

Framework haute performance pour la simulation en champs complets des aubes de turbines polycristallines

C. Bovet¹, V. Chiaruttini², A. Vattré¹

¹ Univ. Paris-Saclay, ONERA, Département Matériaux et Structures, Châtillon {christophe.bovet,aurelien.vattre}@onera.fr

² Safran Tech, Digital Sciences & Technologies, Magny-Les-Hameaux, vincent.chiaruttini@safrangroup.com

Résumé — Un *framework* haute performance est développé pour simuler des aubes de turbines en superalliage base nickel en champs complets. Des microstructures à taille de grains données, sont insérées dans la géométrie de l'aube *via* des techniques d'intersection de maillage et de remaillage conforme. Le comportement du matériau est décrit par un modèle de plasticité cristalline grande déformation fondé sur les densités de dislocations. Les problèmes éléments finis de grande taille sont résolus avec le solveur AMPFETI et une décomposition grain-à-grain.

Mots clés — simulations champs complets, plasticité cristalline, solveur & maillage HPC

1 Introduction

Les superalliages base nickel sont fréquemment utilisés dans les composants moteurs en raison de leur résistance mécanique exceptionnelle et de leur capacité à supporter des charges thermiques et mécaniques élevées. En fonction de la température de fonctionnement, différentes microstructures sont choisies, allant du monocristal, des alliages à solidification dirigée jusqu'à des microstructures équi-axes. La conception et la prévision de la durée de vie de ces composants repose principalement sur des simulations numériques utilisant des lois de comportement homogénéisées. Ces approches présentent un coût de calcul réduit, mais elles ignorent souvent les champs mécaniques locaux qui sont à l'origine des mécanismes de défaillance. Une approche en champs complets, qui intègre explicitement la microstructure dans les simulations permettrait de prédire avec plus de précision les concentrations locales de contraintes et de déformations, améliorant ainsi l'identification des zones critiques pour l'apparition et la propagation de défauts.

Les approches en champs complets visent pour la plupart à simuler le comportement d'agrégats polycristallins définis sur un volume élémentaire représentatif (VER). Les approches fondées sur les transformées de Fourier rapides (FFT) offrent un cadre efficace pour la simulation en plasticité cristalline [1, 2]. Des bibliothèques haute performance sont accessibles telles que DAMASK [3] ou AMITEX¹. Cependant, les géométries accessibles à ces approches restent limitées. À l'inverse, les approches éléments finis ne souffrent pas de limitation géométrique mais le coût de calcul a limité jusqu'à présent les études à un faible nombre de grains [4, 5] ou proche de détails géométriques [6].

Dans ce travail, des avancées récentes en génération de maillages, plasticité cristalline basée sur les dislocations et calcul haute performance sont combinées dans un *framework* unifié pour la simulation à grande échelle d'aubes de turbines. Ce *framework* lève les limitations géométriques des approches spectrales et celles relatives au coût de calcul des approches éléments finis traditionnelles. L'accent est mis sur l'intégration transparente de microstructures réalistes à plusieurs milliers de grains dans des géométries à l'échelle du composant, ainsi que sur la résolution efficace des problèmes non linéaires sous chargements thermomécaniques représentatifs.

Ce papier est organisé comme suit : la méthode de génération et d'insertion de microstructures dans les composants moteurs est présentée ; puis nous introduisons le modèle de plasticité cristalline grande déformation. Le solveur en décomposition de domaine est ensuite brièvement décrit et ses performances illustrées sur un cas classique d'extensibilité faible. Les résultats de si-

1. <https://amitexfftp.github.io/AMITEX/index.html>

mutations champs complets sont ensuite présentés et nous donnons en perspectives la génération de modèle réduit.

Ce travail a reçu un soutien financier de la DGAC, de France relance et de l'Union européenne NextGenerationEU [subvention n° 2021-08, projet ARIZE].

