



Cemef

Centre de Mise en Forme des Matériaux



■ ■ ■

Approche multi-échelles et multi-physiques:
nouveaux défis de la simulation numérique
des procédés de mise en forme et des
traitements associés.

[Elisabeth Massoni](#), Elie Hachem, Michel Bellet, Pierre-Olivier Bouchard,
Marc Bernacki



Cemef

- 160 Personnes
- 60 Permanents (1/2 chercheurs)
- 70 Doctorants
- 20 Post-doctorants
- 10 Mastères spécialisés



Plan

- Introduction
- Interaction Fluide-Structure – Approche dite « Level Set »
- La compaction isostatique à chaud
- Méthodologie « Level Set » pour simuler la croissance de grain
- Analyse multi-échelle –endommagement-refermeture de porosité
- Conclusions



Cemef

Centre de Mise en Forme des Matériaux



Interaction Fluide-Structure Approche dite « Level Set »

OU

Maillage monolithique ou Volumes immergés

Elie Hachem

L'idée de base des méthodes de volumes immergés

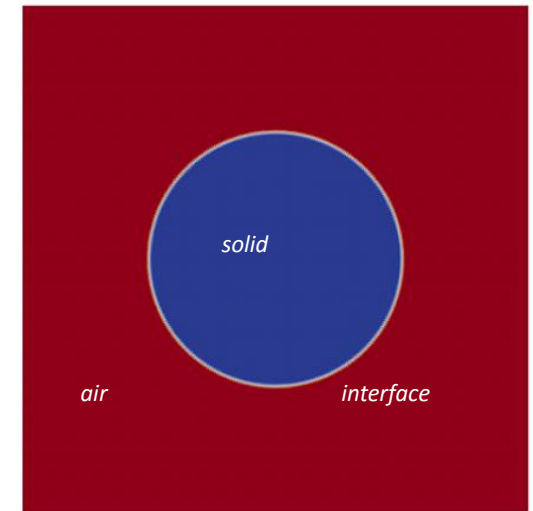
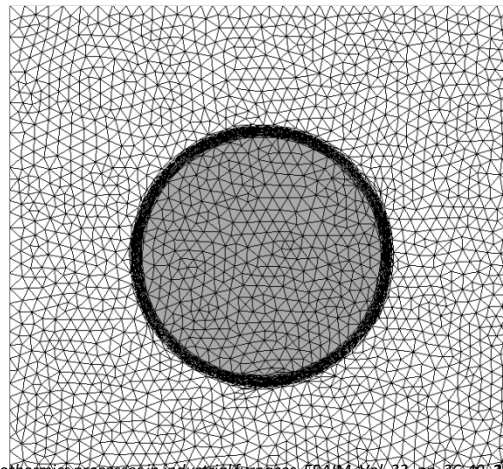
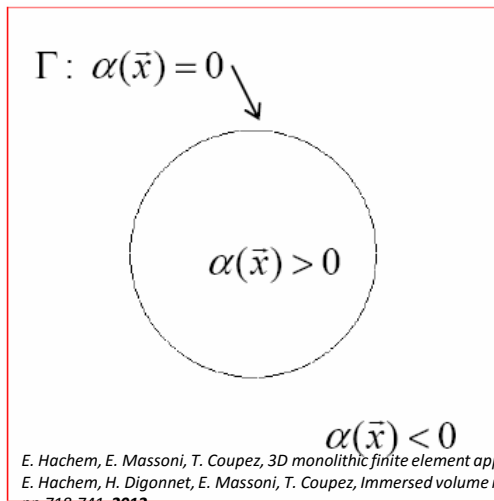
- ✓ On calcule une fonction distance → analytique, maillage surfacique STL, NURBS (≈B-spines), fichier IGES, etc...
- ✓ On signe ensuite cette fonction: positive à l'intérieur et négative à l'extérieur
- ✓ On applique ensuite une adaptation de maillage anisotrope en utilisant le gradient de cette fonction "level set"
- ✓ On utilise cette fonction pour moyenner les propriétés des différents domaines

$$\alpha(\mathbf{x}) = \pm d(\mathbf{x}, \Gamma_{\text{im}}), \mathbf{x} \in \Omega, H_\varepsilon(\alpha) = \begin{cases} 1 & \text{if } \alpha > \varepsilon \\ \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\alpha}{\varepsilon} + \frac{1}{\pi} \sin\left(\frac{\pi\alpha}{\varepsilon}\right) \right) & \text{if } |\alpha| \leq \varepsilon \\ 0 & \text{if } \alpha < -\varepsilon \end{cases}$$

$$\Gamma_{\text{im}} = \{\mathbf{x}, \alpha(\mathbf{x}) = 0\}.$$

$$\rho = H(\alpha)\rho_s + (1 - H(\alpha))\rho_f$$

$$\eta = H(\alpha)\eta_s + (1 - H(\alpha))\eta_f$$



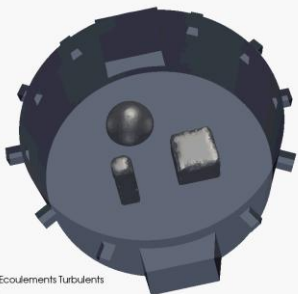
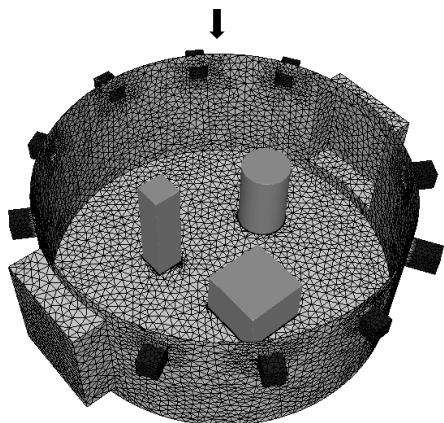
E. Hachem, E. Massoni, T. Coupez, 3D monolithic finite element approach for aerothermics processes in industrial furnaces, *ESAIM*, Vol. 33, pp. 36-49, 2011

E. Hachem, H. Digonnet, E. Massoni, T. Coupez, Immersed volume method for solving natural convection, conduction and radiation of a hot-shaped disk inside a 3D enclosure, *International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow*, Vol. 22 (6), pp.718-741, 2012

E. Hachem, G. Jannoun, J. Veyssset, M. Henri, R. Pierrot, I. Poitroult, E. Massoni, T. Coupez, Modeling of heat transfer and turbulent flows inside industrial furnaces, *Simulation Modelling Practice and Theory*, Vol. 30, pp. 35-53, 2013

Applications industrielles: plateforme THOST

Aubert & Duval



Transfer Thermique et Ecoulements Turbulents dans un four industriel
CmLib 2010

Industeel

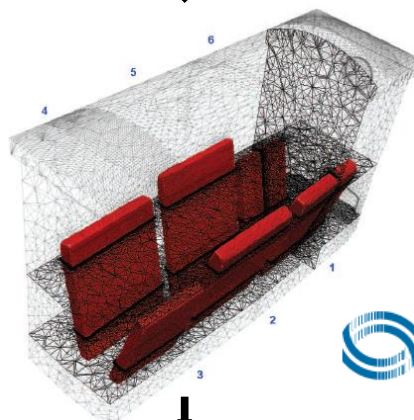


Cemef
CENTRE DE MISE EN FORME
DES MATERIAUX

**SCIENCES
COMPUTERS
CONSULTANTS**

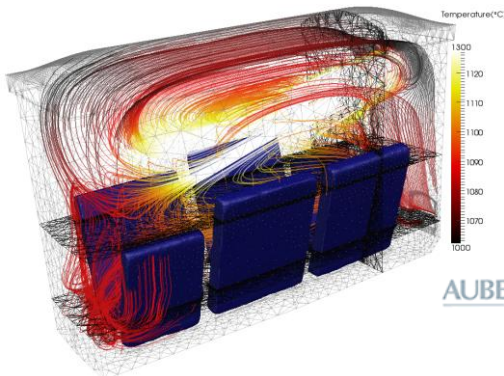
AREVA

ArcelorMittal
Industeel



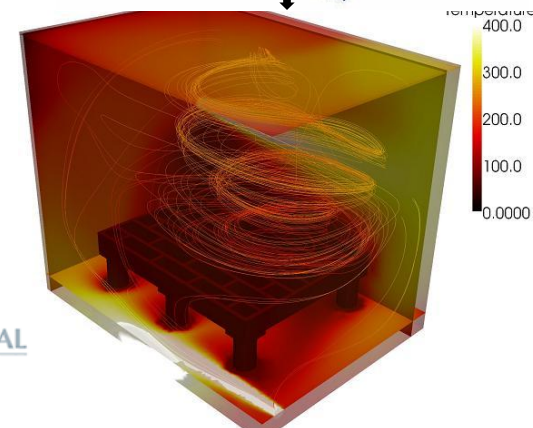
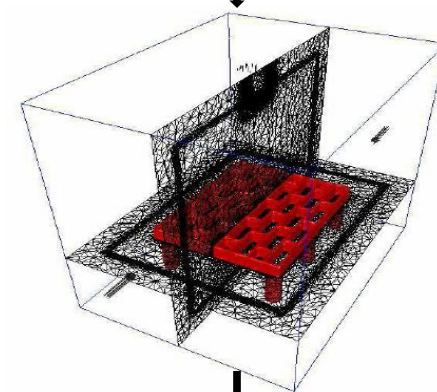
Agence Nationale de la Recherche
ANR
Programme Cosinus 2010

Snecma
Groupe SAFRAN



AUBERT&DUVAL
AD

Terreal





Cemef

Centre de Mise en Forme des Matériaux

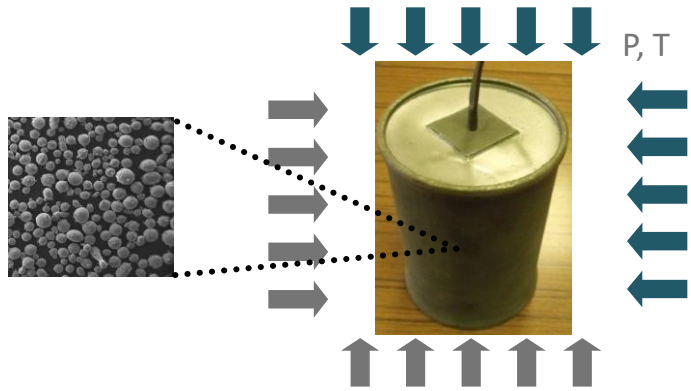


Compaction isostatique à chaud à l'échelle mésoscopique

Michel Bellet



La CIC ou HIP → procédé de formage



- ✓ Besoin de modélisation, notamment à l'échelle des particules de poudre
- ✓ compréhension de la formation de la microstructure, et des propriétés induites

