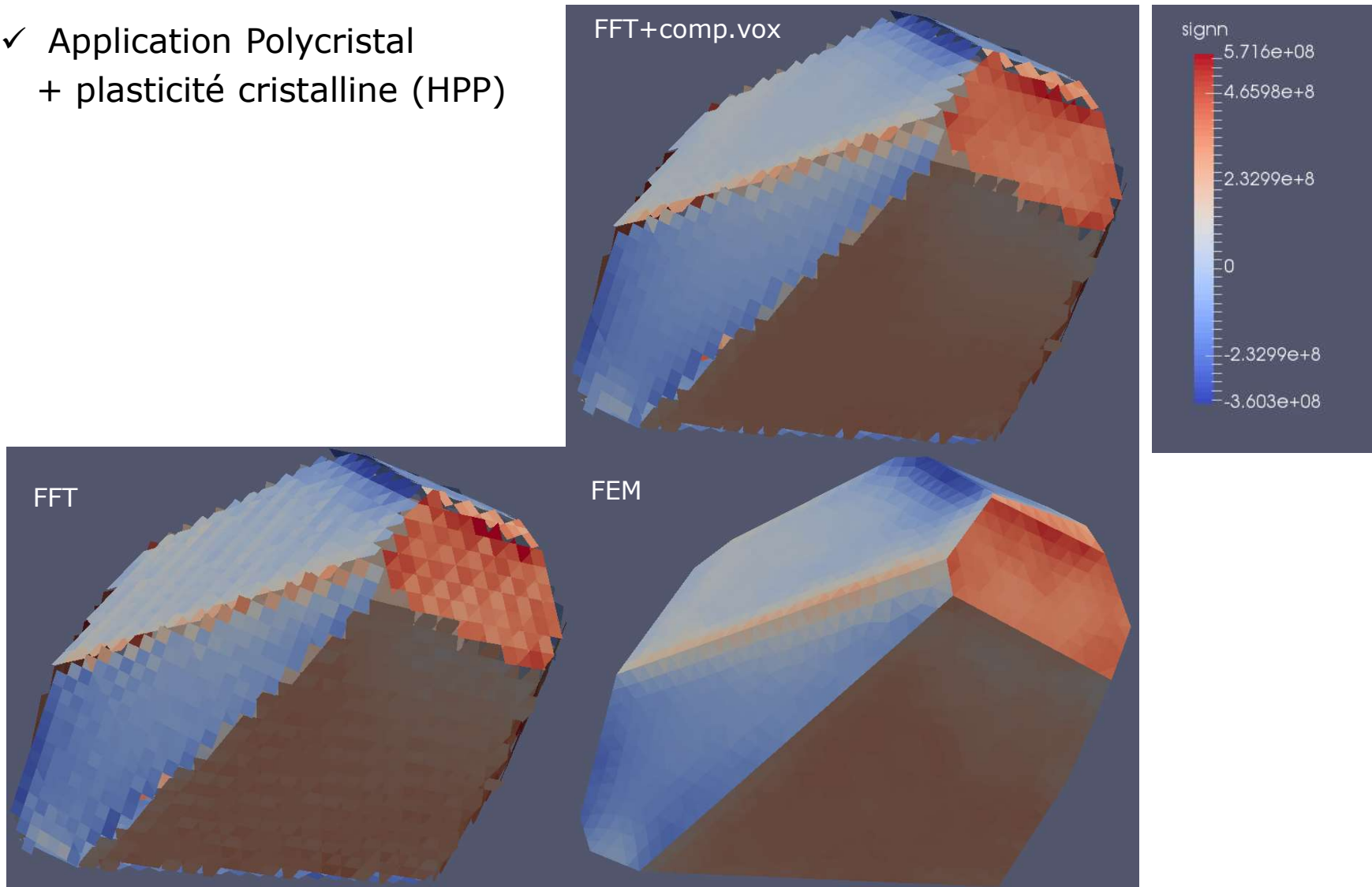
6



QUESTIONS – ANSWERS WITH IMAGES

■ Peut-on évaluer des contraintes aux interfaces ? ➔ **Oui si, voxels composites**

- ✓ Application Polycrystal
+ plasticité cristalline (HPP)



VARIOUS QUESTIONS

Criteria

Average strain component	⇒	Exact (imposed)
Strain field compatibility	⇒	Exact (imposed)
Average stress component	⇒	Relative tolerance (default is 10^{-4})
Stress field equilibrium	⇒	Relative tolerance (default is 10^{-4})

Reference material Co ?