2 Génération et insertion rapide de microstructures

Les outils tels que *Neper*² permettent la génération de microstructure efficaces et réalistes. Ils se limitent cependant à des domaines géométriques simples et incruster une microstructure dans une géométrie complexe telle qu'une aube requiert un processus spécifique. Pour surmonter ces limitations, nous avons développé un algorithme de génération de germes spécialement conçu pour exploiter directement le maillage éléments finis du composant. À partir d'une discrétisation volumique homogène — généralement plus fine que le nombre de grains visé — un champ local de taille de grain est calculé. Les germes candidats sont ensuite générés de manière stochastique et validés selon trois critères : (i) leur localisation à l'intérieur du maillage, (ii) leur cohérence avec le rayon de grain local prescrit, et (iii) l'absence de recouvrement avec les germes déjà existants.

Pour accélérer cette validation, une structure hiérarchique de type *k-d tree* alignés sur les axes est construite, permettant des requêtes de voisinage efficaces tant pour l'évaluation de la taille des grains que pour la détection des collisions. Les germes acceptés sont insérés dans cette structure, garantissant un espacement robuste et une bonne reproductibilité.

Cet algorithme, implémenté en C++ multithreadé, génère en quelques secondes des populations de germes réalistes, même pour des géométries industrielles impliquant des centaines de milliers de candidats. Les germes obtenus sont directement compatibles avec *Neper* pour la tessellation, permettant ainsi de construire des microstructures polycristallines de grande taille sans hypothèses de périodicité, tout en tenant compte à la fois des contraintes géométriques et des conditions aux limites. Une fois la populations de germes produites, une première tessellation réalisée sur un domaine géométrique englobant le composante.

Ensuite, l'intersection entre le maillage de l'aube et celui de la microstructure est calculée à l'aide du module *A-cracks* récemment développé. Cette intersection génère la trace de la microstructure sur la géométrie de l'aube. Enfin, une phase de remaillage parallèle, surface puis volume, permet de contrôler la taille et la qualité des éléments finis produits. Toutes la chaîne de calcul est parallélisée en mémoire partagée ce qui permet de générer les maillages en quelques minutes.

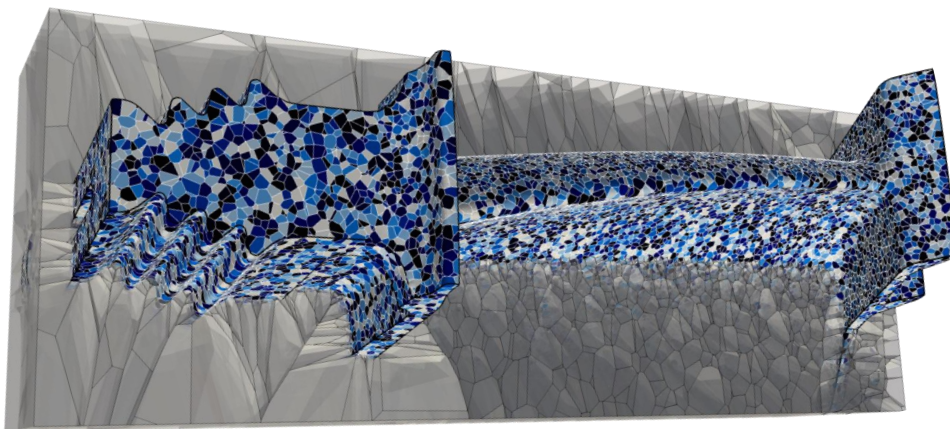


FIGURE 1 – Gradient de microstructure à 40000 grains, trace du maillage de la microstructure sur celui de l'aube.

2. <https://neper.info/>

3 Plasticité cristalline grande déformation fondé sur les densité de dislocations

Une modélisation précise du comportement mécanique des superalliages base Nickel à l'échelle de la microstructure nécessite des lois constitutives qui capturent les mécanismes fondamentaux régissant la déformation plastique. Dans ce travail, un cadre de plasticité cristalline à grande déformation est adopté, fondé sur la théorie des dislocations géométriquement nécessaires (GND), qui permet de représenter la courbure du réseau cristallin et les interactions intergranulaires. Cette section présente brièvement les fondements cinématiques, les équations constitutives et la stratégie d'intégration numérique utilisées pour simuler le comportement thermomécanique de l'Inconel 718. Ici, la déformation plastique se produit principalement par glissement de dislocations, celles-ci étant réparties de manière non uniforme sur les systèmes de glissement octaédriques actifs caractéristiques des cristaux CFC. Pour rester concis, tous les paramètres physiques ne sont pas détaillés.