Les principaux phénomènes physiques de la CIC

Déformation plastique, transport de masse par diffusion, recristallisation, grossissement de grain

Compaction expérimentale

Poudre acier inox 316L (Erasteel)

1 compaction totale (Bodycote)

5 compactations interrompues (CEA)



Éléments finis avec level set : le principe

► Méthode "monolithique"

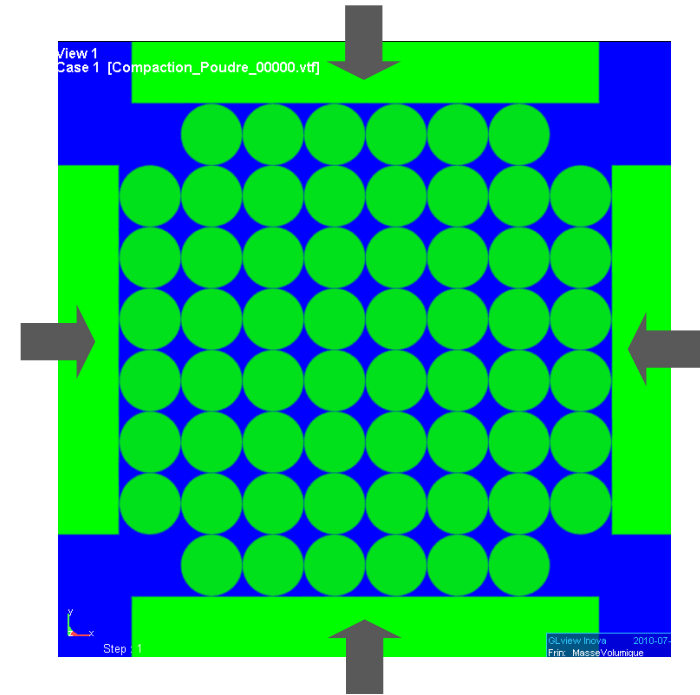
→ L'ensemble du VER est maillé par éléments finis

► 3 milieux considérés

→ Les particules

→ Le milieu interparticulaire

→ Le milieu englobant, en charge d'appliquer des conditions aux limites

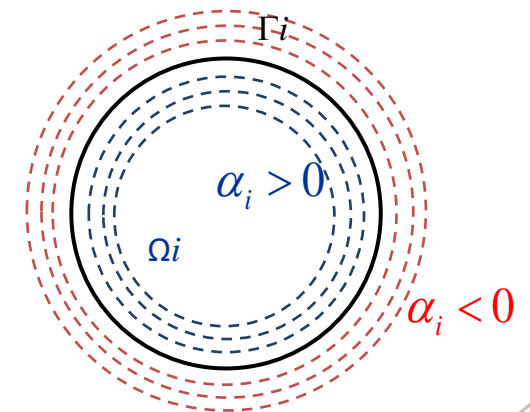


$$\alpha_i(\mathbf{x}) = \pm d(\mathbf{x}, \Gamma_i)$$

► Repérage par fonction level set

→ Fonction distance signée

→ En pratique,
des familles de level set
(méthode de coloration
de graphe)



Lois de comportement et formulation

▶ Particules de poudre

→ Comportement viscoplastique incompressible,
type Norton-Hoff

$$\begin{cases} \nabla \cdot (2K(\sqrt{3}\dot{\boldsymbol{\varepsilon}})^{m-1} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}) - \nabla p = 0 \\ \nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \end{cases}$$

▶ Milieu interparticulaire (quasi vide, en réalité)

→ Comportement newtonien compressible

$$\begin{cases} \nabla \cdot (2\eta \operatorname{dev} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}) - \nabla p = 0 \\ \nabla \cdot \mathbf{v} + C\dot{p} = 0 \end{cases}$$

▶ Milieu englobant : idem poudre, en beaucoup plus rigide

▶ Formulation monolithique

→ Propriétés moyennées au voisinage des interfaces :

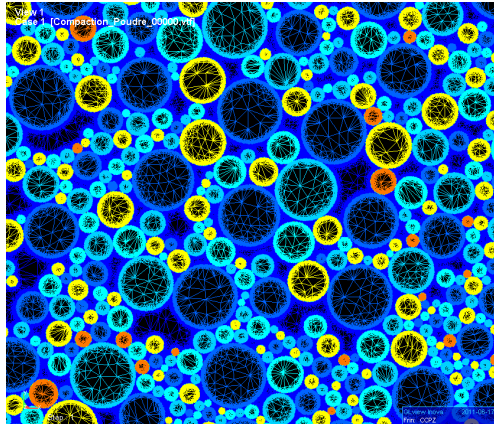
→ Résolution d'un problème unique :

$$\begin{cases} \nabla \cdot (2\langle K \rangle (\sqrt{3}\dot{\boldsymbol{\varepsilon}})^{\langle m \rangle - 1} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}) - \nabla p = 0 \\ \nabla \cdot \mathbf{v} + \langle C \rangle \dot{p} = 0 \end{cases}$$

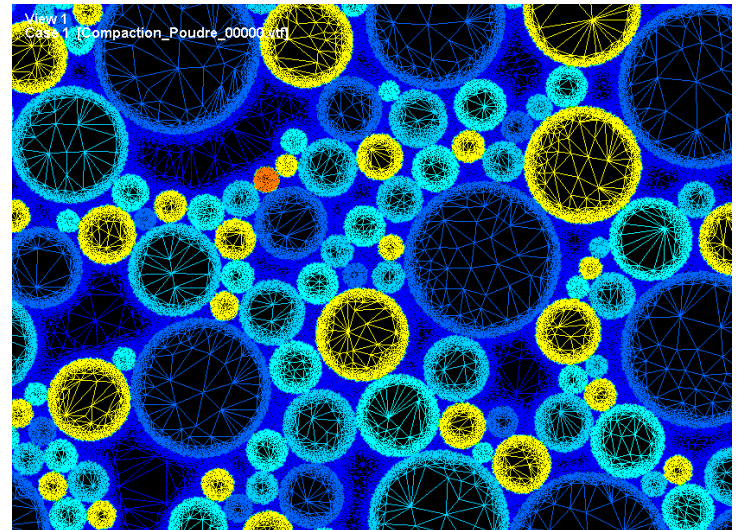
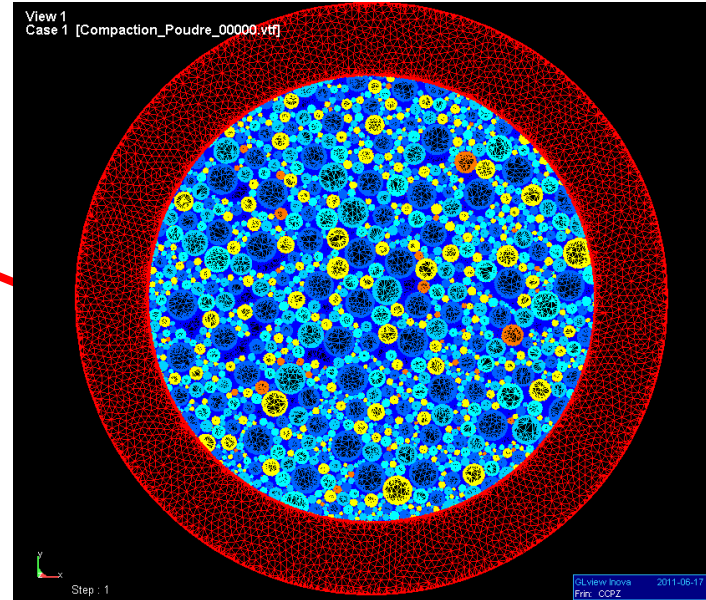
$$\langle K \rangle(\mathbf{x}) = f(K_P, K_{MI}, \alpha(\mathbf{x}))$$

Simulation 2D

- VER circulaire $R = 0.65$ mm
- ~1500 particules
- Erreur granulo : 5.2%
- Densité initiale 0.8
- $2.3 < dP < 75$ μm
- 8 familles de level sets



P



~ 760 000 noeuds
~ 1 517 000 éléments

La génération d'un VER : un problème en soi

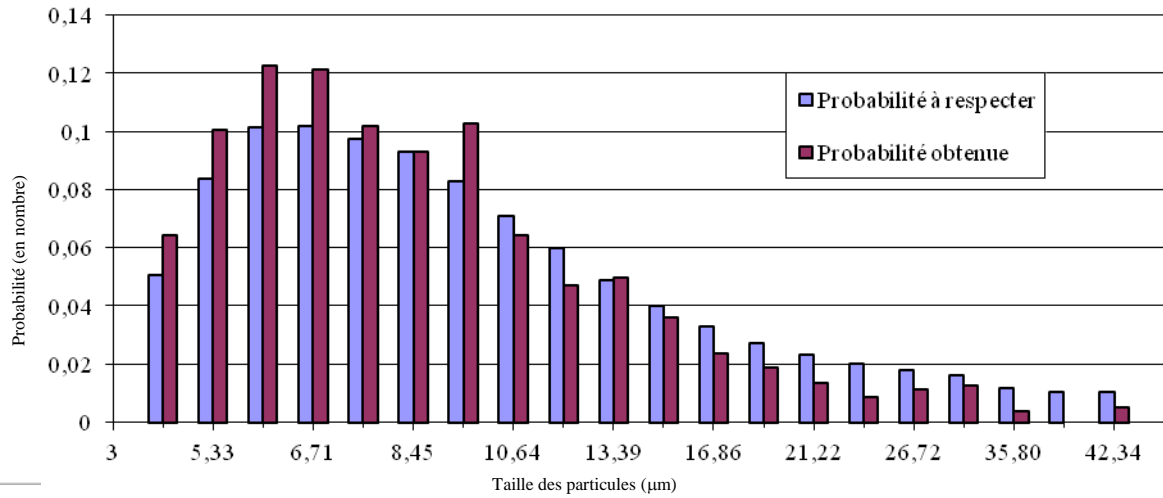
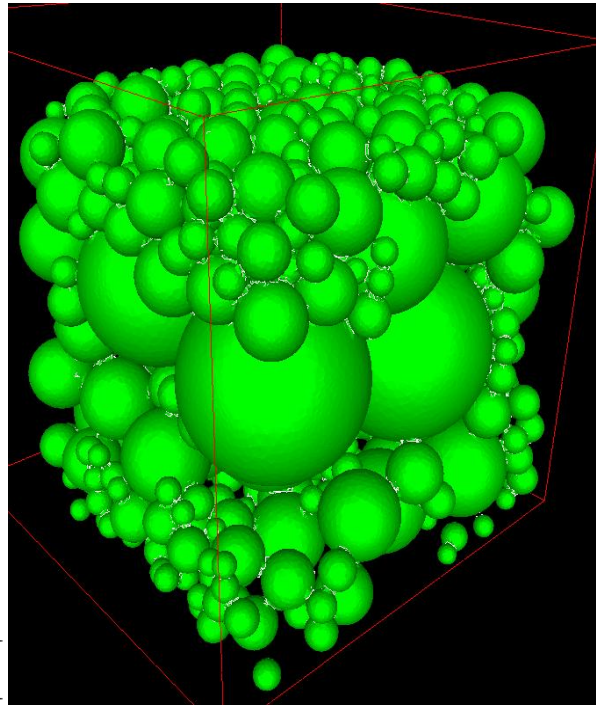
► Sujet générique → milieux multiphasés, composites, métaux, polymères