Convergence rate is affected by Co

With Convergence Acceleration the effect is lowered

A « good » choice for Co : $Xo = (\min(X) + \max(X))/2$ (with $X = \lambda$ or μ)

-> but in case of convergence issue, keep in mind that it can be optimized...

Solution (stress/strain fields) is not affected (up to the tolerance)

ANNEXES

➤ Parallélisme en mémoire distribuée (1)

$$\varepsilon^0(x) = E$$

$$\tau^k(x) = \sigma(\varepsilon^k(x)) - c_0 : \varepsilon^k(x)$$

$$\tau^k(x) \rightarrow \hat{\tau}^k(\xi)$$

$$\hat{\varepsilon}^{k+1}(\xi) = -\hat{\Gamma}_0(\xi) : \hat{\tau}^k(\xi) \quad \hat{\varepsilon}^{k+1}(0) = E$$

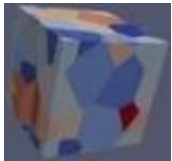
$$\hat{\varepsilon}^{k+1}(\xi) \rightarrow \varepsilon^{k+1}(x)$$

Parallélisme en
mémoire distribuée
(MPI)

- Comportement : « local » dans l'espace réel
- Opérateur de Green : « local » dans l'espace de Fourier
- FFT & iFFT : « non-local »



■ Scalabilité (2) : comportements « lourds »



- ✓ Polycrystal (voronoï), *dislocation-based Crystal Plasticity (49 var.int.)*, HPP
- ✓ Cluster poincare (Maison de la Simulation) 16 cores (2x8) / node sandy bridge E5-2670

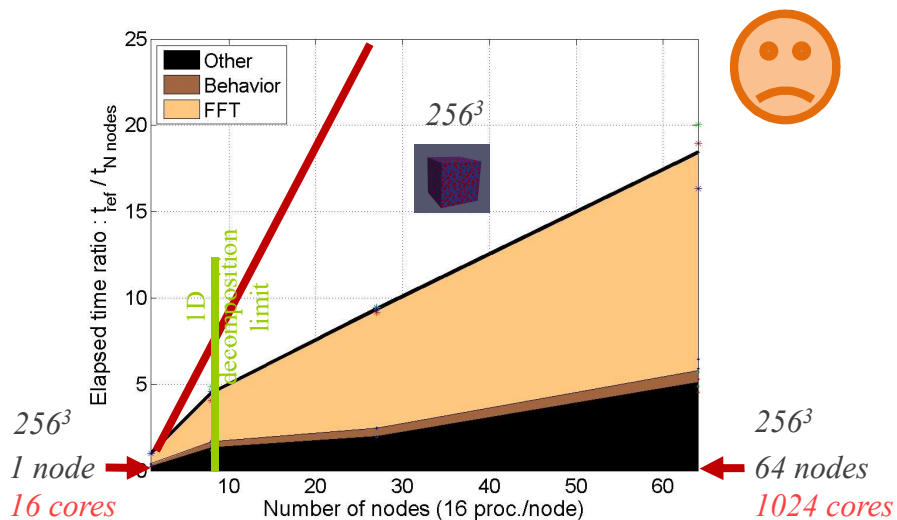
➤ Strong scalability

Number of nodes = **N**, Problem size = **K0**

Elapsed time on 1 node : t_{ref}

Elapsed time on N nodes : t_N

IDEALLY : $t_{ref} / t_N = N$



➤ Strong scalability

Number of nodes = **N**, Problem size = **K0**

Elapsed time on 1 node : t_{ref}

Elapsed time on N nodes : t_N

IDEALLY : $t_{ref} / t_N = N$