Le gradient de transformation \mathbf{F} est décomposé multiplicativement en une contribution élastique, plastique et thermique :

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_e \cdot \mathbf{F}_p \cdot \mathbf{F}_T, \quad (1)$$

où la transformation inélastique \mathbf{F}_p suit les systèmes de glissement. La contribution thermique au gradient de transformation est supposé linéaire isotrope $\mathbf{F}_T = (1 + \alpha_T (T - T_0)) \mathbf{I}$, où T_0 est la température de référence et tel que $|\alpha_T (T - T_0)| \ll 1$. Le tenseur taux de déformation plastique est donné par

$$\mathbf{L}_p = \dot{\mathbf{F}}_p \cdot \mathbf{F}_p^{-1} = \sum_{\alpha=1}^{12} \dot{\gamma}^\alpha \mathbf{m}^\alpha \otimes \mathbf{n}^\alpha, \quad (2)$$

où \mathbf{m}^α et \mathbf{n}^α sont les directions de glissement et les normales aux plans de glissement. Le taux de glissement sur le système α suit la loi d'Orowan :

$$\dot{\gamma}^\alpha = \rho_m^\alpha b^\alpha v^\alpha \text{sign}(\tau^\alpha), \quad (3)$$

avec ρ_m^α la densité de dislocation mobile, b^α l'amplitude du vecteur de Burgers et la scission résolue τ^α . La vitesse moyenne des dislocations v^α est fonction de la température et de la scission résolue. Non détaillée ici, elle présente deux régimes asymptotiques : thermiquement activé et mécaniquement visqueux.

Pour chaque système de glissement, l'évolution de la densité de dislocation mobile ρ_m^α est régie par une relation de type stockage-restauration généralisée [7]

$$\dot{\rho}_m^\alpha = \frac{1}{b^\alpha} \left(\frac{1}{\Lambda^\alpha} - 2y_c \rho^\alpha \right) |\dot{\gamma}^\alpha| \quad \text{avec} \quad \Lambda^\alpha = \frac{K}{\sqrt{\sum_{\beta=1}^{12} h^{\alpha\beta} \rho^\beta}} \quad (4)$$

qui associe un terme positif de stockage et un terme négatif de restauration dynamique. Le libre parcours moyen Λ^α ainsi que le terme de restauration dynamique dépendent de la densité de totale dislocations, mobiles et géométriquement nécessaires $\rho^\alpha = \rho_m^\alpha + \rho_G^\alpha$. Les termes $h^{\alpha\beta}$ représentent l'écroûissage latent entre les systèmes de glissement.

Enfin, les dislocations géométriquement nécessaires, fruits de l'incompatibilité plastique aux joints de grains, sont représentés par le tenseur de dislocation de Nye [8] et fonction du rotationnel de \mathbf{F}_p^t [11] :

$$\rho_G^\beta = \frac{1}{b^\beta} | - (\nabla \times \mathbf{F}_p^t)^t : (\mathbf{m}^\beta \otimes \mathbf{m}^\beta + \mathbf{m}^\beta \otimes \mathbf{t}^\beta + \mathbf{m}^\beta \otimes \mathbf{n}^\beta) |, \quad \text{avec} \quad \mathbf{t}^\beta = \mathbf{m}^\beta \times \mathbf{n}^\beta. \quad (5)$$

Cette dernière relation introduit un effet d'échelle. Le rotationnel de \mathbf{F}_p^t sera calculé par une approche du type moindres carrés mobiles, la plasticité n'est pas élevée au rang de degré de liberté.

