

XPER : une plateforme pour la simulation numérique distribuée d'interactions multiphysiques complexes.

F. Perales¹, Z.A. Manorosoa¹, L. Gomez¹, A. Somera¹, C. Tosi¹, F. Babik¹, F. Dubois², A. Jelea¹, Y. Monerie², R. Mozul², C. Pelissou¹, P.-G. Vincent¹

¹ Institut de Radioprotection et de Sécurité Nucléaire (IRSN), PSN-RES, BP3, Saint-Paul-lez-Durance, 13115, France, frederic.perales@irsn.fr
² Laboratoire de Mécanique et Génie Civil (LMGC) - UMR 5508, Université de Montpellier - CC048, 163 rue Auguste Broussonnet, 34090 Montpellier, France

Résumé — XPER est un outil numérique parallélisé dédié à la rupture dynamique de matériaux hétérogènes dans le cadre du couplage thermo-chimio-poro-mécanique. Il repose sur la modélisation des interactions multiphysiques complexes entre corps déformables. Le logiciel repose sur le couplage du logiciel LMGC90 (Dynamique des Contacts) pour la prise en compte d'interactions complexes entre les corps et de la bibliothèque PELICANS pour la résolution des comportements volumiques Eléments Finis des corps, et est couplé aux codes de lois de comportements MatLib et MFront.

Mots clés — Fissuration, Couplage thermo-chimio-mécanique, Modèles de Zone Cohésive Frottante, Dynamique non régulière, Eigenerosion, Message Passing Interface, Raffinement maillage adaptatif.

1 Introduction

La plateforme numérique XPER (eXtended cohesive zone models and PERiodic homogenization) est dédiée à la rupture dynamique tridimensionnelle de matériaux hétérogènes, dans le cadre d'un couplage thermo-chimio-poro-mécanique, de l'amorçage de multifissures jusqu'à la ruine des structures ainsi que des interactions complexes post-rupture [23, 24]. La modélisation repose sur les Modèles de Zones Cohésives Frottantes (MZCF) [24] traitées à l'aide de l'approche Non Smooth Contact Dynamics (NSCD) [8] dédiée au traitement de systèmes dynamiques en présence de contraintes unilatérales sans régularisation ni pénalisation. Une spécificité de l'approche numérique développée est la prise en compte des discontinuités dans les diffusions thermique et d'espèces chimiques [2, 27].

Les modélisations des différents phénomènes physiques sont succinctement présentées puis les potentialités du logiciel sont illustrées sur la fissuration d'un matériau cimentaire soumis à un gonflement interne, la fissuration chimio-poro-mécanique d'un matériau cimentaire, la rupture ductile d'une éprouvette C(T) et la rupture d'une pastille d'UO₂ en compression, et une approche multi-échelle pour la rupture de joint de grains d'UO₂.

2 Modélisation

2.1 Fissuration : l'approche Non Smooth Fracture Dynamics

La discrétisation spatiale de l'équation de la dynamique s'écrit : $M\ddot{q} = F(q, \dot{q}, t) + r$ où q , \dot{q} et \ddot{q} sont respectivement les vecteurs déplacement, vitesse et accélération discrets, M est la matrice de masse, $F(q, \dot{q}, t)$ représente les forces intérieures et extérieures et r les forces de contact. Cette équation est traitée dans le cadre de la méthode NSCD [8] au sens des mesures différentielles et son intégration temporelle entre $]t_i, t_{i+1}]$ est réalisée par une θ -méthode.

L'approche NSCD est étendue au traitement des problèmes de fissuration par translation de la réaction de contact frottant d'une quantité $R^{\text{adh}} = K(\beta) \cdot [\mathbf{u}]$ traduisant l'effort qu'il faut fournir pour ouvrir les lèvres d'une fissure en train de se créer d'une ouverture $[\mathbf{u}]$. La variable β traduit l'endommagement surfacique, $K(\beta)$ est un tenseur de deuxième ordre traduisant l'adoucissement progressif du comportement surfacique lors d'une fissuration.

Plusieurs lois de comportement surfacique sont implémentées parmi lesquelles on peut citer une

variante de la loi d'endommagement surfacique de [17][26, 28], une loi ductile [19, 20, 29], reposant sur un modèle analytique de zone cohésive micromécanique traduisant en comportement surfacique, le modèle d'endommagement ductile volumique de Gurson-Tveergaard-Needleman (GTN) avec prise en compte de la viscoplasticité, et des lois classiques de type triangle ou trapézoïde.