→ En 3D, des limitations plus visibles

- ◆ Perfectionnement nécessaire

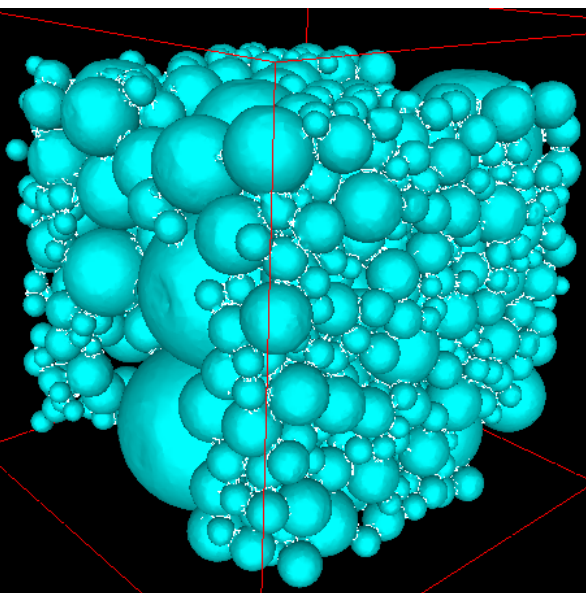
→ Un compromis à trouver :

- ◆ Nombre de particules
- ◆ Taille de VER

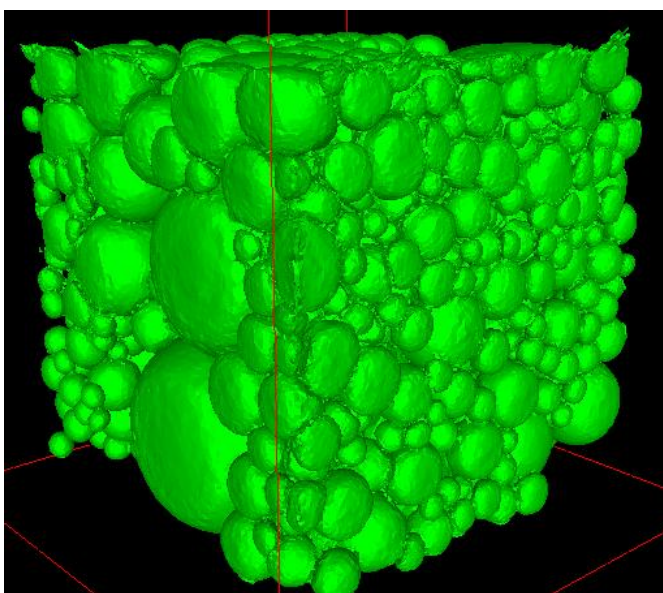


807 particules

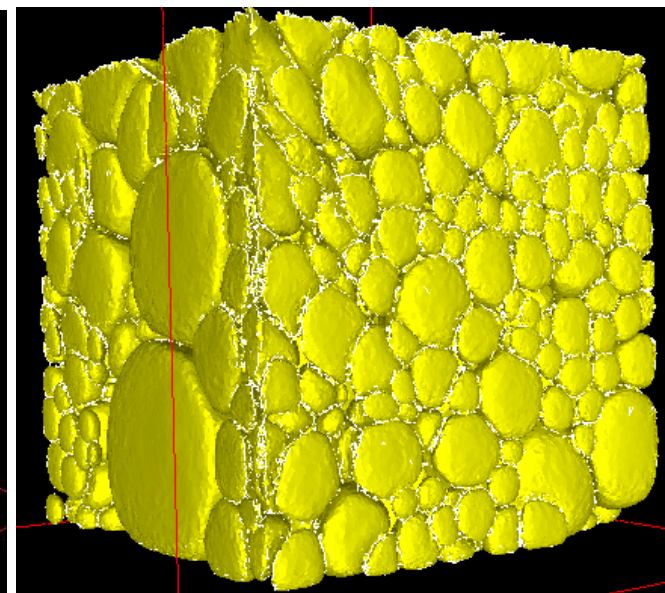
$$D = 0.63$$



$D = 0.63$



$D = 0.70$



$D = 0.95$

Cube d'arête 100 mm

807 particules

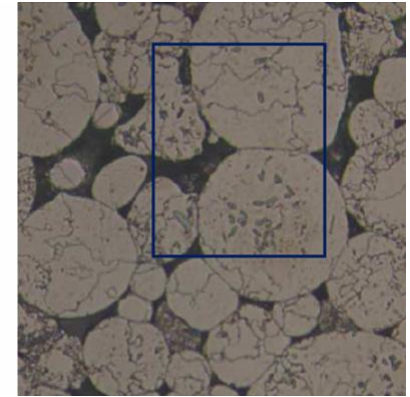
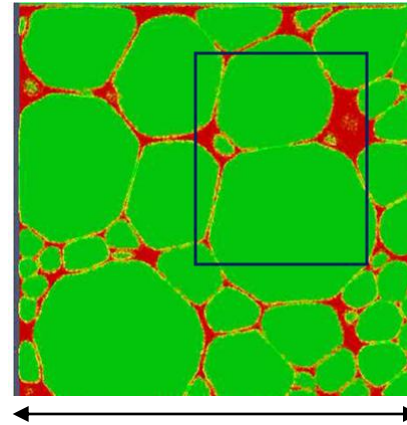
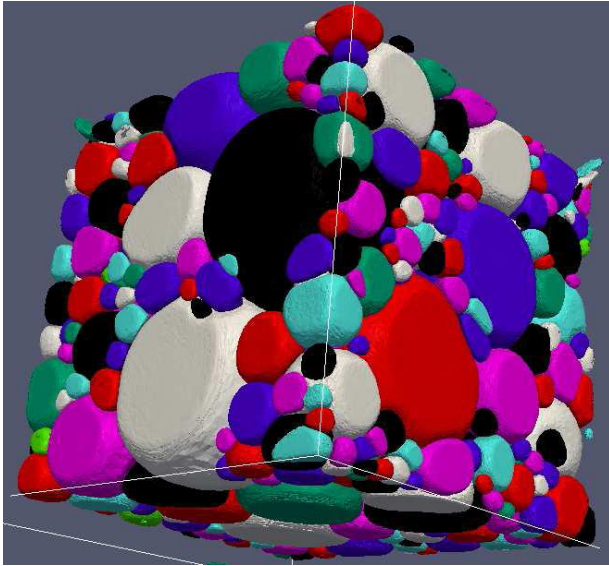
Erreur granulo = 0.19

D init = 0.63

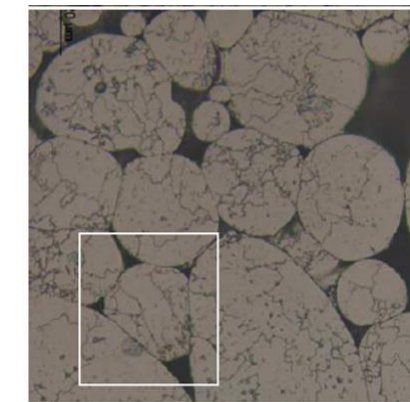
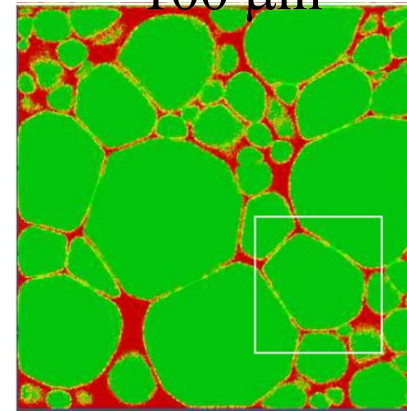
3 plans de symétrie