4 Solveur en décomposition de domaine et décomposition grain-à-grain

4.1 Décomposition grain-à-grain

La décomposition de domaine est classiquement générée par une bibliothèque de partitionnement de graphe tel que Metis³ ou Scotch⁴. Le graphe à partitionner est le graphe topologique du maillage \mathcal{G} : les sommets sont les éléments $(e_i)_i$ et il y a une arête entre deux sommets s'ils partagent une face. La description explicite de la microstructure suggère une sous-structuration spécifique où chaque sous-domaine agrège des grains entiers. Cette approche présente plusieurs avantages. L'interface suit l'hétérogénéité du matériau ce qui facilite la convergence lorsqu'un *stiffness scaling* est utilisé [12]. Tous les pré/post-traitements grain-à-grain deviennent *embarrassingly parallel*, comme le calcul de $\nabla \times \mathbf{F}_p^t$ requis par la loi de comportement.

Cette décomposition doit par contre toujours minimiser la taille de l'interface et rester équilibrée. Pour cela, le graphe considéré est le graphe de la microstructure \mathcal{G}_g où les sommets sont les grains $(g_i)_i$ (identifié comme un groupe d'éléments) et il y a une arête (g_i, g_j) entre deux grains s'ils partagent un joint de grains. Afin d'obtenir une décomposition optimale, les sommets du graphe \mathcal{G}_g sont pondérés par le nombre d'éléments finis dans chaque grain $\omega(g_i) = \text{card}(\{e \in g_i\})$. Le poids de l'arête (g_i, g_j) est choisi comme le coup de coupe de la bipartition correspondante du graphe topologique $\omega(g_i, g_j) = \text{card}(\{(e_k, e_l) / e_k \in g_i, e_l \in g_j\})$. La Figure 2 illustre une telle décomposition.

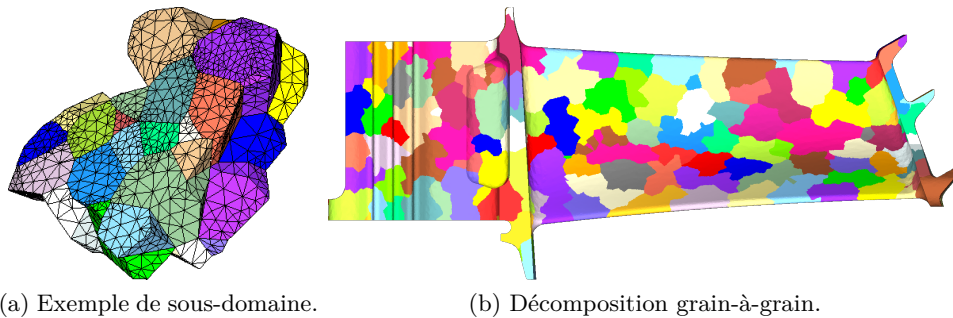


FIGURE 2 – Exemple de décomposition grain-à-grain (8000 grains, 192 sous-domaines).

4.2 Adaptive Multipreconditioned FETI

Le solveur Adaptive Multipreconditioned FETI [13, 14, 15] (AMPFETI) est utilisé pour résoudre les systèmes linéaires tangents successifs. AMPFETI combine la méthode de décomposition de domaine duale FETI [16] et un gradient conjugué multipréconditionné et adaptatif [17]. Dans AMPFETI, la structure additive du préconditionneur FETI est exploitée pour générer plusieurs directions de recherche par itération. La version la plus avancée agrège les contributions des sous-domaines en fonction de leur connectivité [15] afin de limiter la croissance de l'espace de recherche. La stratégie d'adaptation est basée sur le τ -test [17]. À chaque itération, un critère sans coût supplémentaire détermine si une simple itération de gradient conjugué suffit ou si une itération multipréconditionnée est nécessaire.