La mixité des modes d'ouverture de fissure dans la détermination du saut de déplacement critique et du saut de déplacement à rupture est prise en compte dans les lois surfaciques [3, 26].

2.2 Approche multiphysique en milieu poreux fissuré

Le modèle chimio-mécanique repose sur le couplage entre le transport réactif et le comportement mécanique dans un milieu poreux fissuré [26, 27, 28]. Le comportement du milieu est décrit pour chaque physique par un formalisme milieu poreux : poro-mécanique, transport d'espèces et géochimie. La précipitation d'un minéral est le moteur de la fissuration via une pressurisation du milieu.

La diffusion des espèces est modélisée par les équations de Fick dans un milieu poreux fissuré [2, 25, 27]. La résolution chimique repose sur une approche thermodynamique et cinétique prenant en compte les réactions aqueuses, de sorption et de précipitation/dissolution [27]. Les espèces solides entraînent une pressurisation du milieu prise en compte d'une part dans le milieu poreux et d'autre part sur les lèvres des fissures [26].

3 Architecture

XPER repose sur le couplage mixte en programmation orientée objet de la bibliothèque logicielle PELICANS pour la résolution des problèmes volumiques (Eléments finis) et du logiciel LMGC90 pour le traitement des interactions non régulières.

PELICANS (Plate-forme Evolutive de Librairies de Composants pour l'Analyse Numérique et la Simulation) [22] est une bibliothèque de composants logiciels adaptables développée en langage C++ par l'Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire sous licence CeCILL-C.

LMGC90 (Logiciel de Mécanique Gérant le Contact) [10, 9] est une plateforme numérique dédiée à la modélisation des interactions entre objets. La plateforme est développée en langage Fortran90 par le Laboratoire de Mécanique et Génie Civil de Montpellier (UMR 5508) et distribuée sous licence CeCILL.

Le couplage est effectué l'aide des fonctionnalités du module ISO_C_BINDING permettant de lier des routines Fortran à des routines en C.

Afin de prendre en compte des comportements mécaniques complexes, le logiciel est couplé aux codes de lois de comportements MatLib et MFront.

MatLib[12] est une bibliothèque de loi de comportement développée en langage C++ par l'Ecole Centrale de Nantes et distribuée sous licence GNU GPL.

MFront[14, 15, 13, 16] est un générateur de code simplifiant l'écriture de propriétés matériaux, lois de comportement mécanique et modèles physico-chimiques simples. Le logiciel est développé en langage C++ par le Commissariat à l'Energie Atomique et Electricité de France sous les licences GNU GPL et CeCILL-A. Le couplage avec XPER est effectué par l'intermédiaire du logiciel MGIS (MFront-GenericInterfaceSupport) développée en C++ et sous licence CeCILL-C.

Une méthode de décomposition de domaine permet d'effectuer les simulations sur des machines hautes performances en mémoire distribuée (Message Passing Interface). Enfin, afin de pallier les difficultés liées à l'utilisation de modèles de zones cohésives (temps de calcul, dépendance au maillage), une démarche reposant sur une méthode de raffinement hiérarchique dans des zones d'intérêt décrites par un prédicteur de fissuration volumique, l'"Eigenerosion", est mise en oeuvre [4, 5, 6].

XPER est piloté par un script python. Pour le pre-processing, le post-processing et l'algèbre linéaire, les potentialités sont complétées par couplage avec des logiciels externes (GMSH [7], Paraview [21], etc).

Le couplage est illustré sur la Figure 1.