8 fonctions level set

Microstructure : comparaison calcul - expérience

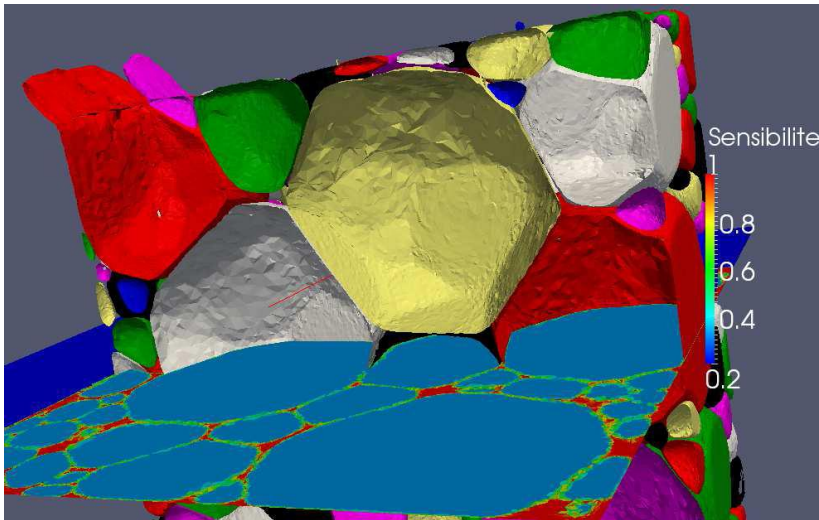


100 μm

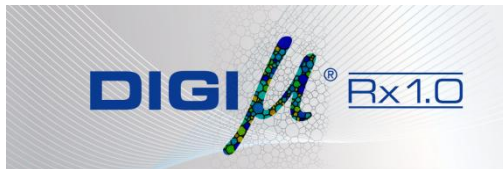


Coupes du
VER
numérique

Microscopie
optique, même
échelle, $D = 0.95$



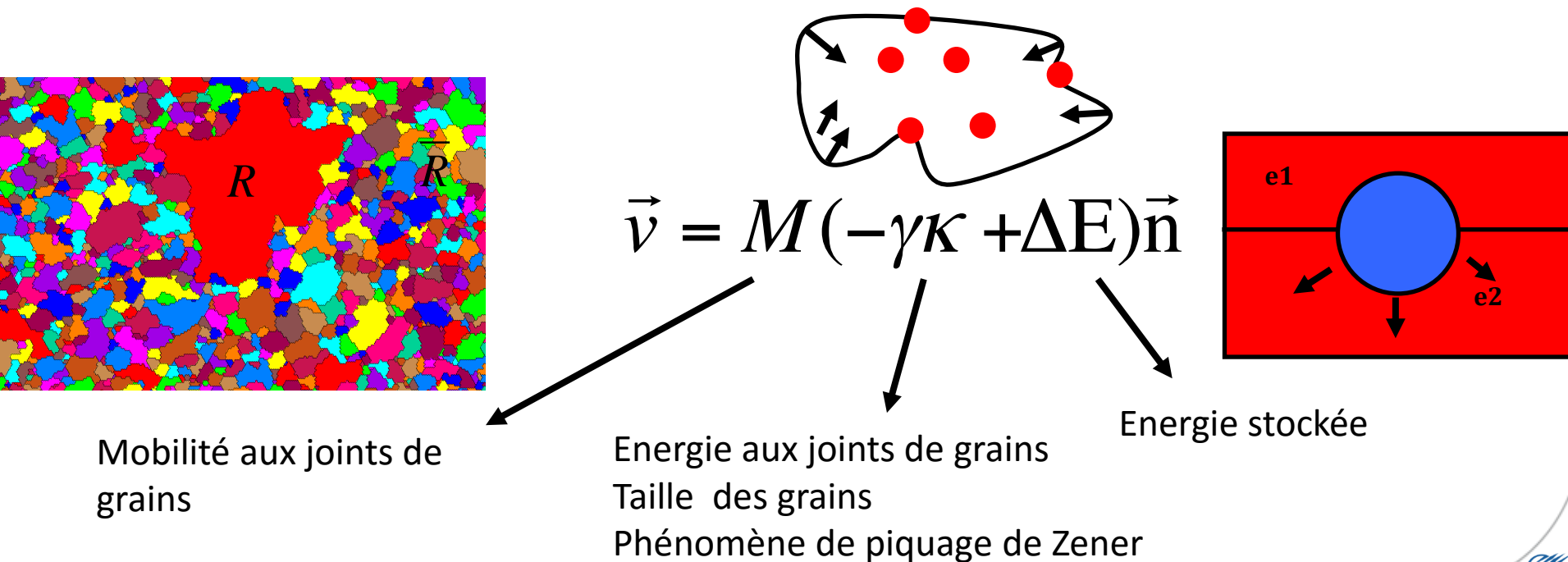
Méthodologie « level set » pour simuler les évolutions de microstructures



Marc Bernacki

Prédiction numérique de la croissance de grains

- ✓ La croissance d'un grain tient compte de l'environnement des autres grains
- ✓ Respect de la distribution de la taille de grains
- ✓ Respect de la morphologie et de la fraction des particules de 2nde phase
- ✓ Prise en compte des effets de capillarité
- ✓ Prise en compte de l'énergie stockée
- ✓ Prise en compte du piquage de Zener



Formalisme “Level Set”

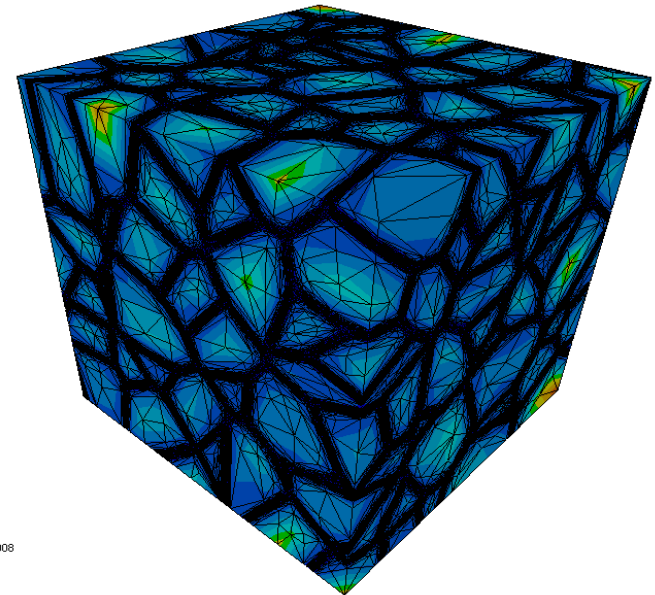
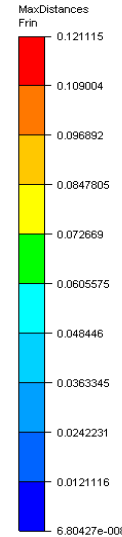
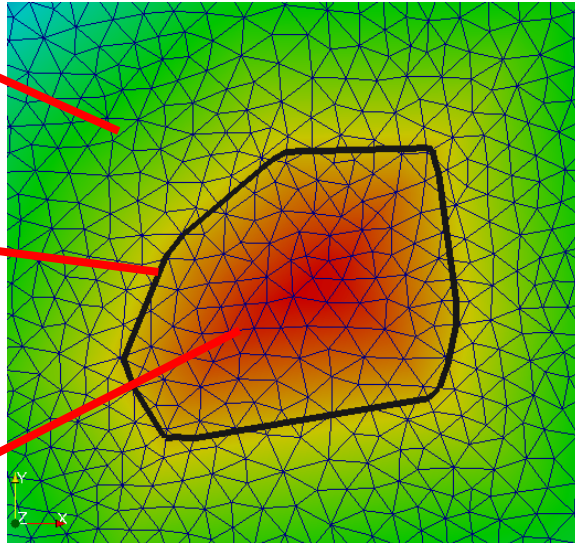
Descriptions des grains → Interface implicite utilisant la fonction level set

[Bernacki, 2008], [Bernacki, 2009], [Bernacki, 2011], [Agnoli, 2014], [Fabiano, 2014]

$$\begin{cases} \phi(x) = \pm d(x, \Gamma), x \in \Omega \\ \Gamma = \{x \in \Omega, \phi(x) = 0\} \end{cases}$$

$$\vec{n} = \frac{\vec{\nabla} \phi}{\|\vec{\nabla} \phi\|} \quad \kappa = -\nabla \cdot \left(\frac{\vec{\nabla} \phi}{\|\vec{\nabla} \phi\|} \right) \quad \|\vec{\nabla} \phi\| = 1$$

$\phi < 0$



Exemple 3D – 3,440,000 elements – 330 grains

Equation du mouvement des joints de grains

[Humphreys, 1995]

$$\vec{v} = M \Delta f \vec{n}$$

Mobilité aux joints
de grains

$$M = m_0(T) \exp\left(\frac{Q_b}{RT}\right)$$

Q_b → énergie d'activation
 T → température
 R → constante des gaz parfaits

Force motrice/unité de
surface

$$\Delta f = \tau \Delta \rho - \gamma \kappa$$

Force motrice
interne

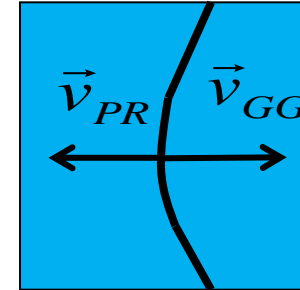
courbure des joints
de grains

τ → énergie de dislocation
 $\Delta \rho$ → densité de dislocation
 γ → énergie aux joints de grains
 κ → courbure des joints de grains

Formulation numérique de la recristallisation

La simulation du mouvement de joint de grains \rightarrow problème de convection de la fonction level set

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} + (\vec{v}_{GG_i} + \vec{v}_{PR_i}) \cdot \vec{\nabla} \phi_i = 0$$

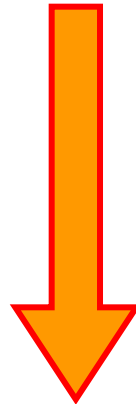


$$\vec{v}_{GG_i} = -M_i \gamma_i \kappa_i \vec{n}_i$$

$$\vec{n}_i = \frac{\vec{\nabla} \phi_i}{\|\vec{\nabla} \phi_i\|}$$

$$\kappa_i = -\nabla \cdot \left(\frac{\nabla \phi_i}{\|\nabla \phi_i\|} \right)$$