L'utilisation de préconditionneurs multiples apporte de la robustesse face à l'hétérogénéité des matériaux et à la quasi-incompressibilité (induite ici par l'écoulement plastique), mais AMPFETI partage une faiblesse de la méthode FETI originale : le calcul des inverses généralisés des sous-domaines flottants. Dans ce travail, ce point est traité à l'aide de l'approche de centralité de graphe proposée dans [18]. Concernant le reste de la configuration FETI, le préconditionneur local est celui de Dirichlet avec un *stiffness scaling*, et le projecteur est l'orthogonal. Les

3. <https://github.com/KarypisLab/METIS>

4. <https://gitlab.inria.fr/scotch/scotch>

méthodes en décomposition de domaine utilisés sont implémentés dans la bibliothèque Sia⁵, interfacée avec Z-set⁶ via le module Z-hpc. À titre d'exemple, les résultats d'extensibilité faible obtenus lors du Grand Challenge 2024 du supercalculateur Sator de l'Onera (installation d'une nouvelle tranche de noeuds) sont présentés sur la figure 3. Lors de ce Challenge, l'extensibilité a été évaluée jusqu'à 12288 cœurs et 790 millions d'inconnues.

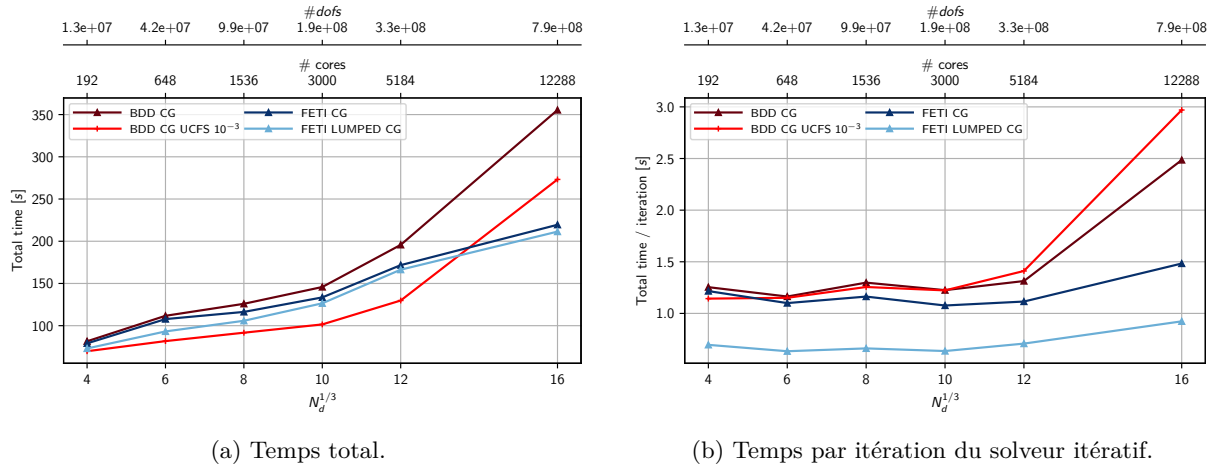


FIGURE 3 – Résultats d'extensibilité faible : cube élastique linéaire (éléments Q1), $H/h = 40$ décomposition automatique. Différentes formulations sont testées.

5 Résultats numériques

Une aube de turbine polycristalline représentative d'un moteur d'hélicoptère est soumise à un chargement thermomécanique simplifié, mais réaliste, reproduisant une montée en régime jusqu'à la vitesse nominale. L'aube a une hauteur de 60 mm, ce qui correspond à un moteur délivrant approximativement 500 kW de puissance, avec un diamètre de turbine libre de 203 mm. Le composant est initialement à température ambiante et au repos. Le chargement est appliqué sur une durée de 50 secondes et comprend les contributions suivantes :

- Un champ de température non uniforme, variant de 400°C à 810°C, est imposé. Ce champ résulte d'un pré-calcul simplifié de conduction thermique en régime permanent. Il tient compte des échanges thermiques induits par l'écoulement externe de gaz chauds et par le refroidissement interne via le canal interne de l'aube. La réponse thermique est calculée en supposant un matériau homogène, en négligeant l'influence de la microstructure.
- Un déplacement normal non nul est prescrit sur les surfaces en contact avec le disque.
- Une pression uniforme de 0.3MPa est appliquée sur l'intrados afin de représenter les forces aérodynamiques induites par l'écoulement.
- L'aube est soumise à un effort centrifuge correspondant à une vitesse de rotation qui croît linéairement jusqu'à 26000 tr/min.