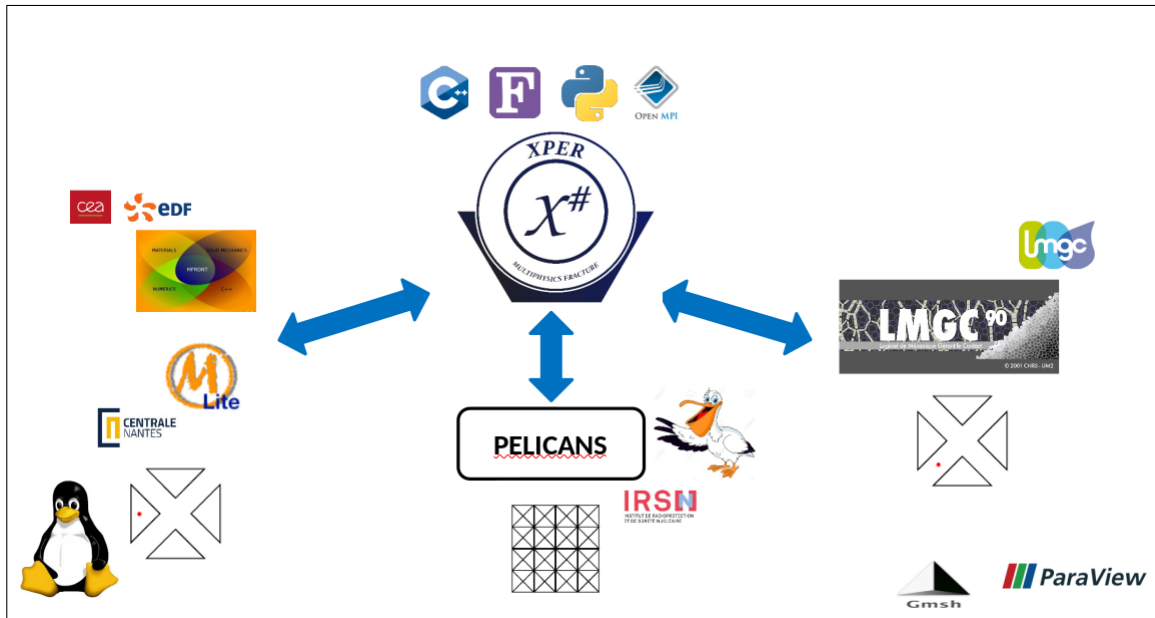


FIGURE 1 – XPER

4 Applications

4.1 Fissuration : matériau cimentaire soumis à gonflement interne

L'application concerne l'impact mécanique de la Réaction Alkali-Granulats. Cette pathologie est caractérisée par le gonflement des granulats suite à une réaction entre la matrice cimentaire et les granulats réactifs. Le gonflement des granulats est ici supposé homogène et modélisé par une dilatation thermique fictive. La Figure 2 montre l'endommagement (en bleu) dans et à la surface de l'éprouvette 11cmx22cm ainsi que la déformée (amplifiée d'un facteur 20) pour 0.5% et 0.8% de déformation des granulats [1].

4.2 Fissuration chimio-poro-mécanique : matériau cimentaire

L'application concerne la Réaction Sulfatique Interne caractérisée par l'expansion de la matrice induite par la précipitation de l'ettringite issue de la désorption du NaSO_4 [26]. Le gonflement différencié entre la matrice et le granulat non réactif entraîne la fissuration du matériau. La Figure 3 présente l'évolution du faciès de rupture et la Figure 4 présente l'effet de la fissuration sur les champs chimiques.

4.3 Fissuration ductile : éprouvette C(T)

L'application est dédiée à la rupture ductile d'éprouvette C(T). L'éprouvette est pré-entaillée et est soumise à des déplacements imposés sur les goupilles représentées, ici, par des matériaux élastiques avec les mêmes propriétés que l'éprouvette (voir Figure 5 gauche). La Figure 5 (droite) montre le maillage déformé et en particulier l'ouverture de fissure, et les contraintes de von Mises [18]. Le modèle surfacique cohésif utilisé dérive d'un modèle volumique de type Gurson : le modèle est d'autant plus fragile que la triaxialité des contraintes est élevée. La fissure se propage ainsi plus vite à coeur de l'éprouvette que sur ses faces latérales où la triaxialité est plus faible.

4.4 Fissuration : compression d'une pastille d' UO_2

L'application concerne la rupture d'une pastille d' UO_2 en compression. La Figure 6 montre la rupture lors de la simulation numérique [29, 30]. Les essais expérimentaux sont qualitativement bien reproduits notamment du point de vue des faciès de rupture.

