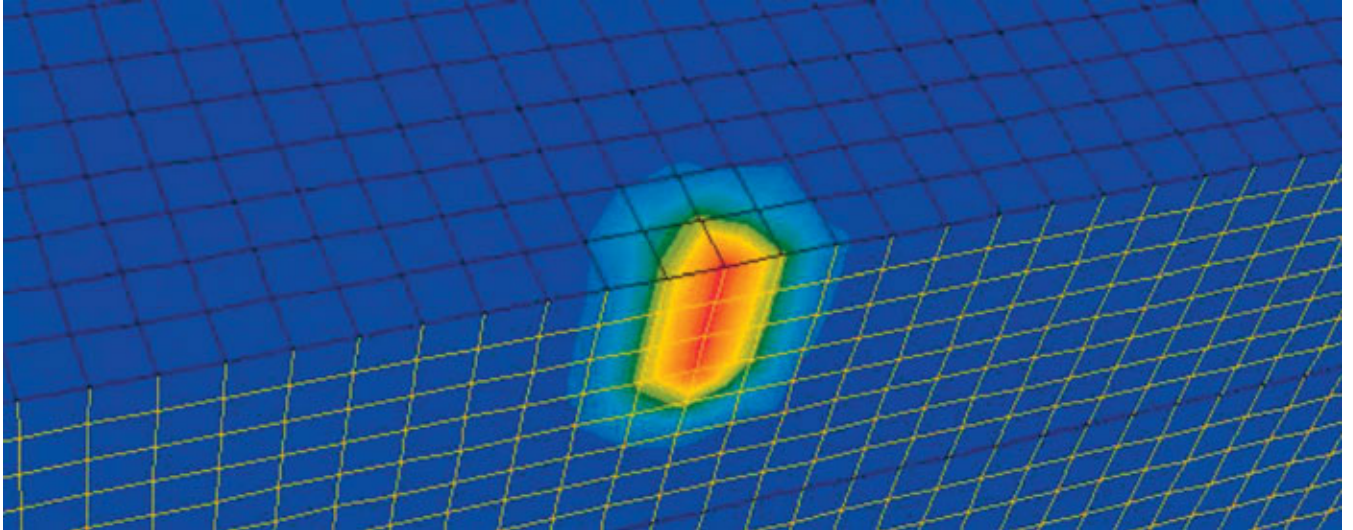


LE SOUDAGE VIRTUEL

La simulation numérique s'avère un moyen efficace de maîtriser les principaux effets du soudage et de s'assurer de la fiabilité des soudures. Pour être prédictive, elle doit modéliser, de manière simplifiée mais pertinente, les interactions entre la physique de l'opération, le comportement du bain de soudage, la thermique, la métallurgie et la mécanique du procédé.



Simulation à l'aide du code Fluent de la répartition, modélisée en 3D, de la température après une impulsion d'un laser Nd:YAG impulsif au cours de la réalisation d'une ligne de fusion au centre d'une plaque en acier inoxydable austénitique.



D'indispensables modèles simples

Les jonctions soudées sont considérées, à plus d'un titre, comme autant de points susceptibles de constituer, tout au long de la vie d'un composant mécanosoudé, des faiblesses structurelles. Et ce quel que soit le procédé de soudage, qu'il consiste à provoquer la fusion locale et brève du "joint" (par la flamme d'un chalumeau, un arc électrique ou le faisceau à haute énergie concentrée d'un laser ou d'un canon à électrons) ou bien à imposer un transport de matière à l'interface par diffusion atomique (à haute température et sous haute pression).

La singularité des jonctions soudées est, en premier lieu, physico-chimique : l'échauffement, très bref jusqu'à haute température et souvent jusqu'à la fusion, modifie l'agencement de la matière au sein du cordon de soudure et dans son environnement immédiat, sur une largeur de quelques millimètres seulement. L'existence même d'une zone fondue est à l'origine de modifications radicales de l'état interne de l'assemblage. D'une part, la solidification de cette zone produit une microstructure particulière, distincte de la microstructure initiale ; d'autre part, le "retrait" dimensionnel de soudage introduit contraintes et déformations résiduelles. Cette action mécanique provient essentiellement des écarts de coefficients de dilatation thermique entre les phases en présence, en particulier entre les phases liquide et solide. Si elles ne sont pas relaxées par un traitement thermique ou mécanique, les

contraintes résiduelles de soudage se cumulent à celles liées au fonctionnement et peuvent accélérer l'endommagement du composant. Autre conséquence, les déformations, elles aussi concentrées autour de la jonction, peuvent induire des déplacements à l'échelle du composant entier et modifier ses caractéristiques dimensionnelles. Enfin, le soudage peut induire des défauts de forme du cordon ou, en interne, des fissures ou des cavités, autant de défauts également susceptibles de limiter la résistance mécanique de l'ensemble.

Dans la grande majorité des cas, ces difficultés ne constituent pas un frein réel à l'application des procédés de soudage. En chaudronnerie traditionnelle, elles sont levées par l'homme de métier qui suit les règles de l'art. Dans l'industrie de pointe, notamment nucléaire, les risques liés aux soudures font l'objet de traitements particuliers. Dès la phase de conception, les codes de dimensionnement considèrent un *coefficient de joint* appliqué aux jonctions. Des essais de mise au point de la fabrication constituent ensuite une phase incontournable, longue et coûteuse. Ceci d'autant plus que l'optimisation du mode opératoire peut imposer de réviser la conception de la structure en adaptant le dessin des joints et le dimensionnement des pièces. Enfin des contrôles non destructifs (CND) sont imposés aux soudures considérées comme critiques après fabrication et, éventuellement, en service.

La **simulation numérique** du soudage peut apporter un appui précieux pour maîtriser les principaux effets du procédé et la fiabilité



des soudures (encadré A, *Qu'est-ce qu'une simulation numérique ?*). L'enjeu scientifique et technologique ? Fournir des résultats prédictifs, ce qui implique de considérer de manière simplifiée les interactions entre la physique du procédé, le comportement du fluide dans le bain de soudage, la thermique, la métallurgie et la mécanique. Les développements concernent en particulier les modèles d'interaction entre procédé et pièce (apport de chaleur et de matière), les lois de comportement mécanique et métallurgique des matériaux lors du soudage, ainsi que les méthodes d'instrumentation permettant de valider ces modèles.

Localiser les contraintes résiduelles

Les codes de dimensionnement mécanique des composants en acier pour l'industrie nucléaire sont appliqués dès le stade de conception d'une centrale afin d'éviter les problèmes de **fatigue**, de fatigue-fluage⁽¹⁾ et de déformation (progressive ou excessive). Basés sur des analyses élastiques des contraintes produites par les différents chargements en service, ces codes imposent des marges très conservatrices concernant le risque de fissuration. Malgré cette précaution, des défauts peuvent apparaître au voisinage de soudures, en raison d'un chargement incidentel ou d'une connaissance insuffisante du comportement des matériaux. Pour expliquer l'apparition du défaut et prévoir son évolution entre deux inspections, il devient nécessaire d'appliquer des modèles fins d'endommagement et de prendre en compte les contraintes résiduelles apportées par l'opération d'assemblage. En effet, une soudure peut constituer dans ce cas un maillon faible, même si les CND la considèrent saine. Sa faiblesse est alors attribuée à son état de contraintes résiduelles et à l'état d'écrouissage⁽²⁾ des matériaux engendré pendant la phase de refroidissement après soudage. Les

chargements en service s'ajoutant à cet état de contraintes initial, c'est leur cumul qu'il faut prendre en compte pour prévoir la tenue en fatigue, fluage et corrosion sous contrainte. En parallèle, l'écrouissage des aciers peut accélérer ces endommagements, soit en provoquant une "fragilisation" du matériau, soit en accentuant l'écart de caractéristiques mécaniques entre le métal de base et celui de la soudure. Ce dernier phénomène peut aboutir à une concentration de déformations dans l'un ou dans l'autre.