L'analyse quasi-statique utilise un contrôle automatique du pas de temps afin de garantir l'équilibre durant toute la montée en régime. À $t = 50s$, des niveaux de contrainte de von Mises compris entre 400 et 800MPa sont atteints dans la partie supérieure de l'aube. Des surcontraintes locales dépassant 1 GPa sont observées aux surfaces de contact aube–disque à cause des conditions aux limites simplifiées. Ces effets restent confinés et ne sont pas analysés en détail. Les résultats obtenus à la vitesse maximale et pour une microstructure contenant 8000 grains (équivalent à un rayon moyen de grain de 0.76mm) sont présentés sur les Figures 4 et 5.

5. Sia est une bibliothèque opensource, pour le moment hébergée sur les serveurs internes de l'Onera.

6. <http://www.zset-software.com>

Si les zones fortement sollicitées restent principalement définies par les chargements mécaniques et thermiques, la microstructure conduit clairement à des concentrations de contrainte au niveau des joints de grains en raison des désorientations cristallographiques. Ces concentrations de contraintes produisent une plasticité diffuse le long des joints de grains (voir Figure 5). La valeur maximale de l'échelle de couleurs a été limitée à 10^{-3} pour mieux mettre en évidence l'effet des joints de grains. La majeure partie de l'écoulement plastique se produit sur les surfaces en contact avec le disque et dans la partie inférieure de l'aube, où un fort gradient de température est présent. D'un point de vue calcul, le maillage contient 1.2M d'éléments et 5.7M *ddls*, la décomposition compte 192 sous-domaines. Le calcul dure 56 minutes pour 73 systèmes tangents sur le supercalculateur sator de l'Onera. L'un des intérêts du modèle de comportement réside dans sa capacité à distinguer l'écoulement plastique dû aux dislocations mobiles de celui principalement lié aux dislocations géométriquement nécessaires.

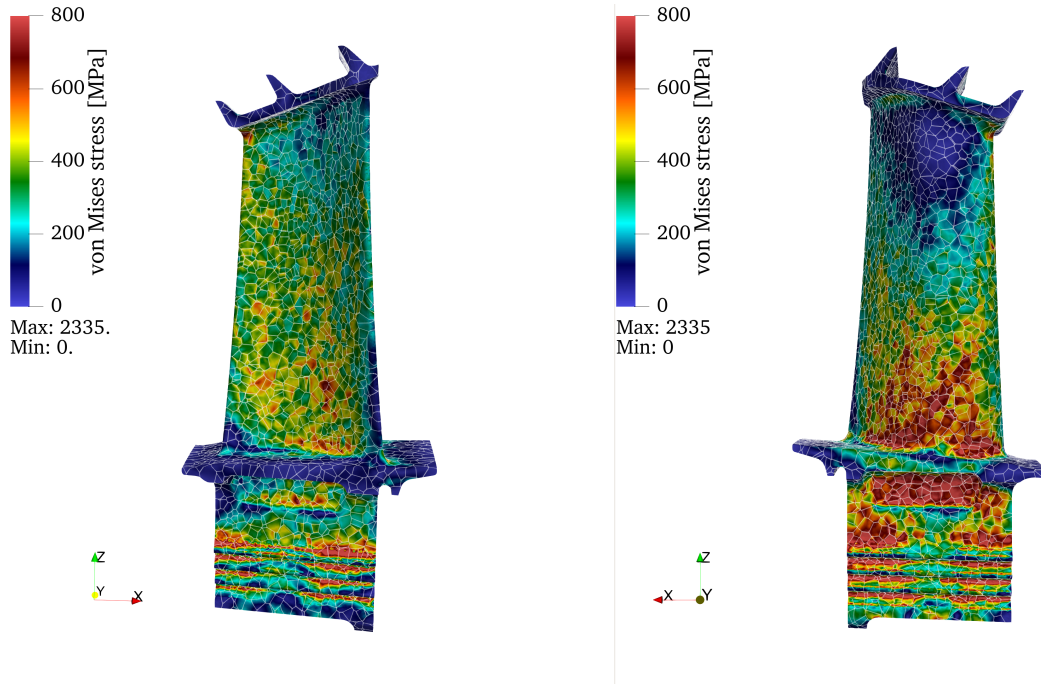


FIGURE 4 – Microstructure à 8000 grains, carte des contraintes de von Mises à $t = 50s$ sur l'intrados et l'extrados. Les joints de grains mis en évidence pour plus de clarté.