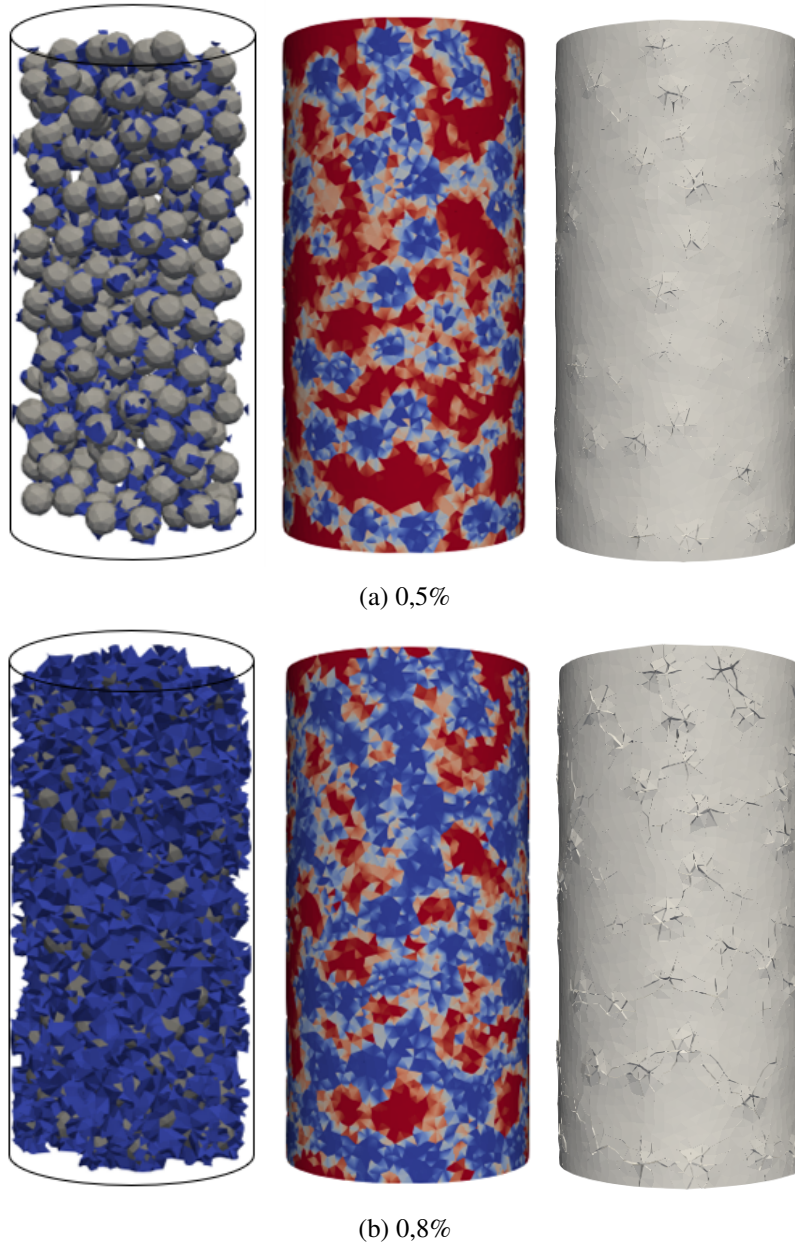


FIGURE 2 – Endommagement interne et externe (en bleu) et déformée amplifiée x20 dans une éprouvette contenant 25% de granulats de taille 15 mm pour (a) 0.5% et (b) 0.8% de déformation de granulats.