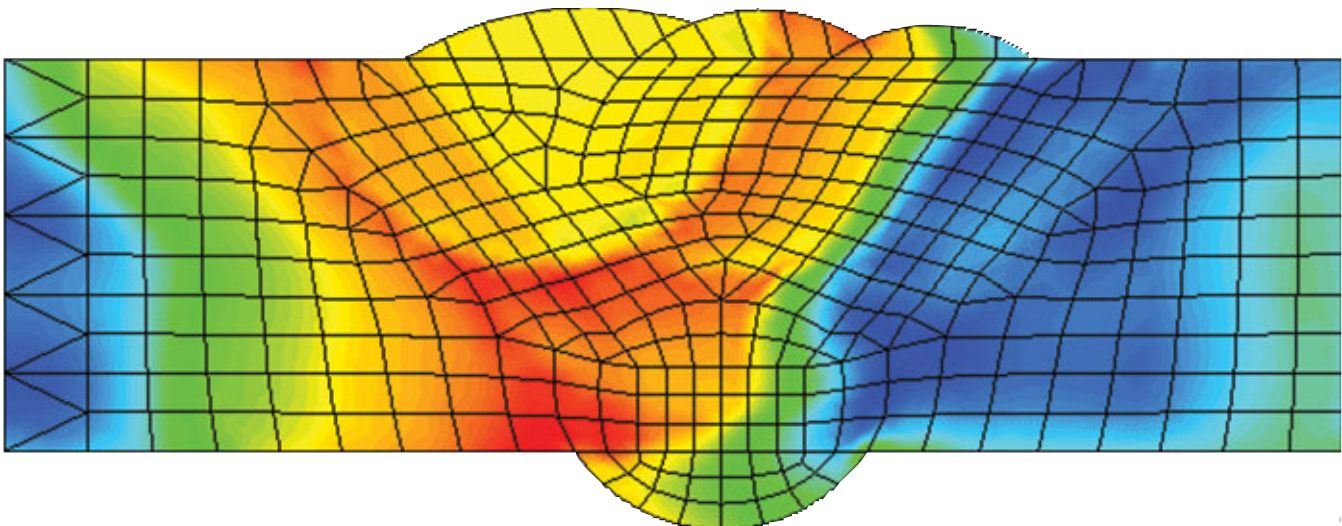
La simulation des contraintes et déformations résiduelles de soudage requiert un minimum de données : les comportements thermique et mécanique du matériau doivent être caractérisés jusqu'à la température de fusion, et il est nécessaire de connaître parfaitement l'évolution de la source de chaleur dans l'espace et dans le temps. De plus, rien ne doit être ignoré de la position des différentes passes de soudure et de la séquence des dépôts, et on doit imposer les bonnes conditions aux limites thermiques et mécaniques. Un recalage à l'aide de données expérimentales telles que la dimension des zones fondues et, le cas échéant, la température pendant le soudage reste indispensable.

Les simulations permettent ainsi de comparer différents procédés sur des critères tels que les niveaux maximaux de contraintes résiduelles ou d'écrouissage atteints, et d'évaluer l'effet d'une modification des conditions opératoires. Ainsi, pour des réparations des générateurs de vapeur du réacteur Phénix, une étude numérique préalable a permis d'optimiser le procédé de soudage pour minimiser les contraintes et déformations résiduelles, suspectées d'accélérer fortement les processus d'endommagement (figure 1).

- (1) Déformation irréversible d'un matériau soumis à une contrainte mécanique.
- (2) Travail d'un métal à une température inférieure à sa température de recuit.



Figure 1. Modélisation à l'aide du code aux éléments finis Castem 2000 de la répartition des contraintes de von Mises après une soudure à l'arc (TIG) circumférentielle de deux tuyauteries inoxydables austénitiques d'un générateur de vapeur du réacteur Phénix, réalisée en cinq passes. Les contraintes les plus élevées sont constatées au pied de la première.



L'enjeu pour les années à venir est de poursuivre l'amélioration des modèles, en particulier pour les besoins des réacteurs du futur, en s'intéressant à des matériaux pouvant présenter des transformations de phase à température élevée.

Une simulation thermique pertinente, étape incontournable

Le besoin de simulation numérique, dans le cas du soudage par laser Nd:YAG par points, trouve son origine dans la volonté de mieux connaître les assemblages réalisés par cette méthode au centre CEA de Valduc. Ces derniers doivent en effet répondre à certaines

spécifications en termes de taille de défauts (bulles), de déformations admissibles et de tenue mécanique.

Ce principe de soudage repose sur la fusion localisée de la matière au point d'impact du faisceau. La durée d'une impulsion laser est d'une dizaine de millisecondes, la fréquence de tir de quelques hertz. Un recouvrement partiel des points de soudure assure la continuité du cordon, dont la largeur et la profondeur sont de quelques millimètres en moyenne.

La faisabilité de la simulation de ce type de soudage a été démontrée. L'approche thermique en régime transitoire a nécessité le développement d'un sous-programme dans le logiciel Fluent v. 6 utilisant la **méthode des volumes finis**. Il est ainsi possible d'introduire dans la simulation les paramètres du procédé tels que le pas d'avance, l'énergie du faisceau laser, la durée et la fréquence des impulsions. Les échanges thermiques par **convection** naturelle et par rayonnement sont traités. Le dépôt d'énergie apporté lors du soudage est simulé empiriquement par un flux d'énergie volumique imposé durant chaque impulsion. La validation de ce modèle repose sur la prévision de la taille de la zone fondue ainsi que sur la réalisation expérimentale d'une ligne de fusion au centre d'une plaque en acier inoxydable austénitique⁽³⁾ (illustration). Cependant, il faut garder à l'esprit la difficulté d'une mesure correcte de la température en raison des forts gradients thermiques engendrés et de la faible étendue de la zone affectée. Un plan

d'expériences a été réalisé en vue de déterminer la relation entre la forme du bain fondu et les paramètres du procédé et quantifier l'influence de ces derniers et leurs éventuels couplages (voir *La modélisation comportementale*). Les résultats constituent une base de validation de la **modélisation**.

L'objectif de cette approche purement thermique est de pouvoir traiter consécutivement les aspects thermomécaniques. Une prochaine étape consistera à prendre également en compte les phénomènes **thermohydrauliques**. Une modélisation plus physique nécessitera la description de la génération du capillaire (*keyhole*) formé dans le bain lors de l'impulsion laser et dont la fermeture est à l'origine de certains défauts (bulles).

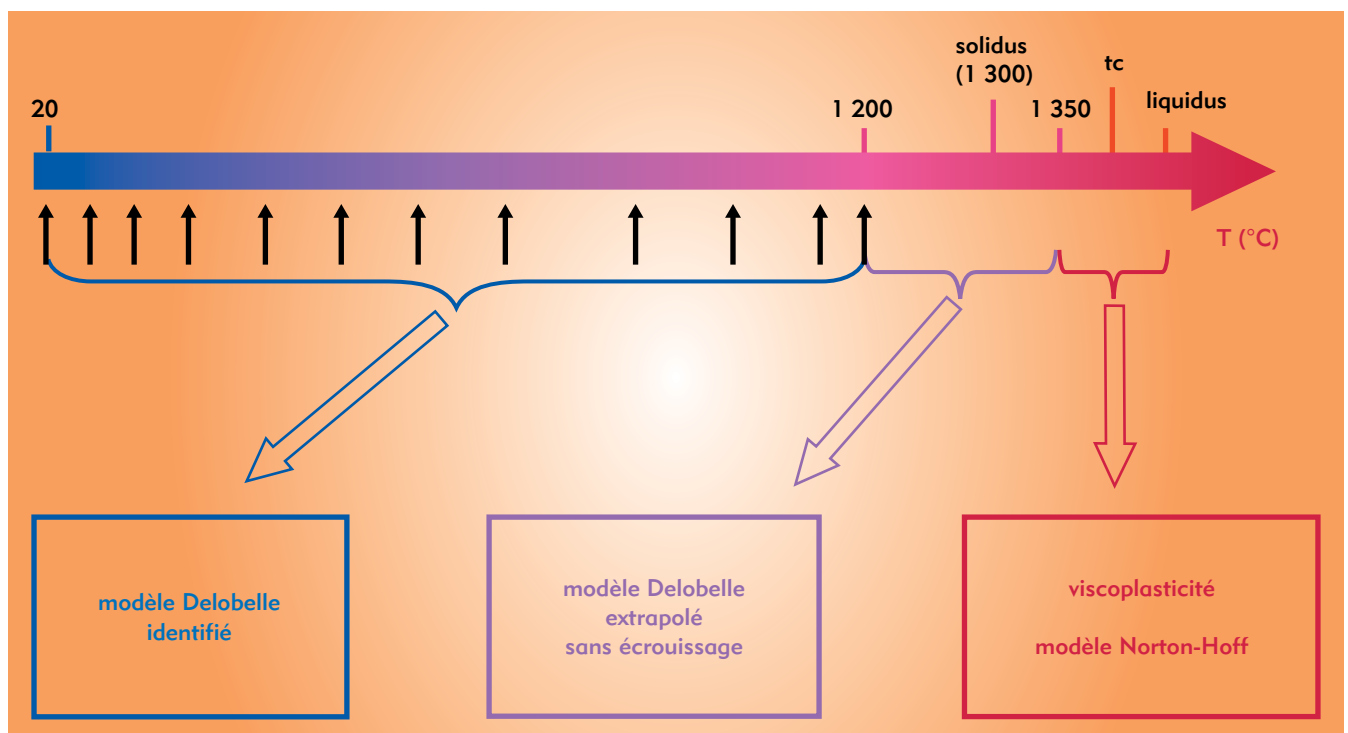
Prévoir l'apparition de défauts en cours de soudage

Le risque de fissuration du cordon en cours de soudage est surtout lié à la composition des nuances utilisées et à l'intensité des déformations qu'impose le retrait de solidification. L'apparition de ce défaut étant difficilement prévisible empiriquement, l'industrie souhaiterait pouvoir maîtriser ce risque par la simulation numérique du procédé.