$$\|\vec{\nabla} \phi_i\| = 1$$

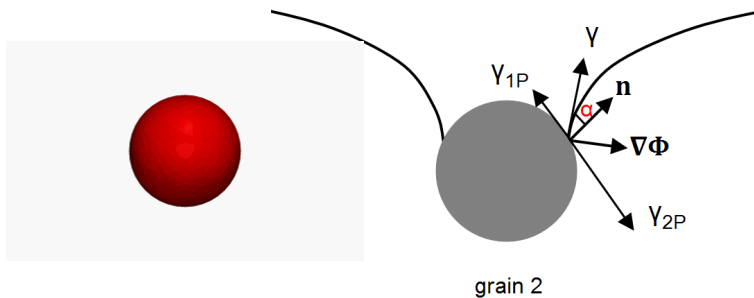
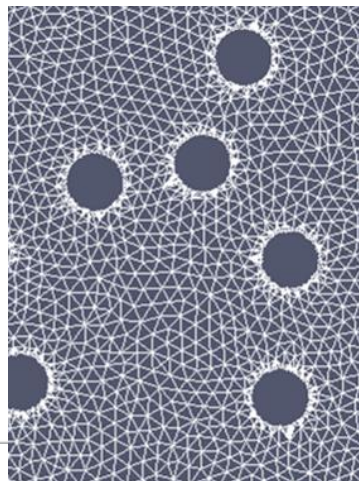
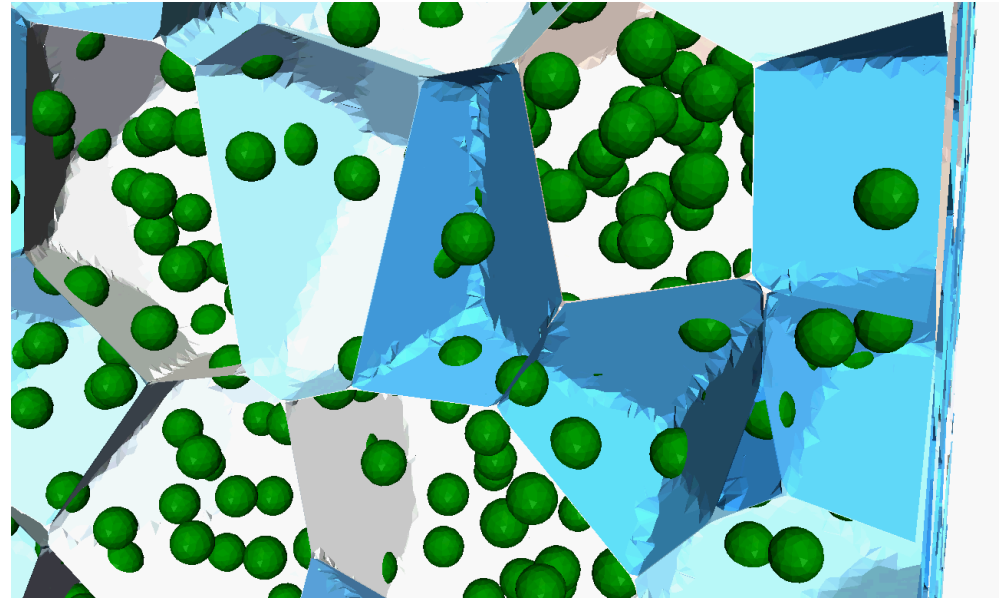
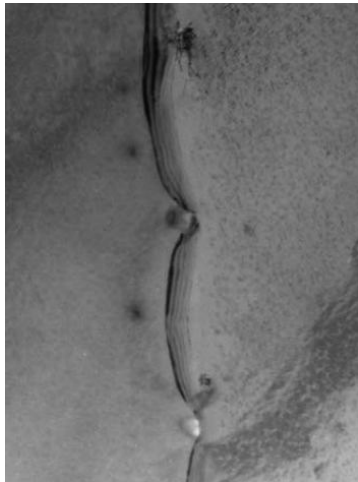


$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} + \vec{v}_{PR_i} \cdot \nabla \phi_i - M_i \gamma_i \Delta \phi_i = 0$$

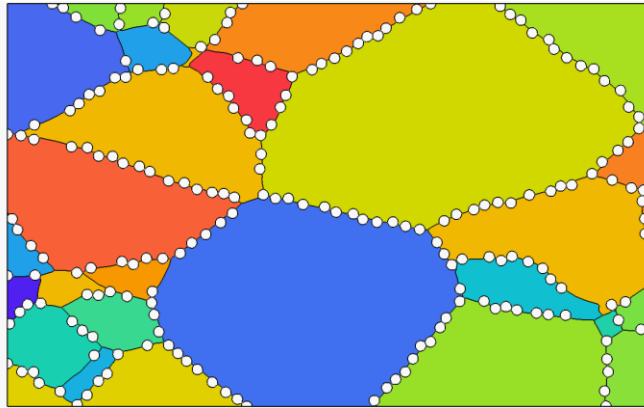
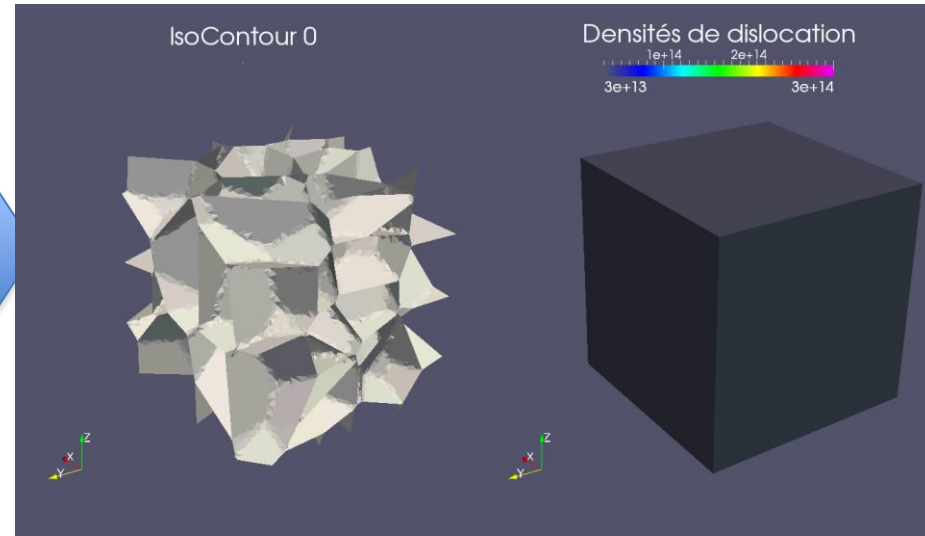
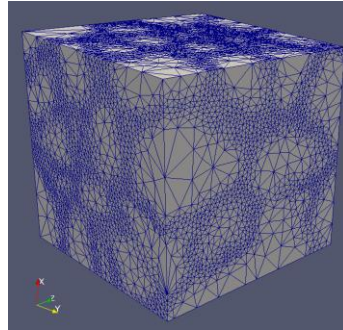
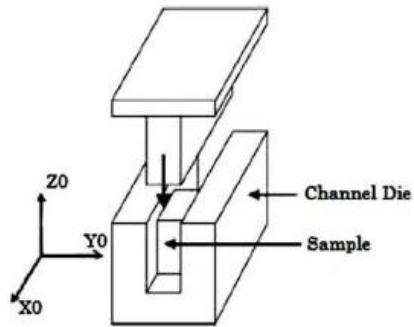
[Bernacki, 2011], [Fabiano, 2014]

Le piquage de Zenner

Dans le contexte des “level set” la présence de particules est directement prise en compte via l’effet de la courbure du joint de grains



Modélisation numérique en champ complet de la recristallisation



Recristallisation en 2D

8 mn de TT à 1050°C

233 grains (33 grains déformés + 200 particules)

304L

2h de calcul sur 6 CPUs

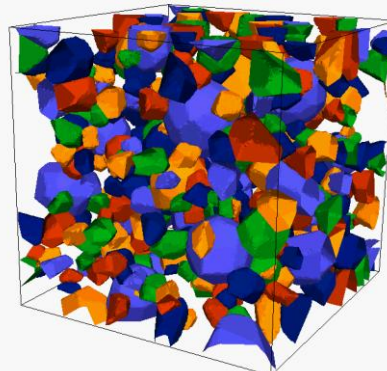
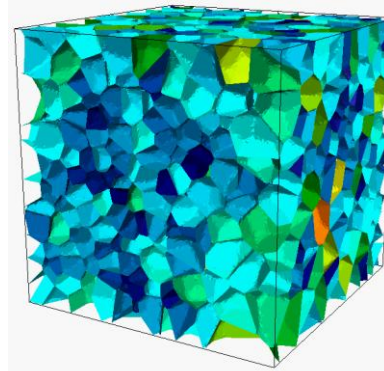
Croissance de grain en 3D

3h de TT à 1050°C

1800 grains

304L

12h de calcul sur 16 CPUs





Cemef

Centre de Mise en Forme des Matériaux



■ ■ ■

Analyse multi-échelles de l'endommagement-rupture et de l'évolution de porosité

Pierre-Olivier BOUCHARD

Représentation des particules et des porosités

➤ Fonctions level set

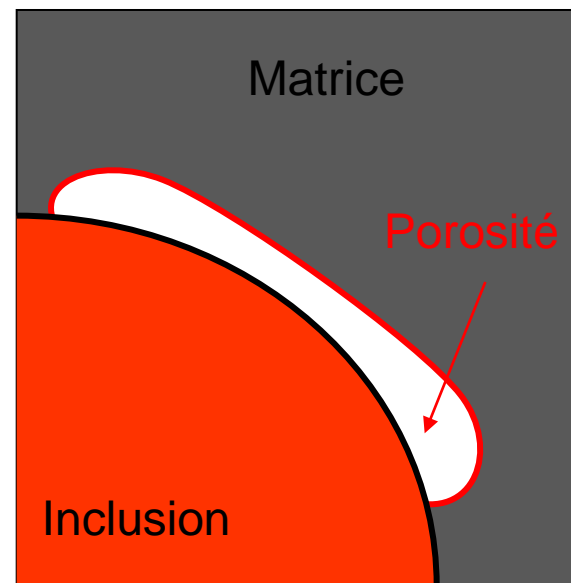
- 3 domaines définis par $\int_i \int_m \int_v$
- Interfaces matrice - inclusion - porosité: valeurs zéro de la fonction level-set

$$\begin{cases} x \in \text{Inclusion} \Leftrightarrow \phi_i(x) \geq 0 \\ x \in \text{Matrix} \Leftrightarrow \phi_m(x) \geq 0 \\ x \in \text{Void} \Leftrightarrow \phi_v(x) = -\max(\phi_i(x), \phi_m(x)) \geq 0 \end{cases}$$

➤ Propriétés mécaniques

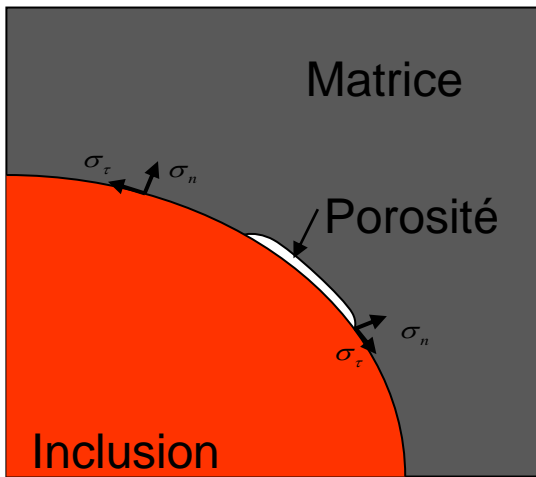
- Chaque domaine a ses propres propriétés mécaniques
- Description implicite des interfaces
 - ➡ Des éléments coupent les interfaces
 - ➡ Lois de mélange sur les propriétés mécaniques

$$P_{mat} = \left(a_v(f_v) P_v + (1 - a_v(f_v)) P_i \right) (1 - a_m(f_m)) + a_m(f_m) P_m$$