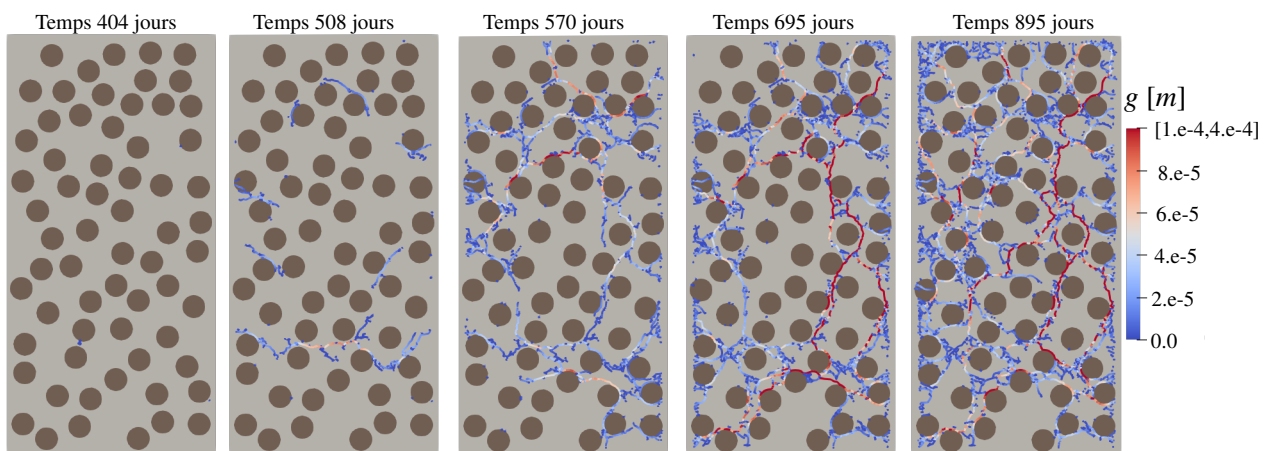


FIGURE 3 – Évolution des ouvertures de fissures en fonction du temps.

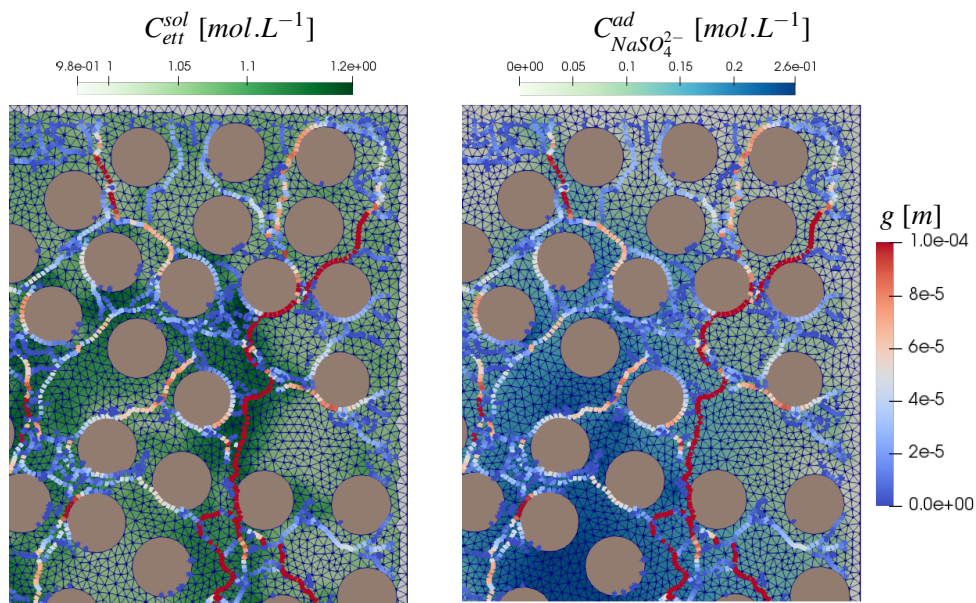


FIGURE 4 – Impact de la fissuration sur le champ de concentration sur la partie supérieure côté droit de l'éprouvette (les couleurs en pointillés représentent les ouvertures de fissures) : a) champ d'ettringite et b) champ de sulfate de sodium sorbé.