Un critère thermomécanique local d'amorçage de la fissuration est développé au centre CEA de Saclay. Les conditions de fissuration sont étudiées au moyen d'un essai de "soudabilité" qui permet de forcer l'apparition du défaut dans un matériau particulièrement fissurant, un acier inoxydable austénitique. Cet essai Varestreint (*variable restraint*) consiste à solliciter le matériau par pliage au cours de la réalisation d'une ligne

Figure 2. La prédiction des effets mécaniques du soudage passe par une description pertinente du comportement du matériau sur une plage de température très étendue. Ici, dans le cas d'un acier inoxydable austénitique, une loi de comportement élasto-viscoplastique, identifiée jusqu'à 1 200 °C, est extrapolée jusqu'au domaine de transformation solide-liquide.

(3) Acier caractérisé par une structure (assemblage d'atomes) cubique à faces centrées.

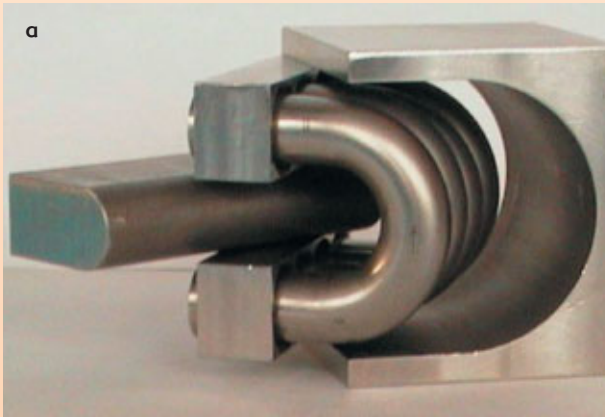




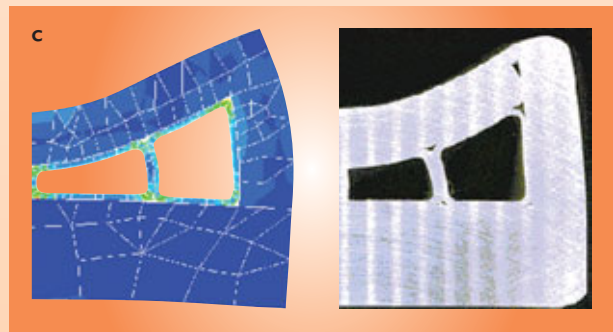
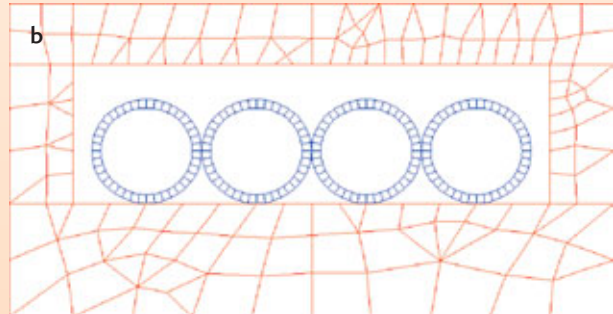
Ce que peut prédire une simulation de compaction isostatique à chaud

La simulation numérique d'une opération de soudage diffusion par compaction isostatique à chaud (CIC) permet notamment de prédire les évolutions dimensionnelles au cours du cycle de chargement en température et en pression d'un assemblage de pièces réalisé selon cette technique.

Une des particularités de cette dernière repose en effet sur la difficulté de prévoir l'accostage des différents constituants, c'est-à-dire la manière dont les pièces à assembler (exemple : figure A) vont se déplacer les unes par rapport aux autres et se déformer pour venir combler les jeux inévitables. Le **maillage** d'une section d'une pièce complexe (figure B) tient compte de ces jeux. Deux écoulements peuvent se produire dans cette pièce. Le premier, recherché, est une expansion des tubes liée à la circulation du gaz à l'intérieur de ceux-ci jusqu'à ce qu'ils se touchent entre eux et qu'ils touchent les plaques supérieures et latérales et se soudent alors. Le deuxième, indésirable, est un fléchissement de la plaque supérieure.



La **simulation numérique** de la montée en température et en pression de cette pièce montre que le fléchissement est important et que le cycle choisi ne permet pas de refermer les ultimes porosités. Le champ de déformation plastique est comparé à une photographie de l'assemblage coupé après CIC (figure C). La comparaison montre que le modèle prévoit correctement les mouvements relatifs des constituants réels. Validé, il a permis de définir les épaisseurs de plaque et le cycle de CIC nécessaires pour souder convenablement cet assemblage.



de fusion par procédé TIG (*tungsten inert gas*). Les défauts obtenus sont ensuite caractérisés en quantité et en longueur. Les possibilités d'instrumentation locale étant limitées, les résultats expérimentaux sont complétés par une simulation numérique des conditions thermomécaniques de l'essai. Or la simulation mécanique réaliste de l'essai exige l'emploi d'une loi de comportement adaptée, dans un domaine de température allant de la température ambiante jusqu'à celui de la fusion (environ 1 400 °C). Une campagne de caractérisation mécanique est donc réalisée en sélectionnant des valeurs et des vitesses de déformation représentatives de ce que subit le matériau durant ces essais. Les résultats, provenant d'essais de traction et de compression, permettent d'écrire une loi de comportement de type élasto-viscoplastique unifiée jusqu'à 1 200 °C, ensuite extrapolée par un comportement viscoplastique jusqu'au domaine de fusion (figure 2). La simulation thermomécanique au moyen du code aux éléments finis Abaqus® permet d'interpréter les observations et les mesures. La comparaison des résultats expérimentaux et numériques conduit à proposer un critère

thermomécanique d'amorçage de la fissuration lors de la solidification dont les prévisions sont en bon accord avec les observations des essais (Varestraint et autres).

Souder sans fusion, à 1 000 °C sous 1 000 bars

La simulation numérique concerne également le soudage-diffusion sous compaction isostatique à chaud (CIC), qui permet d'assembler des pièces de géométries très complexes. Dans cette technique, les différents éléments sont placés dans un conteneur mis sous vide, soudé, puis placé dans l'enceinte de CIC. Le soudage des différentes surfaces est obtenu à l'état solide, grâce à l'application simultanée d'une température élevée (entre 80 et 85 % de la température de fusion) et d'une forte pression (1 000-1 500 bars). Très reproductible dans la mesure où la source de chaleur est maîtrisée, ce procédé se prête naturellement à la simulation numérique. La prédiction des contraintes résiduelles développées pendant le refroidissement de la pièce soudée met en œuvre les équations classiquement utilisées pour le soudage

impliquant une fusion locale, la gestion de la phase liquide et la solidification étant ici supprimées. Les contraintes proviennent de la présence de gradient thermique dans les pièces et/ou de différentiels de coefficient de dilatation entre les matériaux assemblés. La simulation fait appel à des modèles thermomécaniques multimatériaux avec la prise en compte éventuelle de changement de phase à l'état solide et de modification des propriétés locales (encadré). Comme dans les exemples précédents, le simulation permet donc *in fine* d'optimiser l'opération de soudage.

André Fontes

Direction de la recherche technologique
CEA centre de Saclay

Yves Lejeail

Direction de l'énergie nucléaire
CEA centre de Cadarache

Ève Lariotte

Direction des applications militaires
CEA centre de Valduc

Hélène Burlet

Direction de la recherche technologique
CEA centre de Grenoble

Qu'est-ce qu'une simulation numérique ?

