CSMA 2022
15ème Colloque National en Calcul des Structures
16-20 Mai 2022, Presqu'île de Giens (Var)

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

F. Perales[1,3], A. Socié[1,3], N.B. Nkoumbou Kaptchouang[1,3], F. Dubois[2,3], Y. Monerie[2,3], R. Mozul[2,3], P.-G. Vincent[1,3], F. Babik[1]

[1] *Institut de Radioprotection et de Sûreté 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*
[3] *Laboratoire MIST, CNRS - IRSN - Université Montpellier*

Résumé — **XPER** est un outil numérique parallélisé dédié aux interactions multiphysiques entre corps déformables. Les interactions concernent la rupture dynamique de matériaux hétérogènes dans le cadre du couplage thermo-chimio-poromécanique. 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. **XPER** est développé en commun par l'IRSN/CNRS/Université de Montpellier (laboratoire MIST).
Mots clés — Fissuration, Couplage thermo-chimio-mécanique, Modèles de Zone Cohésive Frottante, Dynamique non régulière, Eigenerosion, Message Passing Interface, Raffinement maillage adaptatif.

1 Introduction

Les travaux concernent la plateforme numérique développée au sein du laboratoire MIST (laboratoire commun IRSN/CNRS UMR5008/Université de Montpellier) dans le cadre des recherches de l'Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire relatives à la sûreté des réacteurs à eau sous pression.

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 (MCFZ) [24] traitées à l'aide de l'approche Non Smooth Contact Dynamics (NSCD) [11] 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 [3, 28].

XPER repose sur le couplage mixte en programmation orientée objet de la bibliothèque logicielle PELICANS (Plate-forme Evolutive de LIbrairies de Composants pour l'Analyse Numérique et la Simulation) [22] pour la résolution des problèmes volumiques (Eléments finis) et du logiciel LMGC90 (Logiciel de Mécanique Gérant le Contact) [13, 12] pour le traitement des interactions non régulières. Afin de prendre en compte des comportements mécaniques complexes, le logiciel est couplé aux codes de lois de comportements MatLib[14] et MFront[16]. Une méthode de décomposition de domaine est implémentée dans le logiciel. Les calculs peuvent ainsi être effectués 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 [6, 8].

Les modèles sont succinctement présentés puis les potentialités du logiciel sont illustrées sur la fissuration d'une poutre trouée en flexion, le transport réactif en milieux poreux fissuré, la fissuration chimio-poro-mécanique et la rupture ductile d'une éprouvette C(T).

2 Modélisation

2.1 L'approche Non Smooth Contact 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 [11] au sens des mesures différentielles et son intégration temporelle entre $]t_i,t_{i+1}]$ est réalisée par une θ-méthode. Les inconnues du problème sont alors des vitesses et des impulsions. Le système est condensé sur les inconnues de contact α :

$$\begin{cases} U^\alpha - U^\alpha_{loclib} - W^{\alpha\alpha} h R^\alpha = 0 \\ R^\alpha_N - \mathrm{proj}_{\mathbb{R}^+}(R^\alpha_N - \tau U^\alpha_N) = 0 \\ R^\alpha_T - \mathrm{proj}_{D(\mu|R^\alpha_N|)}(R^\alpha_T - \tau U^\alpha_T) = 0 \end{cases} \tag{1}$$

où $\tau > 0$ et $D(\mu|R^\alpha_N|)$ est le disque de centre 0 et de rayon $\mu|R^\alpha_N|$, μ le coefficient de frottement de Coulomb et U et R les valeurs locales de la vitesse et de la réaction de contact, U^α_{loclib} la vitesse au contact α et $W^{\alpha\alpha}$ la condensation de l'inverse de la matrice des itérations. Les indices N et T indiquent respectivement les parties normales et tangentielles.

Le système non linéaire (1) est résolu par une méthode de Newton généralisée [1].