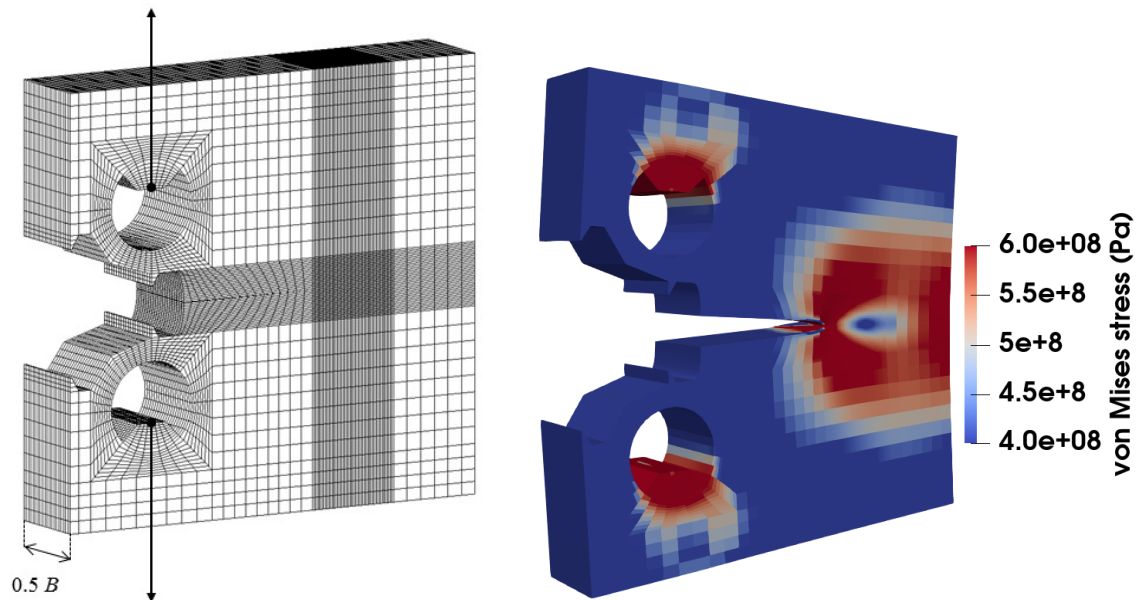


FIGURE 5 – Epreuve C(T) : simulation 3D d'une demi-épreuve. A gauche : maillage et sollicitation. A droite : maillage déformé. Les couleurs représentent les contraintes de von Mises.

4.5 Fissuration multi échelle : rupture d'un joint de grains d' UO_2

L'application concerne l'étude de la rupture de joint de grains d' UO_2 à partir d'une identification des paramètres cohésifs à l'échelle atomistique [11]. Le domaine est un prisme contenant un joint de grains composé d'une ou plusieurs bulles. La Figure 7 montre une coupe suivant x et y et le champs de contraintes de von Mises.

5 Remerciements

Les auteurs remercient tous les contributeurs et en particulier : C. Anglade, L. Bichet, E. Delaume, T. Helfer, N.B. Nkoumbou Kaptchouang, R. Largenton, M. Meïté, R. Monod, A. Socié, L. Stainier