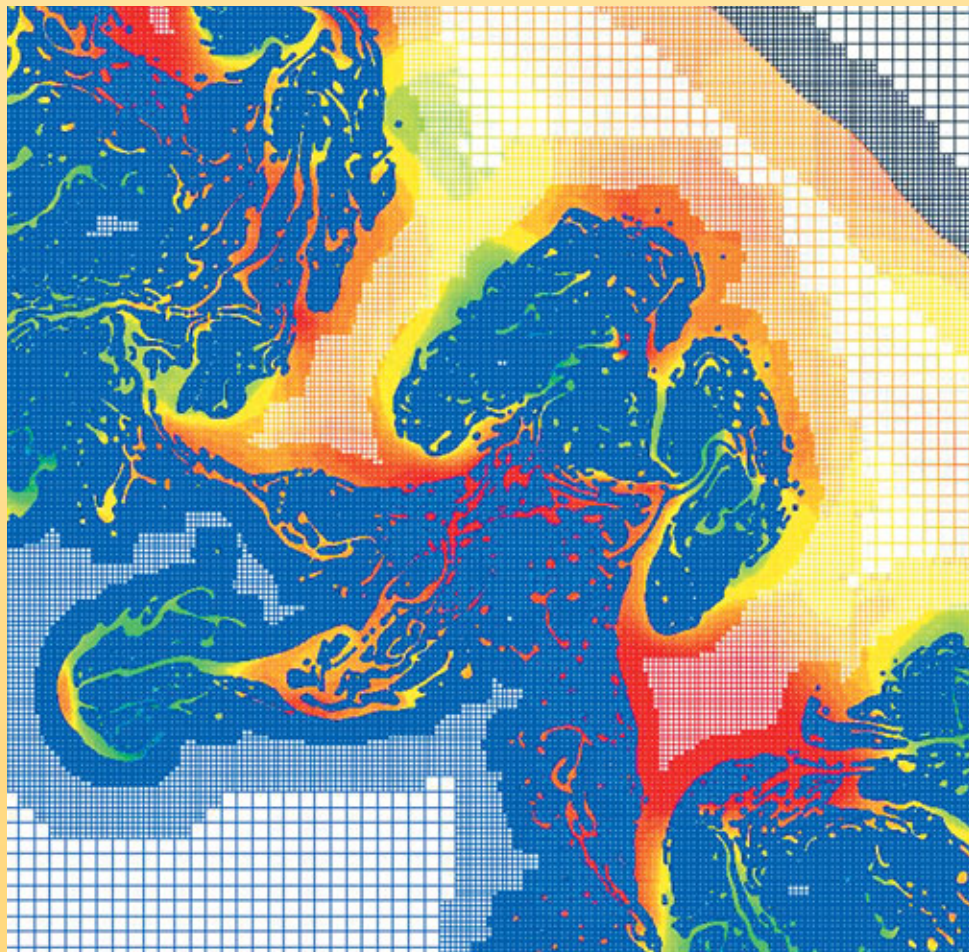
La **simulation numérique** consiste à reproduire par le calcul le fonctionnement d'un système, préalablement décrit par un ensemble de **modèles**. Elle s'appuie sur des méthodes mathématiques et informatiques spécifiques. Les principales étapes de la réalisation d'une étude par simulation numérique sont communes à de nombreux secteurs de la recherche et de l'industrie, en particulier le nucléaire, l'aérospatial ou l'automobile.

En chaque point de l'"objet" considéré, plusieurs grandeurs physiques (vitesse, température...) décrivent l'état et l'évolution du système étudié. Celles-ci ne sont pas indépendantes, mais reliées et régies par des **équations**, généralement **aux dérivées partielles**. Ces équations constituent la traduction mathématique des lois de la physique qui modélisent le comportement de l'objet. Simuler l'état de ce dernier, c'est déterminer – idéalement en tout point – les valeurs numériques de ses **paramètres**. Comme il y a un nombre infini de points, donc une infinité de valeurs à calculer, cet objectif est inaccessible (sauf dans des cas bien particuliers où l'on peut résoudre les équations de départ à l'aide de formules analytiques). Une approximation naturelle consiste donc à ne considérer qu'un nombre fini de points. Les valeurs des paramètres à calculer sont ainsi en nombre fini et les opérations nécessaires deviennent abordables grâce à l'ordinateur. Le nombre effectif de points traités dépendra bien sûr de la puissance de celui-ci : plus il sera élevé, meilleure sera finalement la description de l'objet. À la base du calcul des paramètres comme à la base de la simulation numérique, il y a donc la réduction de l'infini au fini, la **discrétisation**.

Comment opère-t-on précisément à partir des équations mathématiques du modèle ? Deux méthodes sont très souvent utilisées, respectivement représentatives des méthodes de **calcul déterministe**, qui résolvent les équations régissant les phénomènes étudiés après avoir discrétisé les variables, et des méthodes de **calcul statistique** ou **probabiliste**.

Le principe de la première, connue sous le nom de **méthode des volumes finis**, est antérieur à l'usage des ordinateurs. Chaque point de l'objet est assimilé simplement à un petit volume élémentaire (un cube par exemple), d'où le nom de *volume fini*. Un plasma, par exemple, est ainsi vu comme un ensemble ou un réseau de volumes contigus qui, par analogie avec la trame d'un tissu, sera dénommé **maillage**. Les paramètres de l'état de l'objet sont maintenant définis dans chaque maille du maillage. Pour chacune d'elles, en reformulant les équations mathématiques du modèle par des moyennes volumiques, il sera alors possible de construire des *relations algébriques* entre les paramètres de la maille et ceux de ses voisines. Au total, il y aura autant de relations que de paramètres inconnus et ce sera à l'ordinateur de résoudre le *système* de relations obtenu. Il faudra pour cela recourir aux techniques de l'**analyse numérique** et programmer des **algorithmes** spécifiques.

L'accroissement de la puissance des ordinateurs a permis d'augmenter la finesse de discrétisation, permettant de passer de quelques dizaines de mailles dans les années soixante à plusieurs dizaines de milliers dans les années quatre-vingt, à des millions dans les années quatre-vingt-dix et jusqu'à la dizaine de milliards de mailles aujourd'hui (machine Tera de la Direction



Exemple d'image d'une simulation 2D d'instabilités réalisée avec le supercalculateur Tera du CEA. Le calcul a fait appel au maillage adaptatif, qui se fait plus fin dans les zones où les phénomènes sont les plus complexes.

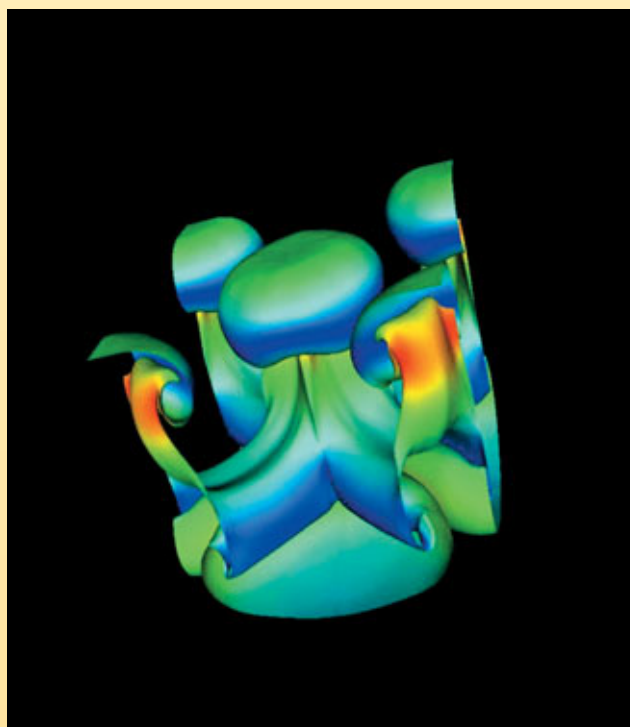
des applications militaires du CEA), chiffre qui devrait décupler à la fin de la décennie.

Un raffinement du maillage, le **remailage adaptatif**, consiste à ajuster la taille des mailles en fonction des circonstances, par exemple en les rendant plus petites et plus serrées aux interfaces entre deux milieux, là où les phénomènes physiques sont les plus complexes, ou là où les variations sont les plus importantes.

La méthode des volumes finis s'applique dans des contextes physiques et mathématiques très variés. Elle autorise toute forme de maille (cube, hexaèdre, tétraèdre...) et le maillage peut être modifié durant le calcul, en fonction de critères géométriques ou physiques. Enfin, elle est aisée à mettre en œuvre dans le contexte des **ordinateurs parallèles** (encadré B, **Les moyens informatiques de la simulation numérique hautes performances**), le maillage pouvant en effet faire l'objet d'un découpage pour des calculs sur ce type de machines (exemple figure B, p. 13).