2.2 Fissuration : l'approche Non Smooth Fracture Dynamics

L'approche NSCD est étendue au traitement des problèmes de fissuration par translation de la réaction de contact frottant d'une quantité $R^{\mathrm{adh}} = K(\beta)\cdot[\mathbf{u}]$ 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 et g une fonction décroissante de $\|[\mathbf{u}]\|$. Une variante de la loi d'endommagement surfacique de [17] est introduite (voir [18]) :

$$\beta = \min(g(\|[\mathbf{u}]\|), g(\|[\mathbf{u}]\|_{\max})), \qquad g(x) = \begin{cases} \beta_0 & \text{si } x \le \delta_0, \\ \beta_0 \dfrac{\delta_0}{x}\left(1 - \left(\dfrac{x-\delta_0}{\delta_c-\delta_0}\right)^2\right) & \text{si } \delta_0 < x < \delta_c, \\ 0 & \text{si } x \ge \delta_c, \end{cases}$$

avec $\delta_0 = \dfrac{R_{\max}}{2}\left(\dfrac{1}{C_N} + \dfrac{1}{C_T}\right)$, $\delta_c = \dfrac{3}{2}\left(\dfrac{w}{R_{\max}} + \dfrac{\delta_0}{6}\right)$, $0 \le \beta_0 \le 1$, C_N et C_T des raideurs (Pa/m), $0 \le \beta_0 \le 1$ un niveau d'endommagement surfacique initial, w une énergie de référence (en J/m^2), $R_{\max}$ et $\|[\mathbf{u}]\|_{\max}$ sont les valeurs maximales atteintes respectivement par la réaction adhésive (MPa) et par $\|[\mathbf{u}]\|$.

[4] ont introduit la mixité d'ouverture de fissure dans la détermination du saut de déplacement critique δ_0 et du saut de déplacement à rupture δ_c.

2.3 Fissuration : l'approche GTN-ZC

Le modèle de rupture ductile GTN-ZC repose sur un modèle analytique de zone cohésive micromécanique traduisant en comportement surfacique le modèle d'endommagement ductile volumique de Gurson-Tveergaard-Needleman (GTN) [19, 20]. Sous l'hypothèse d'une taille de zone d'élaboration suffisament faible (h petit), le taux de déformation local peut s'écrire [29] :

$$\dot{\varepsilon} \approx \frac{[\dot{\mathbf{u}}] \otimes_{\mathbf{s}} \mathbf{n}}{h}$$

où $\mathbf{n}$ est la normale sortante et $(\mathbf{v} \otimes_s \mathbf{w})_{ij} = \dfrac{1}{2}(v_i w_j + v_j w_i)$.

2.4 Fissuration : l'approche "Eigenerosion"

La méthode d'*Eigenerosion* de Pandolfi et Ortiz [21] s'appuie sur une technique de suppression de mailles volumiques ("killing element") et propose ainsi un coût numérique raisonnable. L'approche repose sur le cadre théorique de Francfort et Marigo [10] et assure ainsi un critère énergétique de type Griffith basé sur la notion de taux de restitution d'énergie critique G_c $\left[J.m^{-2}\right]$.

L'approche variationnelle est écrite à l'aide la forme régularisée proposée par [25] sur la base d'une notion de pointe de fissure émousée et d'un $e-$voisinage C_e du trajet de fissure :

$$F_e(u,\varepsilon^*,t) = \underbrace{\int_{\Omega} W(\varepsilon(u)-\varepsilon^*)dV}_{\text{Déformation}} - \underbrace{\int_{\partial\Omega_T} \overline{T}\cdot u\,dS}_{\text{Chargement}} + \underbrace{G_c\frac{|C_e|}{2e}}_{\text{Fissuration}}$$

où $\bar{T}$ est le chargement sur le bord $\partial\Omega_T$ de la frontière de Ω, u est le champ de déplacement correspondant, W est la densité d'énergie élastique du solide, $\varepsilon(u) = (1/2)(\nabla u + \nabla u^T)$ la déformation linéarisée, ε^* est un champ d'eigendeformation, G_c est le taux de restitution d'énergie critique du milieu d'étude supposé homogène, e est une longueur de régularisation destinée à tendre vers 0. Lorsque e tend effectivement vers 0, la formulation variationnelle de Francfort et Marigo est retrouvée [25].

La mise en oeuvre est décrite dans [2].

2.5 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 [27]. 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 Ficks dans un milieu poreux fissuré [3, 26, 28]. La résolution chimique repose sur une approche thermodynamique prenant en compte les réactions aqueuses, de sorption et de précipitation/dissolution [28]. Les espèces solides entrainent une pressurisation du milieu prise en compte d'une part dans le milieu proeux et d'autre part sur les lèvres des fissures [27].