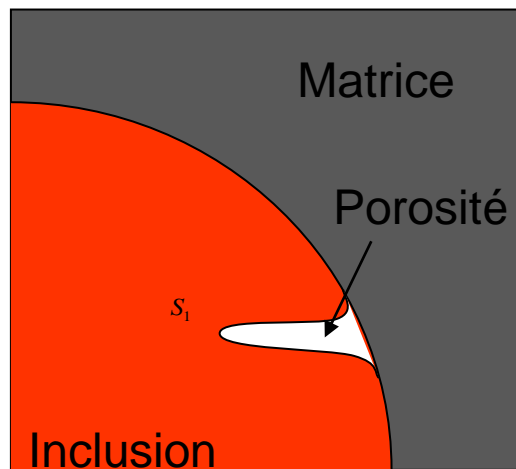
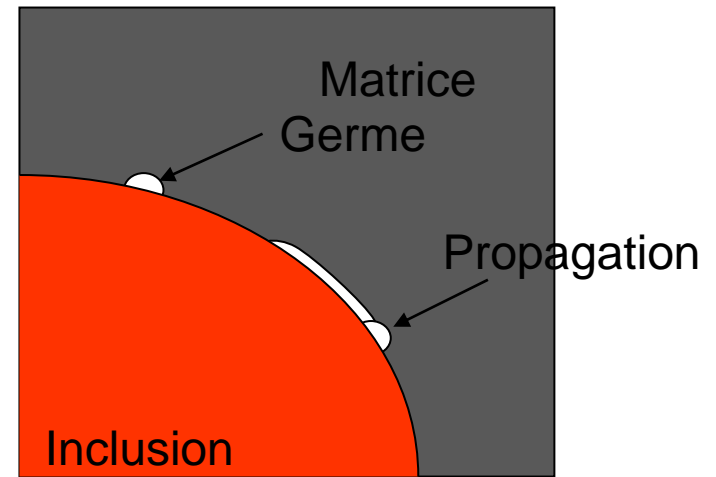


Germination

➤ Décohésion à l'interface

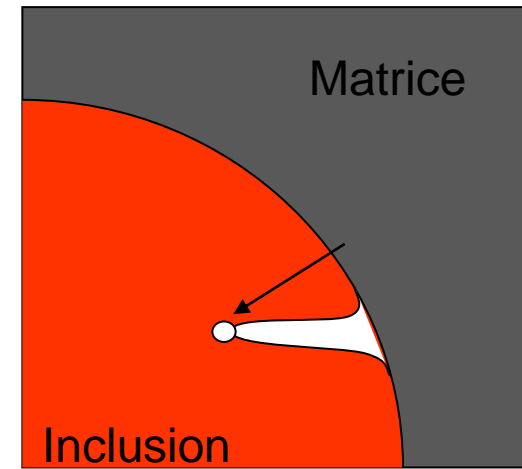


$$\text{if } \sigma_n + \beta|\sigma_\tau| > \sigma^c$$



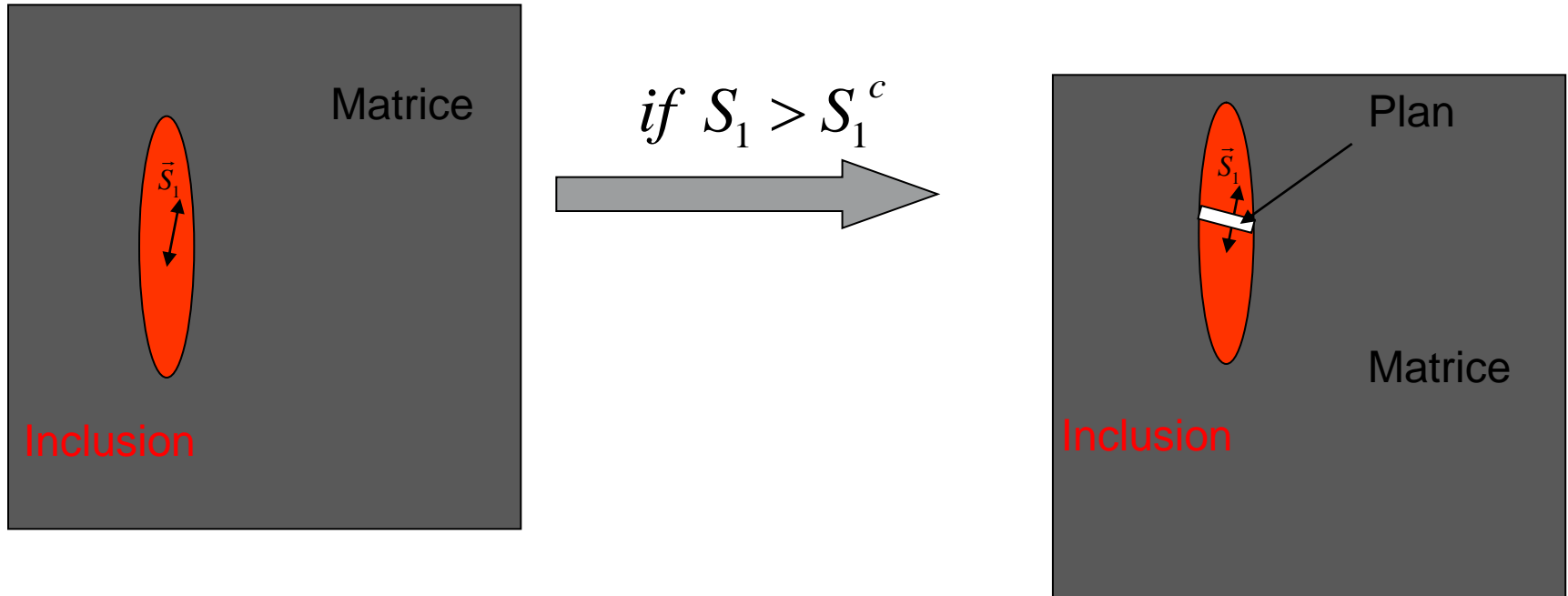
$$\text{if } S_1 > S_1^{threshold}$$

➤ Fragmentation 1



Germination

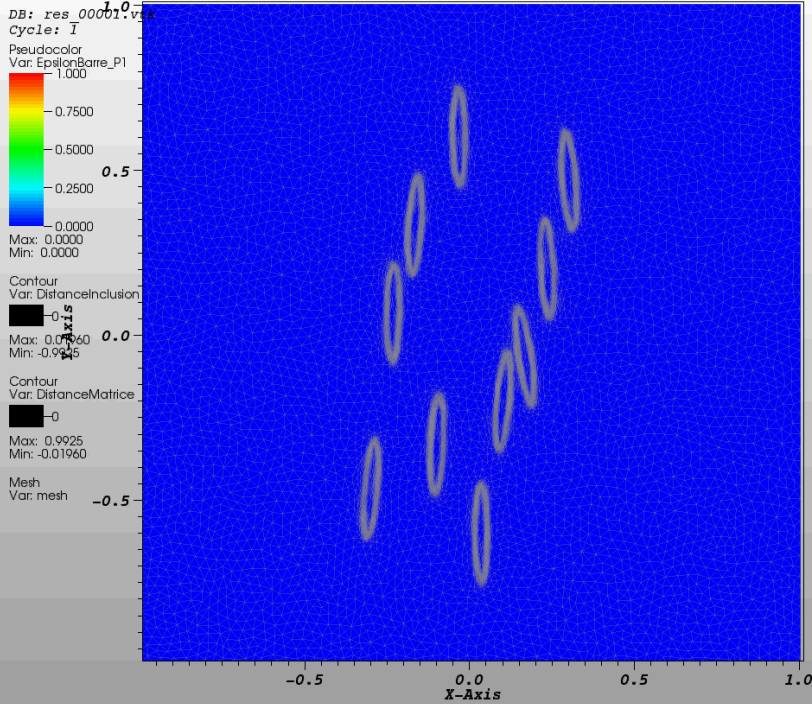
- Décohésion à l'interface
- Fragmentation: Méthode 2



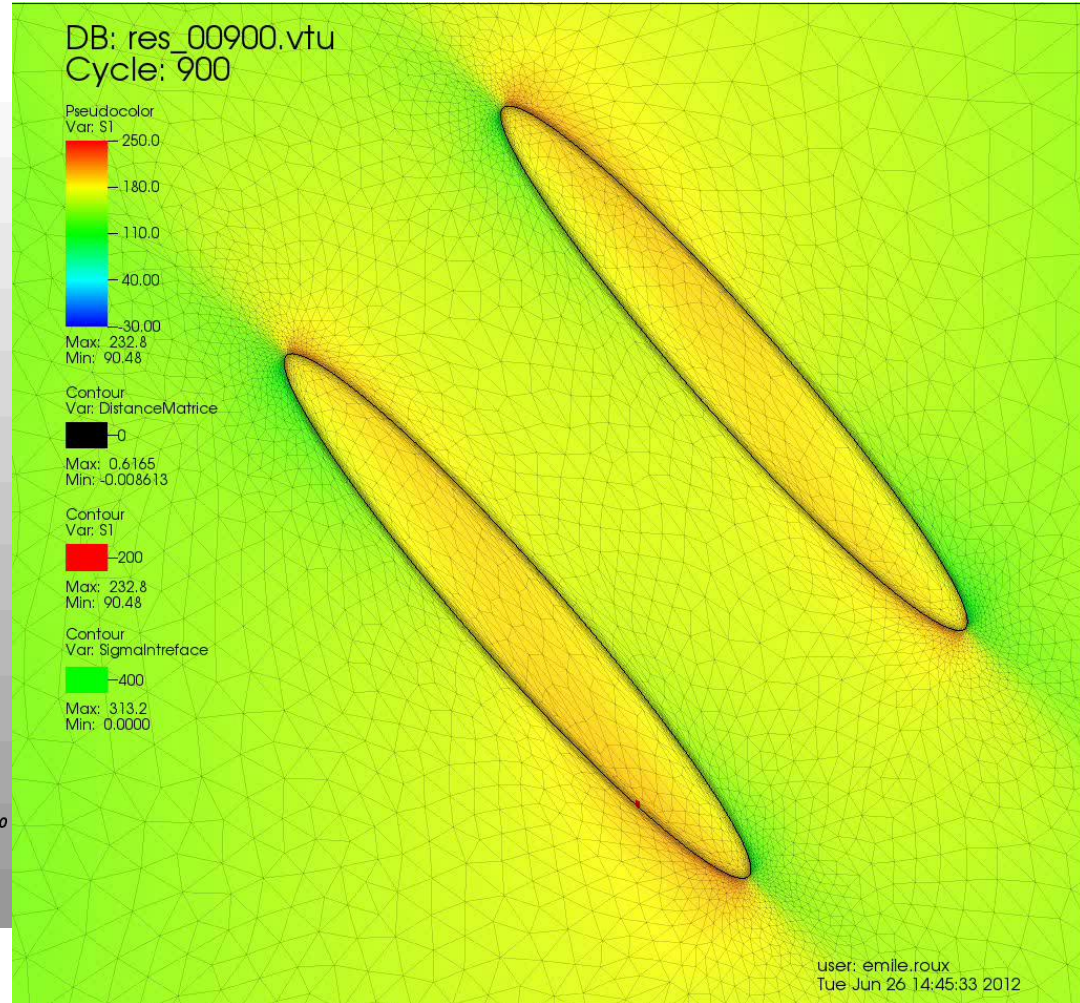
- Lorsque le seuil de la contrainte principale maximale est atteint:
 - ➔ Rupture: initiation d'un plan de rupture (normal à la direction des contraintes principales)