Appartiennent à la même famille la **méthode des différences finies**, cas particulier de la **méthode des volumes finis** où les côtés des mailles sont orthogonaux, et la **méthode aux éléments finis**, qui peut juxtaposer divers types de mailles. La deuxième grande méthode, dite de **Monte-Carlo**, est particulièrement adaptée pour simuler le *transport de particules*, par exemple des neutrons ou des photons d'un **plasma** (voir *Les simulations en physique des particules*). Un tel transport est en fait caractérisé par une succession d'étapes lors desquelles chaque particule peut subir différents événements (diffusion, absorption, émission...) possibles *a priori*. Les probabilités élémentaires de chacun de ces événements sont connues individuellement pour chaque particule.

Il est alors naturel d'assimiler un point du plasma à une particule. Un ensemble de particules, en nombre fini, va constituer un échantillon représentatif de l'infinité de particules du plasma, comme lors d'un sondage statistique. D'étape en étape, l'évolution de l'échantillon sera déterminée grâce à des tirages au hasard (d'où le nom de la méthode). L'efficacité de cette méthode, mise en œuvre à Los Alamos dès les années 1940, dépend bien sûr de la qualité statistique des tirages au hasard.



CEA

Simulation 3D réalisée à l'aide du supercalculateur Tera installé fin 2001 au centre CEA/DAM Île-de-France à Bruyères-le-Châtel (Essonne).

Il existe pour cela des méthodes de nombres aléatoires, bien adaptées au traitement par un ordinateur.

Les méthodes des volumes finis et de Monte-Carlo ont suscité et suscitent de nombreuses études mathématiques. Ces études s'attachent notamment à préciser la convergence de ces méthodes, c'est-à-dire comment la précision de l'approximation varie avec le nombre de mailles ou de particules. Cette question est naturelle lors de la confrontation des résultats de la simulation numérique à ceux de l'expérience.

Comment se déroule une simulation numérique ?

Il est souvent question d'*expérience numérique* pour souligner l'analogie entre la pratique d'une simulation numérique et la conduite d'une expérience de physique.

Brièvement, cette dernière utilise un dispositif expérimental, configuré selon des conditions initiales (de température, de pression...) et des paramètres de contrôle (durée de l'expérience, des mesures...). Durant l'expérience, le dispositif produit des points de mesures qui sont enregistrés. Ces enregistrements sont ensuite analysés et interprétés.

Dans une simulation numérique, le dispositif expérimental consiste en un ensemble de programmes informatiques exécutés sur des ordinateurs. Les **codes** ou **logiciels de calcul** sont la traduction, à travers des algorithmes numériques, des formulations mathématiques des modèles physiques étudiés. En amont et en aval du calcul, les *logiciels d'environnement* effectuent la gestion de plusieurs opérations complexes de préparation des calculs et de leur dépouillement.

Les données initiales de la simulation comporteront d'abord la délimitation du domaine de calcul à partir d'une représentation approchée des formes géométriques (produite par le dessin et la CAO, conception assistée par ordinateur), suivie de la discrétisation de ce

domaine de calcul sur un maillage, ainsi que les valeurs des paramètres physiques sur ce maillage et les paramètres de contrôle du bon déroulement des programmes... Toutes ces données (produites et gérées par les logiciels d'environnement) seront saisies et vérifiées par les codes. Les résultats des calculs proprement dits, c'est-à-dire les valeurs numériques des paramètres physiques, seront sauvegardés au fur et à mesure. En fait, un protocole spécifique structurera les informations produites par l'ordinateur afin de constituer une base de données numériques.

Un protocole complet organise l'échange informatique des informations requises (dimensions notamment) suivant des formats prédéfinis : *modeleur*⁽¹⁾, *mailleur*⁽²⁾, *découpeur de maillage*, *code*

(1) Le *modeleur* est un outil qui permet la création et la manipulation de points, courbes et surfaces en vue par exemple de la création d'un maillage.

(2) Les formes géométriques d'un maillage sont décrites par des ensembles de points reliés par des courbes et des surfaces (de Bézier par exemple) qui en représentent les frontières.



de calculs, logiciel de visualisation et d'analyse. Les études de *sensibilité* des résultats (au maillage et aux modèles) font partie des "expériences" numériques.

À l'issue des calculs (résolution numérique des équations décrivant les phénomènes physiques qui se déroulent dans chaque maille), l'analyse des résultats par des spécialistes reposera sur l'exploitation de la base de données numériques. Elle comportera plusieurs étapes : extraction sélective des données (selon le paramètre physique recherché) et visualisation, extraction et transfert des données pour calculer et visualiser des diagnostics.

Le parallèle entre la conduite d'un cas de calcul, d'une expérience numérique et la conduite d'une expérience physique ne s'arrête pas là : les résultats numériques seront comparés aux résultats expérimentaux. Cette analyse comparative, effectuée sur la base de critères quantitatifs standardisés, fera appel et à l'expérience

et à l'art de l'ingénieur, du physicien, du mathématicien. Elle débouchera sur de nouvelles améliorations des modèles physiques et des programmes informatiques de simulation.

Bruno Scheurer

Direction des applications militaires
CEA centre DAM-Ile de France

Frédéric Ducros et Ulrich Bieder

Direction de l'énergie nucléaire
CEA centre de Grenoble

L'exemple d'un calcul de thermohydraulique

La mise en œuvre d'un protocole de simulation numérique peut être illustrée par les travaux réalisés par l'équipe de développement du logiciel de calcul **thermohydraulique** Trio U. Ces travaux se sont déroulés dans le cadre d'une étude faite en collaboration avec l'Institut de radioprotection et de sûreté nucléaire (IRSN). L'objectif était d'obtenir des données très précises pour fournir à l'ingénieur les sollicitations en température à la paroi des composants d'un réacteur à eau sous pression dans le cas d'un accident grave impliquant une circulation naturelle turbulente de gaz chauds. Cette étude requiert la modélisation simultanée d'effets "système" à grande échelle et de phénomènes **turbulents** à petite échelle (encadré F, **Modélisation et simulation des écoulements turbulents**).

Elle débute par la définition du modèle de calcul global (figure A), suivie de la réalisation du modèle CAO et du maillage correspondant avec des logiciels du commerce (figure B). Les maillages de plus de cinq millions de mailles exigent l'utilisation de puissantes stations graphiques. Dans cet exemple, le maillage d'un générateur de vapeur (figures C et D) a été découpé pour répartir les calculs sur huit processeurs d'un ordinateur parallèle du CEA : chaque couleur symbolise une zone affectée à un processeur particulier. Les calculs, dont les conditions aux limites sont données par un calcul "système" (Icare-Cathare), produisent des résultats qu'il appartient aux spécialistes d'interpréter. En l'occurrence, les visualisations sur des stations graphiques des valeurs instantanées des champs de vitesse montrent l'impact d'un panache chaud sur la plaque tubulaire du

générateur de vapeur (coupe dans le champ de vitesses à gauche de la figure E) et la température instantanée dans la boîte à eau (à droite).

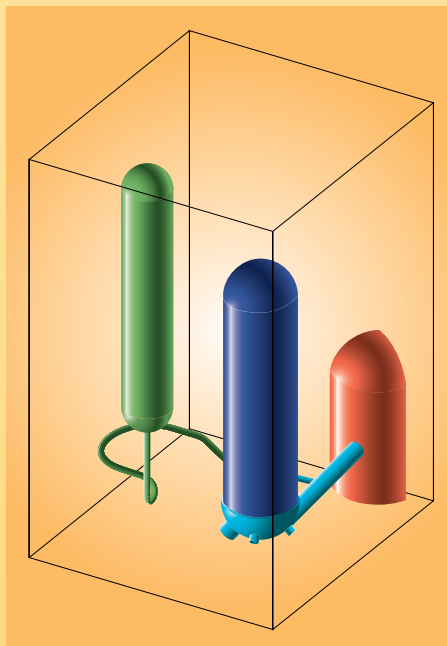


Figure A.
Domaine de calcul global incluant une partie de la cuve réacteur (rouge), la conduite de sortie (branche chaude en bleu clair), le générateur de vapeur (bleu foncé) et le pressuriseur (vert).