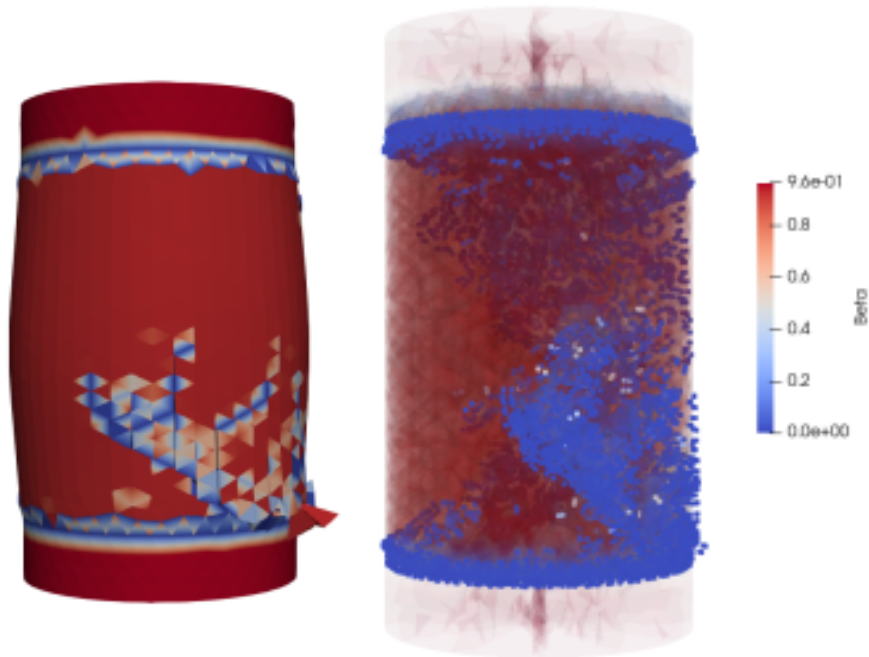


FIGURE 6 – Fissuration : compression d'une pastille d' UO_2

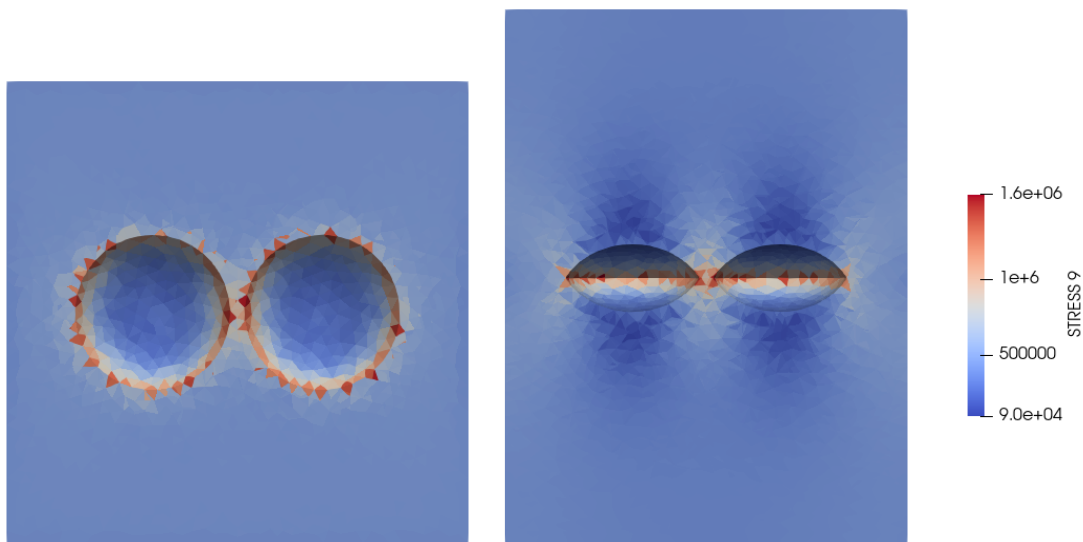


FIGURE 7 – Rupture joint de grains : coupe suivant x et y montrant les deux bulles. Les couleurs représentent les contraintes de von Mises.

Références

- [1] C. Anglade, G. Nahas, F. Perales Mesoscopic modelling of Alkali-Silica reaction in concrete specimens MAI/ITECH workshop "Micromechanics of cementitious materials" : 28-29 september 2023
- [2] L. Bichet *Mécanismes de transports dans la fissuration des matériaux hétérogènes : application à la durée de vie d'exploitation des centrales nucléaires*. Thèse, Université de Montpellier, 2017
- [3] M. Bisoffi-Sauve, S. Morel, F. Dubois *Modelling mixed mode fracture of mortar joints in masonry building*. Engineering Structures, 182 :316-330, 2019
- [4] L. Daridon, E. Delaume, Y. Monerie, F. Perales *Local adaptive refinement method applied to solid mechanics*. Applied and computational Mechanics, 14, 2, 2020
- [5] E. Delaume, L. Daridon, F. Dubois, Y. Monerie, F. Perales *Local adaptive refinement method for the fracture of heterogeneous materials*. XXIV ICTAM, Montreal, Canada, 21-26 August, 2016