Germination

- Décohésion à l'interface
- Fragmentation: Méthode 2

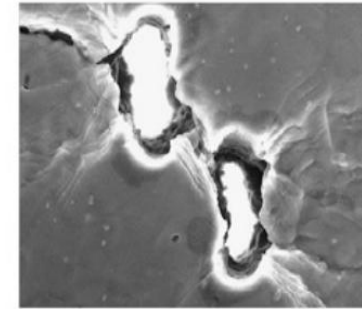
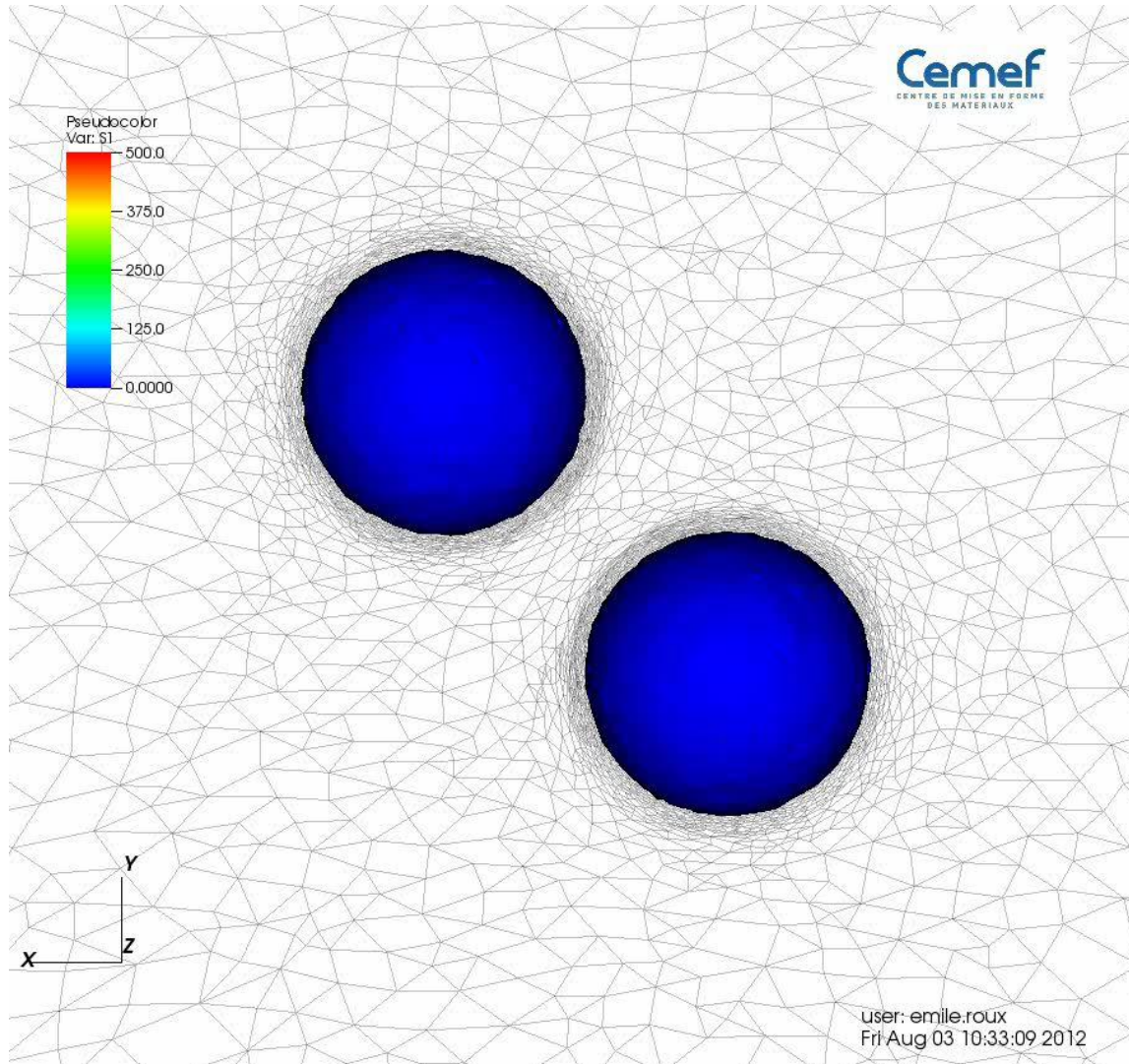


user: emile.roux
Fri Oct 21 09:00:30 2011



Analyse multi-échelle de la rupture

- Rupture ductile à l'échelle micro: germination, croissance et coalescence de porosités



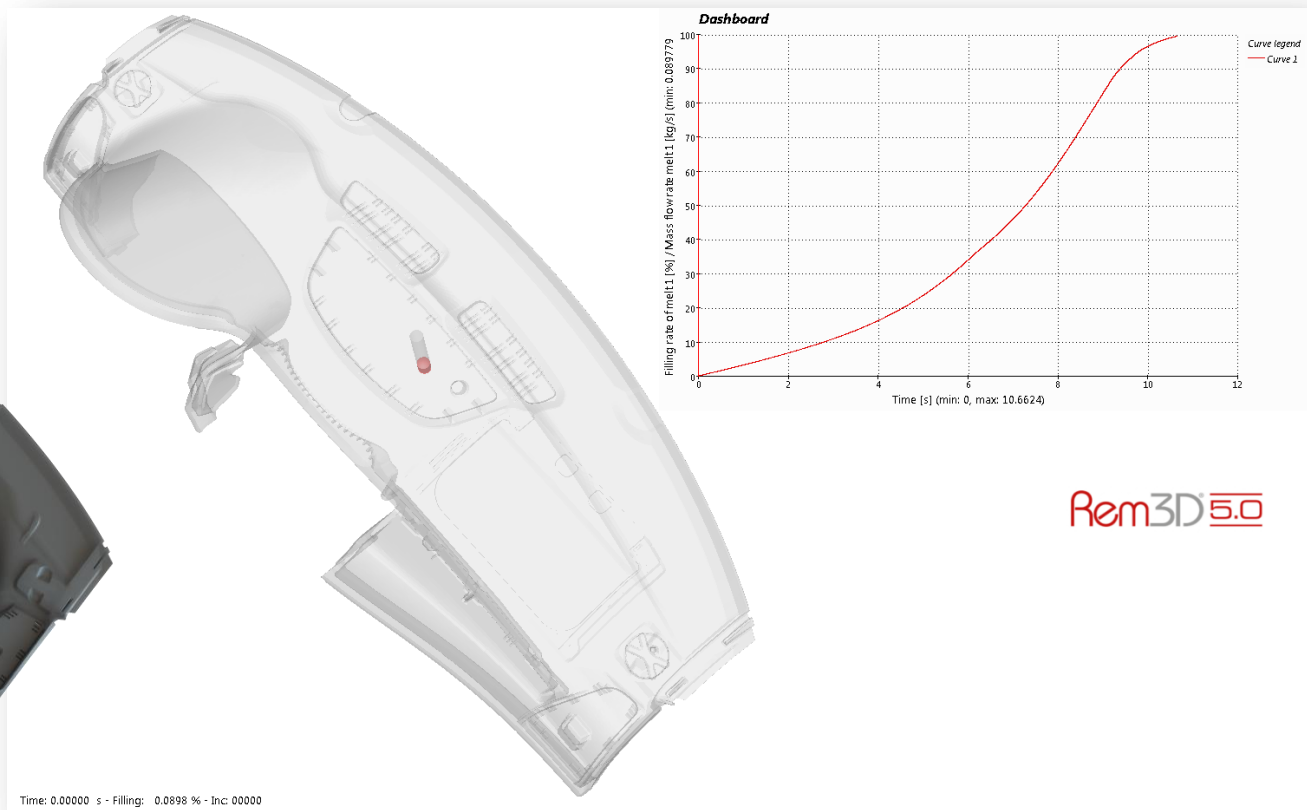
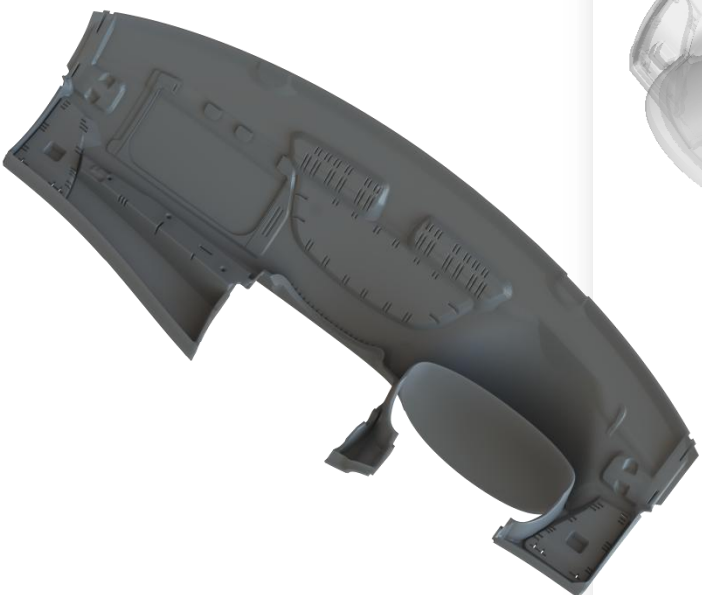