6 Conclusion et perspectives

Le *framework* proposé rend possible l'analyse de l'effet de la microstructure sur la tenue mécanique de l'aube *via* des simulations en champs complets. L'approche repose sur trois piliers : une méthode robuste et rapide de génération et d'insertion de microstructure dans des géométries complexes ; un modèle de thermomécanique de plasticité cristalline grande déformation physiquement justifié et des méthodes de calcul haute performance pour simuler les problèmes éléments finis de grandes tailles et hautement non linéaire. Ce *framework* ouvre la voie à une analyse systématique de l'effet de la microstructure et au développement modèles réduits qui apprennent l'effet de celle-ci sur les champs mécaniques. Lors de la conférence, des résultats massifs seront présentés et nous proposerons un tel modèle réduit.

Références

- [1] S. B. Lee, R. A. Lebensohn, and A. D. Rollett. Modeling the viscoplastic micromechanical response of two-phase materials using Fast Fourier Transforms. *International Journal of Plasticity*, 27(5) :707–727, May 2011.

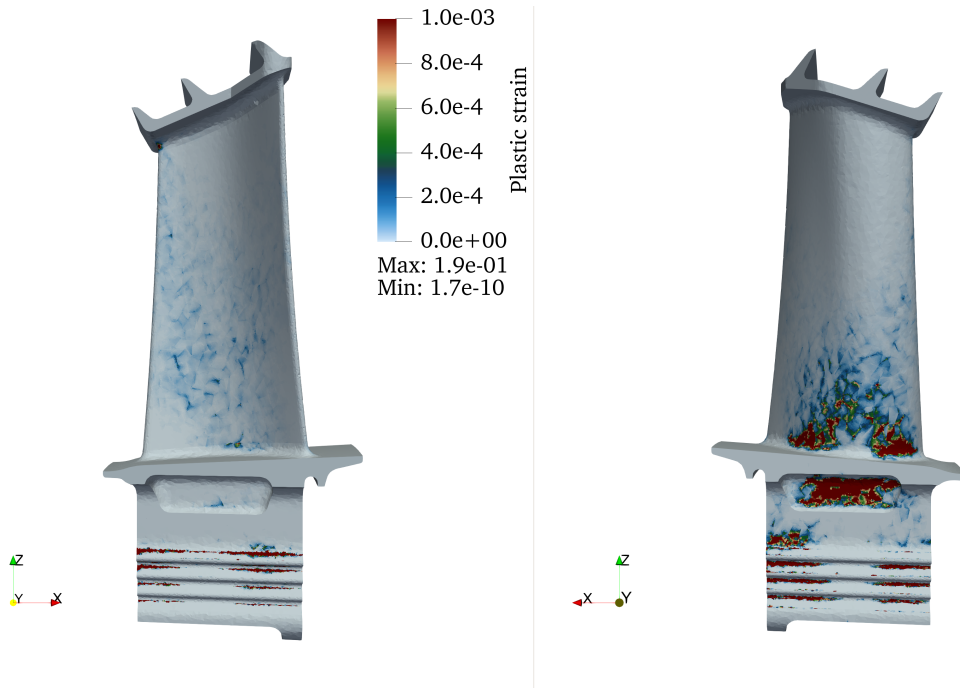


FIGURE 5 – Microstructure à 8000 grains, carte d’indicateur plastique $\sqrt{\mathbf{E}_p : \mathbf{E}_p}$ à $t = 50s$ sur l’intrados et l’extrados.