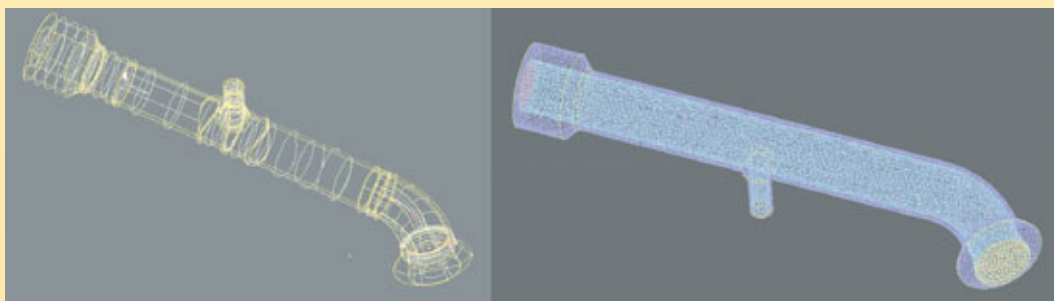
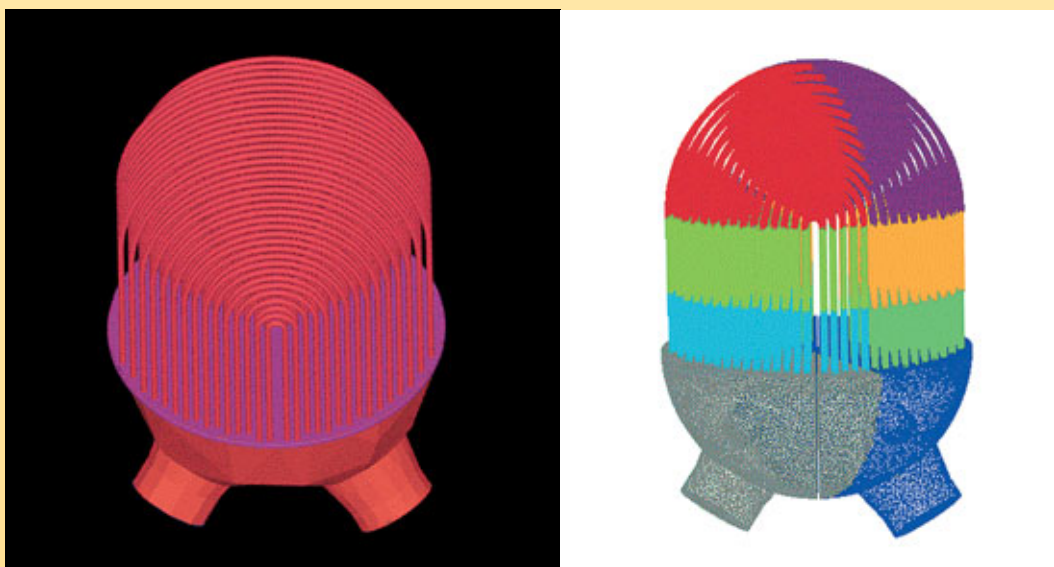


Figure B. Modèle CAO de la branche chaude en sortie de la cuve réacteur (à gauche) et son maillage non structuré (à droite).



Figures C et D.

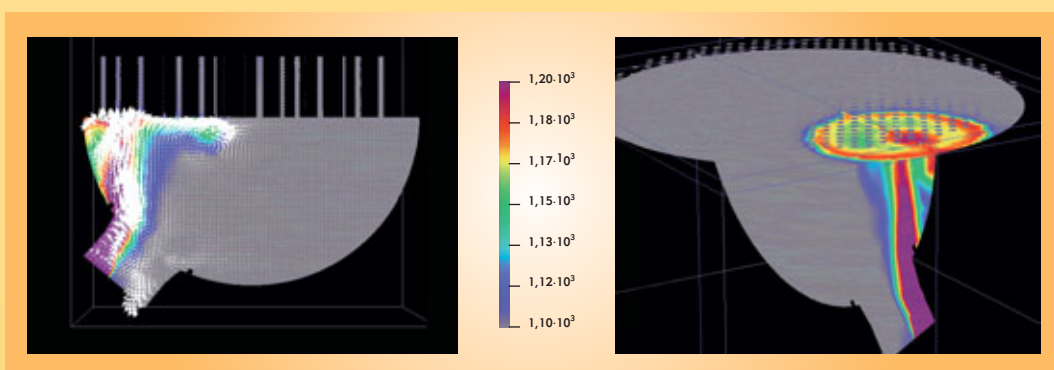


Figure E.

Les moyens informatiques de la simulation

Effectuer des **simulations numériques** plus précises impose de mettre en œuvre des **modèles** physiques et numériques eux-mêmes plus précis portant sur des descriptions plus fines des objets simulés (encadré A, *Qu'est-ce qu'une simulation numérique ?*). Tout ceci nécessite des progrès dans le domaine des logiciels de simulation mais aussi une augmentation importante de la capacité des équipements informatiques sur lesquels ces logiciels sont utilisés.

Processeurs scalaires et vectoriels

Au cœur de l'ordinateur, le processeur est l'unité de base qui, déroulant un programme, effectue les calculs. Il en existe deux grands types, les **processeurs scalaires** et les **processeurs vectoriels**. Les premiers exécutent des opérations portant sur des nombres élémentaires (scalaires), par exemple l'addition de deux nombres. Les seconds exécutent des opérations portant sur des ensembles de nombres (vecteurs), par exemple additionner deux à deux les nombres composant deux ensembles de 500 éléments. À ce titre, ils sont particulièrement adaptés à la simulation numérique : lors de l'exécution d'une opération de ce type, un processeur vectoriel peut fonctionner à une vitesse proche de sa performance maximale (crête). La même opération avec un processeur scalaire exige de nombreuses opérations indépendantes (opérations par composante des vecteurs) qui s'exécutent à une vitesse bien inférieure à sa vitesse crête. L'avantage principal des processeurs scalaires est leur prix : il s'agit de microprocesseurs généralistes dont les coûts de conception et de fabrication peuvent être amortis sur de larges marchés.

Forces et contraintes du parallélisme

Les processeurs récents permettent de hautes performances, d'une part en utilisant une fréquence de fonctionnement plus élevée, d'autre part en cherchant à exécuter en même temps

plusieurs opérations : c'est un premier niveau de **parallélisme**. L'accélération de la fréquence est limitée par l'évolution de la technologie micro-électronique, tandis que les dépendances entre instructions à exécuter par le processeur limitent le parallélisme possible. La mise en œuvre simultanée de plusieurs processeurs constitue un second niveau de parallélisme, qui permet d'obtenir des performances accrues à condition de disposer de programmes capables d'en tirer parti. Alors que le parallélisme au niveau des processeurs est automatique, celui *entre processeurs* dans un ordinateur parallèle est à la charge du programmeur, qui doit découper son programme en morceaux indépendants et prévoir entre eux les communications nécessaires. On procède souvent par un découpage du domaine sur lequel porte le calcul, chaque processeur étant chargé de simuler le comportement d'un domaine, et par l'établissement de communications régulières entre processeurs afin de garantir la cohérence d'ensemble du calcul. Pour obtenir un programme parallèle efficace, il faut s'assurer de l'équilibrage de charge entre processeurs et chercher à limiter le coût des communications.

Les différentes architectures

Les équipements informatiques ont différentes fonctions. À partir de son ordinateur de travail sur lequel il prépare ses calculs et en analyse les résultats, l'utilisateur accède à des moyens de calcul, de stockage, et de visualisation partagés, mais beaucoup plus puissants que les siens propres. L'ensemble de ces équipements sont reliés par des réseaux informatiques permettant de faire circuler les informations entre eux avec des débits compatibles avec le volume de données produites, pouvant atteindre 1 **téraoctet** (1 To = 10^{12} octets) de données pour une seule simulation.

Les grands équipements de calcul sont généralement appelés **supercalculateurs**. Ils atteignent aujourd'hui des puissances qui se chiffrent en **téraflops** (1 Tflops = 10^{12} opérations de calcul par seconde).