- [6] E. Delaume, L. Daridon, F. Dubois, Y. Monerie, F. Perales *Méthode de raffinement local adaptatif multi-niveaux pour la fissuration des matériaux hétérogènes*. 13ème Colloque National en Calcul des Structures, Giens, 15-19 mai, 2017
- [7] GMSH Web site : <https://gmsht.info/>
- [8] M. Jean *The non-smooth contact dynamics method*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 235–257, 177, 1999
- [9] LMGC90 Web site : <http://transfert.lmgc.univ-montp2.fr/LMGC90/>
- [10] F. Dubois, R. Mozul. *LMGC90*. 13ème colloque national en calcul de structures, Giens, 2017
- [11] Z.A. Manoroosa, A. Chrysochoos, A. Jelea, Y. Monerie, F. Perales *Multiscale - atomistic/mesoscopic approach for the determination of fracture criterion in uranium dioxide - UO₂*. The Seventh International Conference on Computational Modeling of Fracture and Failure of Materials and Structures, Prague, Czech Republic, 21-23 June 2023
- [12] L. Stainier, F. Dubois, R. Peyroux *MatLib une bibliothèque portable de modèles constitutifs pour la mécanique non-linéaire des solides : concepts et implémentation*. 6ème Colloque National en Calcul des Structures, Giens, 2003
- [13] MFront Web site : <https://tfel.sourceforge.net/>
- [14] T. Helfer, B. Michel, J.-M. Proix, M. Salvo, J. Sercombe, M. Cassella *Introducing the Open-Source Mfront Code Generator : Application to Mechanical Behavior and Material Knowledge Management Within the PLEIADES Fuel Element Modelling Platform*. Computers & Mathematics with Applications, 994–1023, 70, 2015
- [15] T. Helfer, O. Fandeur, D. Geoffroy, C. Toulemonde, J. Hure, L. Dupuy, A. Forré, D. Deloison, F. Perales, A. Lejeune, S. Thibault, F. Richard, Y. Gaillard, J. Almanstötter, A. Gangnant, J. Draup, A. Kececioglu, C. Garnier, J. Roland *New functionalities of versions 3.1 and 3.2 of TFEL/MFront*. 14ème colloque national en calcul des structures. Giens, Var, France : CSMA, 2019
- [16] MGIS Web site : <https://github.com/thelfer/MFrontGenericInterfaceSupport>
- [17] J.-C. Michel, P. Suquet, F. Thébaud *Une modélisation du rôle des interfaces dans le comportement des composites à matrice métallique*. Revue Européenne des Elements Finis, 3 :573–595, 1994
- [18] M. Meite, N.B. Nkoumou Kaptchang, Y. Monerie, F. Perales, P.G. Vincent *Ductile crack growth using cohesive GTN model* Handbook Of Damage Mechanicsnano To Macro Scale For Materials And Structures, 1-20, 2021
- [19] N.B. Nkoumbou Kaptchouang *Modélisation micromécanique de l'endommagement ductile par une approche cohésive-volumique : application à l'UO₂ irradié*. Thèse Université de Montpellier, 2019
- [20] N.B. Nkoumbou Kaptchouang, Y. Monerie, F. Perales, P.-G. Vincent *Cohesive GTN model for ductile fracture simulation* Engineering Fracture Mechanics, 107437, 2021
- [21] PARAVIEW Web site : <https://www.paraview.org/>
- [22] PELICANS Web site : <https://gforge.irsn.fr/gf/project/pelicans/>
- [23] F. Perales, S. Bourgeois, A. Chrysochoos, and Y. Monerie *Two field multibody method for periodic homogenization in fracture mechanics of nonlinear heterogeneous materials*. Engineering Fracture Mechanics, 75 :3378-3398, 2008
- [24] F. Perales, F. Dubois, Y. Monerie, B. Piar, L. Stainier *A NonSmooth Contact Dynamics-based multi-domain solver*. European Journal of Computational Mechanics, 19 :389-417, 2010
- [25] J.M. Segura, I. Carol *On zero-thickness interface elements for diffusion problems*. International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics, 28 :947-962, 2004.
- [26] A. Socie *Modélisation chimio-mécanique de la fissuration de matériaux cimentaires : vieillissement et tenue des enceintes de confinement des centrales nucléaires* Thèse de l'Université de Montpellier, 2019
- [27] A. Socie, Y. Monerie, F. Dubois, F. Perales *Multibody approach for reactive transport modeling in discontinuous-heterogeneous porous media*. Computational Geosciences, 5 :1473-1491, 2021
- [28] A. Socie, F. Duboid, Y. Monerie, M. Neji, F. Perales *Simulation of internal and external sulfate attacks of concrete with a generic reactive transport-poromechanical model* European Journal of Environmental and Civil Engineering, 2022
- [29] C. Tosi, R. Largeton, Y. Monerie, P.-G. Vincent. *Modèle de zone cohésive viscoplastique dédié à la surfragmentation à haute température des céramiques nucléaires pressurisées*. 15e colloque national en calcul des structures, Université Polytechnique Hauts-de-France May 2022, Hyères-les-Palmiers, France.
- [30] C. Tosi, R. Largeton, Y. Monerie, P.-G. Vincent. *Viscoplastic cohesive zone model dedicated to overfragmentation of pressurized nuclear ceramics at high temperature* XVII International Conference on Computational Plasticity. Fundamentals and Applications. COMPLAS2023. Barcelona, Spain, 5-7 september, 2023