- [2] Ricardo A. Lebensohn, Anand K. Kanjarla, and Philip Eisenlohr. An elasto-viscoplastic formulation based on fast Fourier transforms for the prediction of micromechanical fields in polycrystalline materials. *International Journal of Plasticity*, 32-33 :59–69, May 2012.
- [3] F. Roters, M. Diehl, P. Shanthraj, P. Eisenlohr, C. Reuber, S.L. Wong, T. Maiti, A. Ebrahimi, T. Hochrainer, H.-O. Fabritius, S. Nikolov, M. Friák, N. Fujita, N. Grilli, K.G.F. Janssens, N. Jia, P.J.J. Kok, D. Ma, F. Meier, E. Werner, M. Stricker, D. Weygand, and D. Raabe. DAMASK – The Düsseldorf Advanced Material Simulation Kit for modeling multi-physics crystal plasticity, thermal, and damage phenomena from the single crystal up to the component scale. *Computational Materials Science*, 158 :420–478, February 2019.
- [4] G Cailletaud, S Forest, D Jeulin, F Feyel, I Galliet, V Mounoury, and S Quilici. Some elements of microstructural mechanics. *Computational Materials Science*, 27(3) :351–374, May 2003.
- [5] F. Coudon, S. Gourdin, A. Boucicaud, T. Rose, and G. Cailletaud. A stochastic approach applied to directionally solidified turbine blades. *International Journal of Solids and Structures*, 184 :193–201, February 2020.
- [6] Christos Skamniotis, Nicolò Grilli, and Alan C. F. Cocks. Crystal plasticity analysis of fatigue-creep behavior at cooling holes in single crystal Nickel based gas turbine blade components. *International Journal of Plasticity*, 166 :103589, July 2023.
- [7] L. Tabourot, M. Fivel, and E. Rauch. Generalised constitutive laws for f.c.c. single crystals. *Materials Science and Engineering : A*, 234-236 :639–642, 1997.
- [8] J.F Nye. Some geometrical relations in dislocated crystals. *Acta Metallurgica*, 1(2) :153–162, 1953.
- [9] Kröner Ekkehart. *Kontinuumstheorie der Versetzungen und Eigenspannungen*. Springer Berlin Heidelberg, 1958.
- [10] A Arsenlis and D.M Parks. Crystallographic aspects of geometrically-necessary and statistically-stored dislocation density. *Acta Materialia*, 47(5) :1597–1611, 1999.
- [11] A. Ma, F. Roters, and D. Raabe. A dislocation density based constitutive model for crystal plasticity fem including geometrically necessary dislocations. *Acta Materialia*, 54(8) :2169–2179, 2006.
- [12] Daniel J. Rixen and Charbel Farhat. A simple and efficient extension of a class of substructure based preconditioners to heterogeneous structural mechanics problems. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 44(4) :489–516, 1999.
- [13] Pierre Gosselet, Daniel Rixen, François-Xavier Roux, and Nicole Spillane. Simultaneous FETI and block FETI : Robust domain decomposition with multiple search directions. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 104(10) :905–927, 2015. nme.4946.

- [14] Christophe Bovet, Augustin Parret-Fréaud, Nicole Spillane, and Pierre Gosselet. Adaptive multipreconditioned FETI : Scalability results and robustness assessment. *Computers & Structures*, pages 1–20, 2017.
- [15] Christophe Bovet, Augustin Parret-Fréaud, and Pierre Gosselet. Two-level adaptation for Adaptive Multipreconditioned FETI. *Advances in Engineering Software*, 152 :102952, February 2021.
- [16] Charbel Farhat and Francois-Xavier Roux. A method of finite element tearing and interconnecting and its parallel solution algorithm. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 32(6) :1205, 1991.
- [17] Nicole Spillane. An Adaptive Multipreconditioned Conjugate Gradient Algorithm. *SIAM J. Sci. Comput.*, 38(3) :A1896–A1918, 2016.
- [18] Christophe Bovet. On the use of graph centralities to compute generalized inverse of singular finite element operators : Applications to the analysis of floating substructures. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 124(9) :1933–1964, 2022.