Cemef

Centre de Mise en Forme des Matériaux



■ D'autres exemples..... ■

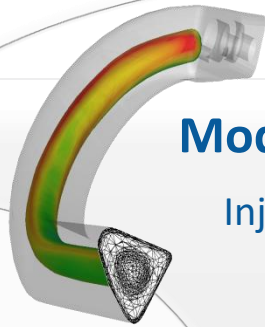


Rem3D 5.0

Tableau de bord

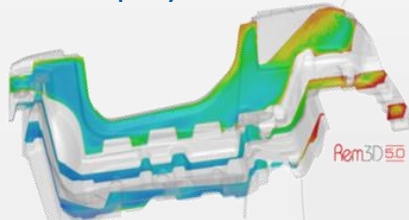
Module Multifluides

Injection assistée gaz
Co-Injection



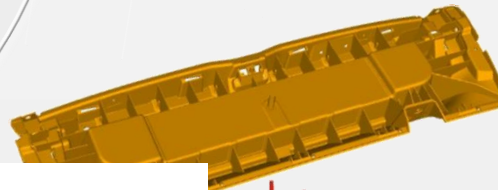
Module d'expansion de mousse

Injection et expansion de mousse polyuréthane

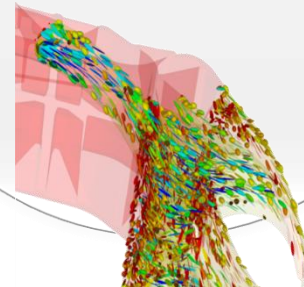


Rem3D[®] 5.0

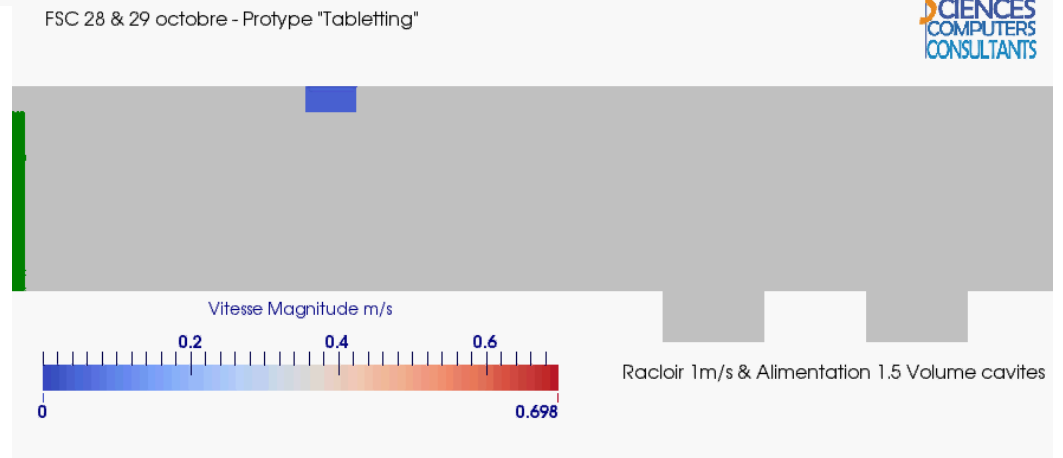
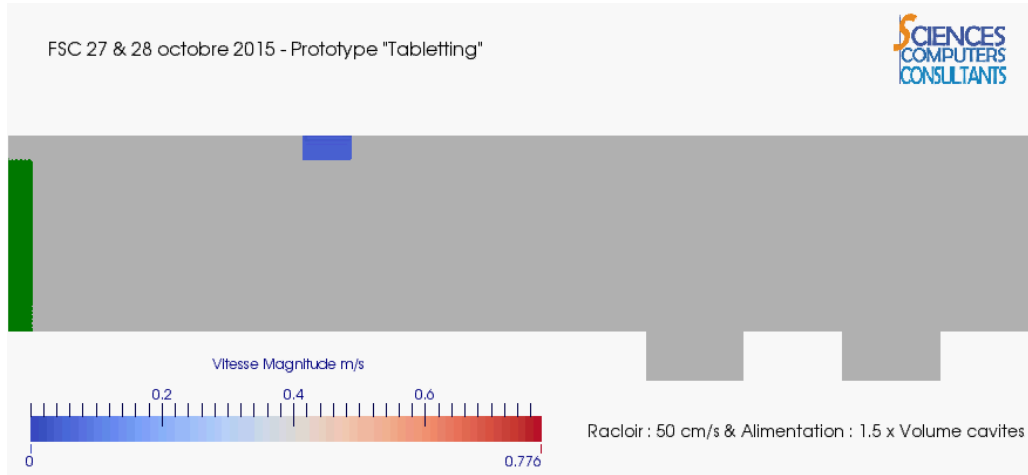
Module de base
Monofluide
Injection thermoplastique



Module avec fibres
Injection de polymères renforcés



Milieux granulaires



Mécanique des fluides...

► Développement de solveurs fluides prenant en compte:

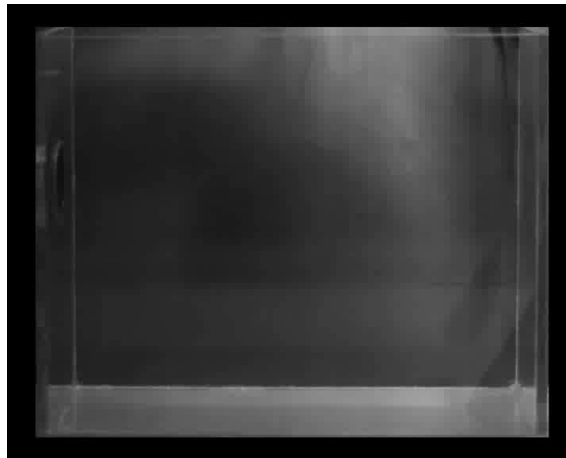
- grand rapport densité/viscosité (liquide/gaz, eau/huile, huile/gaz,...)
- combinaison de la turbulence et des multi-fluides
- Extension au couplage avec les champs magnétiques

► Applications

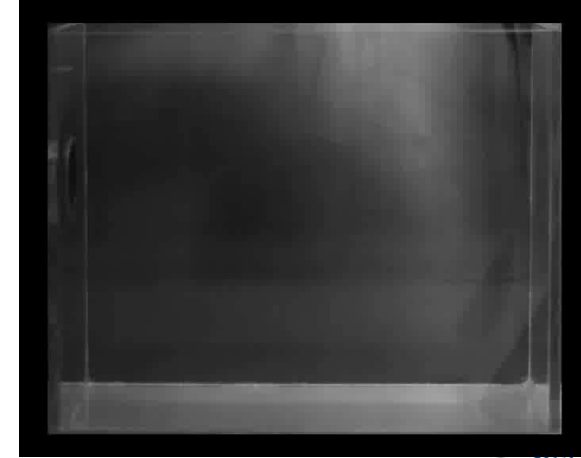
- Navires gaziers
- Offshore-Pipelines (Subsea7)
- Fonderie (Arcelor Mittal)
- Refroidissement de réacteur nucléaire (Areva)



Experiment

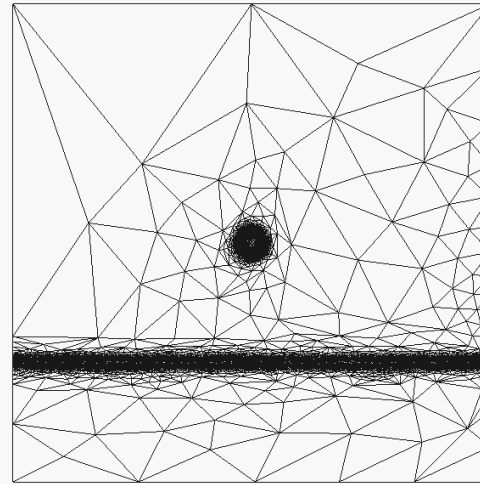
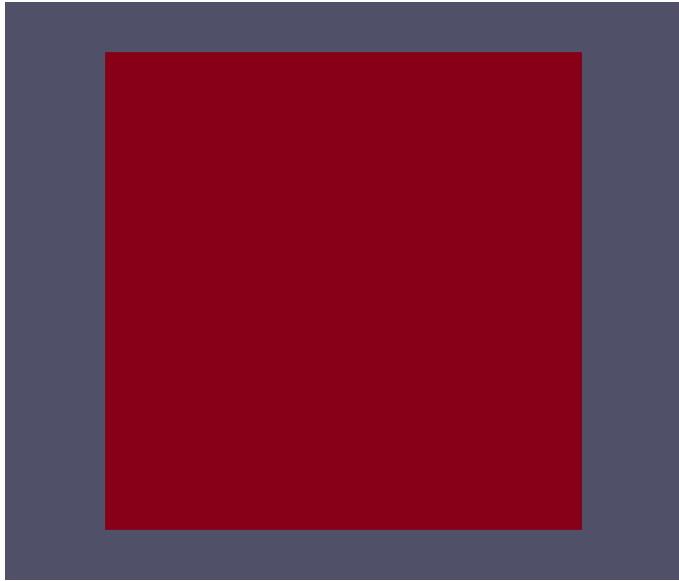


Classical solver



New solver

Écoulements liquides



Conclusions

□ Simulation de la mise en forme des matériaux

- ✓ Besoin de connaître l'origine du matériau et de savoir où il va
- ✓ Elaboration → solidification, coulée
- ✓ Mise en forme incluant l'évolution de microstructures
- ✓ Traitement thermique: chauffage, trempe, chauffage par induction
- ✓ Assemblage, soudage, soudage par friction
- ✓ Prédiction des défauts: endommagements, porosités

□ Développement de modèles numériques

- ✓ Approche éléments finis, P1+/P1 tétraèdres
- ✓ Domaine immergé et interface « level set » → très facile de représenter différents objets en mouvement → grand intérêt pour les approches multi-physiques et multi-échelles
- ✓ **Il faut encore réduire le temps de calcul**

Elie.hachem@mines-paristech.fr

Pierre-olivier.bouchard@mines-paristech.fr

Marc.bernacki@mines-paristech.fr

michel.bellet@mines-paristech.fr

Elisabeth.massoni@mines-paristech.fr