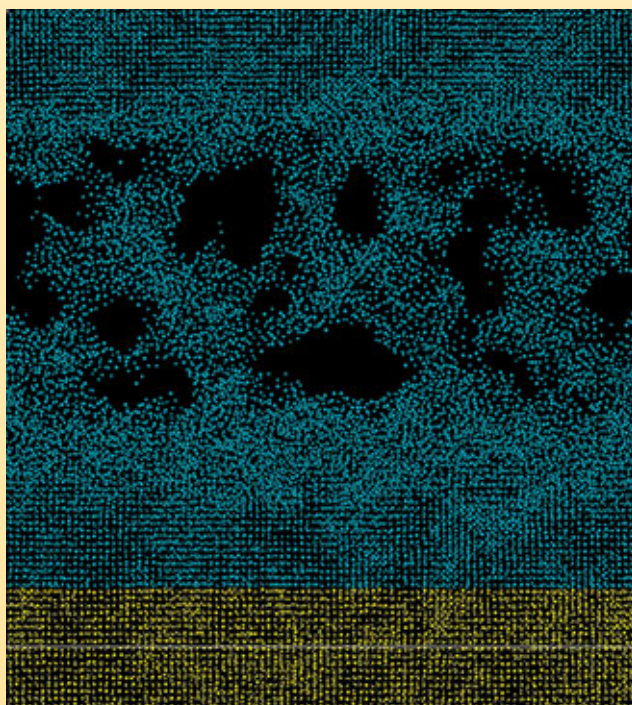
Il existe aujourd'hui trois grands types de supercalculateurs : les supercalculateurs vectoriels, les grappes de mini-ordinateurs à mémoire partagée et les grappes de PC (l'ordinateur que chacun possède chez soi). Le choix entre ces architectures dépend largement des applications et de l'utilisation visées. Les supercalculateurs vectoriels disposent de processeurs très performants mais dont il est difficile d'augmenter la puissance en ajoutant des processeurs. Les grappes de PC sont peu coûteuses mais mal adaptées à des environnements où de nombreux utilisateurs font beaucoup de calculs très gourmands en puissance machine, en mémoire et en entrées-sorties.

Ce sont ces considérations qui ont en particulier conduit la Direction des applications militaires (DAM) du CEA à choisir pour son programme simulation (voir *Le programme Simulation : la garantie des armes sans essais nucléaires*) les architectures de type grappe de mini-ordinateurs à mémoire partagée, encore appelées **clusters de SMP** (Symmetric Multi-Processor). Un tel système utilise comme brique de base un mini-ordinateur com-



CEA

Installée en décembre 2001 au CEA (centre DAM-Ile de France) et conçue par Compaq (devenue depuis HP), la machine Tera a pour élément de base un mini-ordinateur à 4 processeurs Alpha à 1 GHz partageant une mémoire de 4 Go et fournissant une puissance totale de 8 Gflops. Ces éléments de base sont interconnectés par un réseau rapide conçu par la société Quadrics. Une opération de synchronisation sur l'ensemble des 2 560 processeurs s'effectue en moins de 25 microsecondes. Le système de fichiers global offre un espace de stockage de 50 téraoctets pour les entrées-sorties avec une bande passante agrégée de 7,5 Go/s.



Les calculateurs parallèles sont adaptés aux méthodes numériques basées sur des maillages (encadré A, **Qu'est-ce qu'une simulation numérique ?**) mais aussi au traitement de calculs ab initio comme cette simulation par dynamique moléculaire de l'endommagement par choc de deux plaques de cuivre à 1 km/s (voir La simulation des matériaux). Le système considéré est constitué de 100 000 atomes de cuivre représentant un parallélépipède de section carrée (0,02 μm de côté) à densité normale. Les atomes interagissent suivant un potentiel EAM (embedded atom potential) pendant 4,6 picosecondes. Le calcul, effectué sur 18 processeurs du supercalculateur Tera de Bruyères-le-Châtel à l'aide du logiciel Stamp développé au CEA, a représenté une dizaine de minutes de temps "utilisateur" (calcul réalisé par B. Magne). Des tests impliquant jusqu'à 64 millions d'atomes ont été réalisés, mobilisant 256 processeurs pendant une centaine d'heures.

portant plusieurs microprocesseurs qui partagent une mémoire commune (figure). Ces mini-ordinateurs étant largement diffusés dans des domaines variés allant de la banque au serveur web

en passant par les bureaux d'études, ils offrent un excellent rapport performance/prix. Ces "briques" de base (encore appelées *nœuds*) sont reliées entre elles par un réseau d'interconnexion hautes performances : la puissance cumulée de plusieurs centaines de ces "briques" peut atteindre plusieurs téraflows. On parle alors d'**ordinateur massivement parallèle**.

Cette puissance peut être disponible pour une seule application parallèle utilisant toutes les ressources du supercalculateur mais aussi pour de multiples applications indépendantes, parallèles ou non, utilisant chacune une partie des ressources.

Si la caractéristique mise en avant pour décrire un supercalculateur est en général sa puissance de calcul, il ne faut pas négliger l'aspect entrées-sorties. Ces machines capables d'effectuer des simulations de grande taille doivent disposer de systèmes de disques avec des capacités et des performances adaptées. Dans les *clusters* de SMP, chaque mini-ordinateur dispose d'un espace disque local. Il n'est néanmoins pas judicieux d'utiliser celui-ci pour les fichiers utilisateurs, ce qui obligerait l'utilisateur à explicitement déplacer ses données entre les différentes phases de ses calculs. Pour cette raison, il est important de disposer d'un espace disque accessible par l'ensemble des mini-ordinateurs du supercalculateur. Cet espace est en général constitué de batteries de disques reliées à des nœuds dont la fonction principale est de les gérer. Comme pour le calcul, c'est le parallélisme pour les entrées-sorties qui permet d'offrir des performances élevées. Il faut, pour ce faire, disposer de systèmes de fichiers globaux parallèles permettant un accès rapide et sans contraintes à l'espace disque partagé.

Offrant des puissances de calcul considérables, les *clusters* de SMP posent néanmoins plusieurs défis. Parmi les plus importants, outre la programmation de logiciels de simulation capables de tirer parti du grand nombre de processeurs, il faut mettre au point des systèmes d'exploitation et les logiciels associés compatibles avec de telles configurations et tolérants vis-à-vis des pannes.

François Robin

Direction des applications militaires
CEA centre DAM-Ile de France

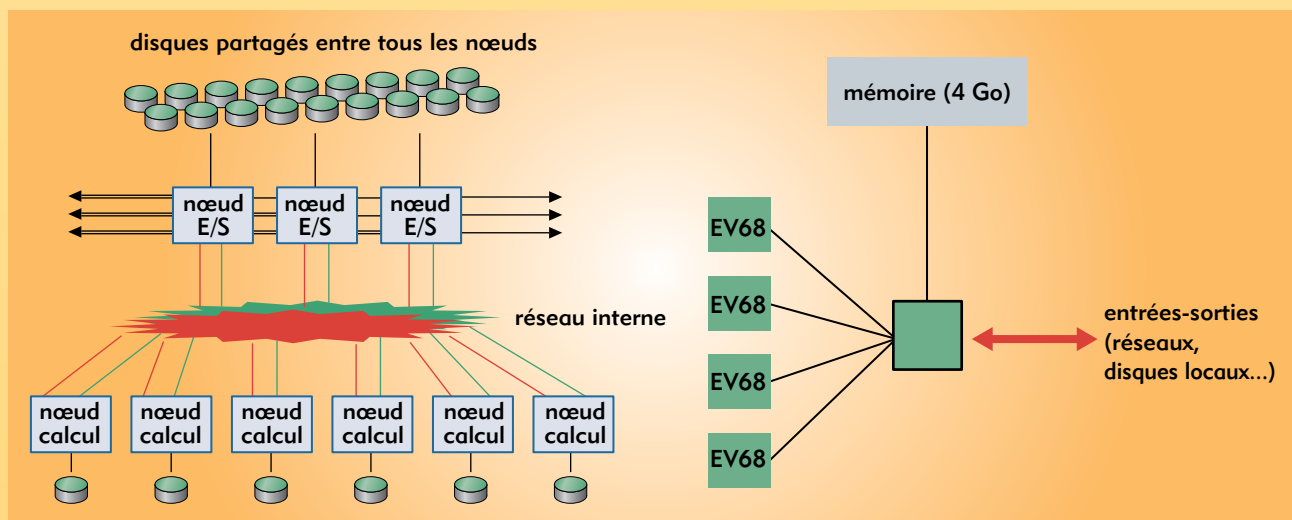


Figure. Architecture d'une machine du type "cluster de SMP". À gauche, l'architecture générale (E/S = entrée/sortie), à droite celle d'un nœud avec quatre processeurs Alpha EV68 cadencés à 1 GHz.

Modélisation et simulation des écoulements turbulents

La **turbulence**, ou l'agitation de l'écoulement dit turbulent, se développe dans la plupart des écoulements qui conditionnent notre environnement immédiat (rivières, océan, atmosphère). Elle se révèle être aussi un, sinon le, paramètre dimensionnant dans un bon nombre d'écoulements industriels (liés à la production ou la conversion d'énergie, à l'aérodynamique...). Il n'est donc pas étonnant que soient entrepris des efforts visant sa prédiction – fût-elle encore imprécise – surtout lorsqu'elle se trouve combinée à des phénomènes qui la compliquent : stratification, combustion, présence de plusieurs phases... C'est que, paradoxalement, même s'il est possible d'anticiper la nature turbulente d'un écoulement et même, d'un point de vue théorique, de dégager certaines caractéristiques communes et apparemment universelles aux écoulements turbulents⁽¹⁾, leur prédiction dans

des cas précis reste délicate. Celle-ci doit en effet prendre en compte l'importante gamme d'échelles spatiales et temporelles⁽²⁾ impliquées dans tout écoulement de ce type.

Les chercheurs ne sont pourtant pas démunis, aujourd'hui, pour aborder ce problème. En premier lieu, les équations qui régissent l'évolution spatio-temporelle des écoulements turbulents (équations de Navier-Stokes⁽³⁾) sont connues. Leur résolution complète, dans des cas très favorables, a conduit à des descriptions prédictives. Mais l'emploi systématique de cette méthode de résolution se heurte à deux difficultés rédhibitoires : d'une part, il nécessiterait la connaissance complète et simultanée de toutes les variables attachées à l'écoulement et des forçages s'exerçant sur lui⁽⁴⁾ et, d'autre part, il mobiliserait des moyens de calculs irréalistes pour encore des décennies.

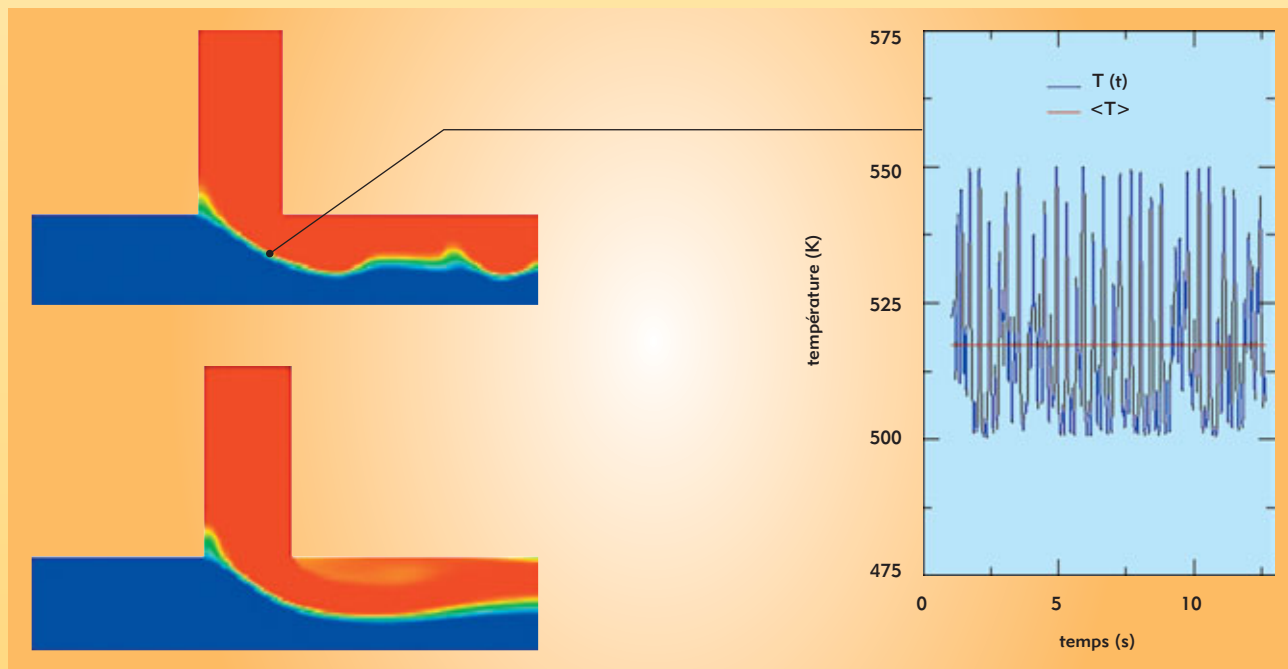


Figure. Champ de température instantané (haut) et moyenné (bas) dans une situation de mélange. La courbe donne l'historique de la température en un point : valeur instantanée fluctuante en bleu et moyenne en rouge (d'après la thèse d'Alexandre Chatelain [DEN/DTP/SMTH/LDTA]).

Il faut donc se résoudre, en s'appuyant sur le caractère fluctuant dû à l'agitation turbulente, à définir et utiliser des moyennes. Une des approches les plus répandues consiste à aborder le problème sous un angle statistique. Les moyennes d'ensemble de vitesse, de pression, de température... dont la distribution caractérise l'écoulement turbulent sont définies comme les variables principales de l'écoulement qu'on cherche à qualifier par rapport à ces moyennes. Ceci conduit à une décomposition du mouvement (dite de Reynolds) en champs moyen et fluctuant, ce dernier mesurant l'écart instantané et local entre chaque grandeur réelle et sa moyenne (figure). Ces fluctuations représentent la turbulence et couvrent une partie importante du spectre de Kolmogorov⁽¹⁾.

Cette opération réduit considérablement le nombre de degrés de liberté du problème et le rend « manipulable » informatiquement. Elle comporte aussi de nombreuses difficultés : il faut tout d'abord constater que, précisément en raison des non-linéarités des équations du mouvement, toute moyenne fait surgir des termes nouveaux et inconnus qu'il faut estimer. En fermant la porte à la description complète et déterministe du phénomène, on ouvre celle de la modélisation, c'est-à-dire à la représentation des effets de la turbulence sur les variables moyennes.

Beaucoup de progrès ont été accomplis depuis les premiers modèles (Prandtl, 1925). Les modélisations n'ont cessé d'évoluer vers plus de complexité, se basant sur le fait généralement vérifié que toute nouvelle extension permet de conserver les propriétés antérieurement acquises. Il faut aussi constater que, même

si de nombreux développements remettent en avant la nécessité de traiter les écoulements en respectant leur caractère *instationnaire*, les modélisations les plus populaires ont été développées dans le cadre des écoulements *stationnaires*, pour lesquels on n'accède donc qu'à une représentation de la moyenne temporelle de l'écoulement : dans le modèle mathématique final, les effets de la turbulence proviennent ainsi intégralement de la modélisation.

Il est également remarquable que, malgré de nombreux travaux, aucune modélisation n'est aujourd'hui capable de rendre compte de l'intégralité des phénomènes qui influencent la turbulence ou sont influencés par elle (transition, instationnarité, stratification, compression, etc.). Ce qui semble pour l'instant empêcher les modélisations statistiques de nourrir une ambition d'universalité.

Malgré ces limitations, la plupart des modélisations statistiques courantes sont maintenant disponibles dans les codes commerciaux et les outils des industriels. Il n'est pas possible de prétendre qu'elles permettent des calculs prédictifs dans toute situation. Leur précision est variable, offrant des résultats utiles pour l'ingénieur dans des situations maîtrisées et favorables (prédiction de la trainée avec une précision de 5 % à 10 % d'erreur [parfois mieux] sur certains profils), mais parfois faux dans des situations qui se révèlent, après coup, en dehors du champ de validité du modèle. Tout emploi maîtrisé d'une modélisation repose donc sur une qualification particulière au type d'écoulement à traiter. Des modélisations alternatives, répondant au besoin d'une plus grande précision sur des gammes d'échelles spatiales et temporelles plus étendues et donc basées sur un opérateur de "moyenne" d'une nature différente, sont actuellement en développement et représentent des voies nouvelles.

Le paysage des modélisations de la turbulence est aujourd'hui très complexe et l'unification des points de vue et des divers concepts de modélisation est une gageure. La tentation de l'universalité des modélisations reste donc hors de propos. Leur mise en œuvre réelle relève la plupart du temps de compromis généralement guidés par le savoir-faire de l'ingénieur.

Frédéric Ducros

Direction de l'énergie nucléaire
CEA centre de Grenoble

(1) On peut faire référence à la répartition spectrale de l'énergie cinétique turbulente, connue comme le "spectre de Kolmogorov", qui illustre de manière très simple la hiérarchie des échelles, des grandes échelles porteuses d'énergie aux échelles de plus en plus petites et de moins en moins énergétiques.

(2) Cette étendue est le résultat des non-linéarités des équations du mouvement qui donne naissance à une gamme étendue d'échelles spatiales et temporelles. Cette gamme est une fonction croissante du nombre de Reynolds, Re , mesurant le rapport entre force d'inertie et force visqueuse.

(3) L'hypothèse selon laquelle la résolution complète des équations de Navier-Stokes permet la simulation de la turbulence est généralement admise, tout du moins dans la gamme des écoulements sans choc.

(4) Il s'agit d'un problème régi par des conditions initiales et aux limites.