3 Applications

3.1 Fissuration : poutre trouée en flexion

Une première application concerne la fissuration d'une poutre trouée en flexion trois points [5]. La fissuration est décrite à l'aide de la méthode d'*Eigenerosion*. Le domaine, raffiné proche des hétérogénéités et divisé en 48 sous domaines, est rectangulaire (voir FIGURE 1) [7]. Le maillage est de type Delaunay avec une taille de maille de $2\cdot 10^{-3}m$ pour le maillage grossier et $0.5\cdot 10^{-3}m$ pour le maillage fin dans la zone d'intérêt. Le matériau en PMMA est élastique isotrope et a les propriétés suivantes : $E = 300GPa$ et $\nu = 0,4$. Cette poutre admet une liaison pivot au niveau inférieur gauche de la poutre et une liaison pivot glissant à droite. Le chargement est appliqué de manière ponctuelle sur la partie supérieure au milieu de la poutre.

Les faciès de fissuration obtenus avec le maillage fin uniforme et le maillage raffiné dans la zone d'intérêt, proche des hétérogénéités, sont présentés sur la FIGURE 2 (a) (visualisation de la zone d'intérêt). Le trajet de fissure est similaire à celui obtenu expérimentalement.

3.2 Transport réactif en milieux poreux fissuré

Le transport réactif en milieux poreux hétérogènes fissurés est illustré par la dégradation d'un matériau cimentaire par la précipitation de l'ettringite issue de l'oxydation du granulat [28]. La réaction est caractérisée par la précipitation d'une espèce chimique, l'ettringite, pouvant entraîner une fissuration par gonflement interne. Afin d'illustrer le rôle de la fissure dans le transport réactif, l'échantillon est pré-fissuré (FIGURE 3).

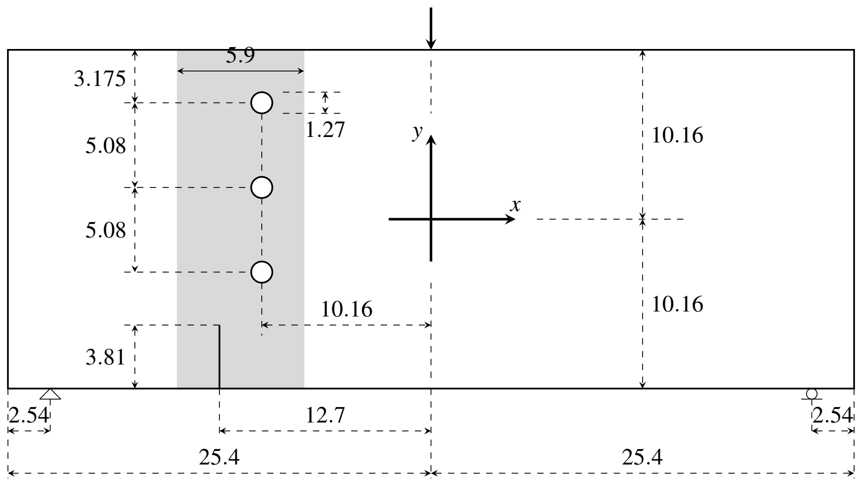
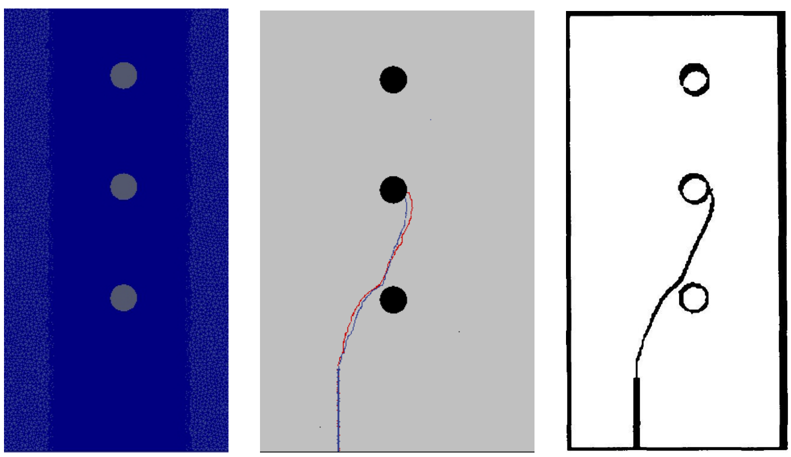


FIGURE 1 – Poutre trois trous en flexion trois points



(a) (b) (c)

FIGURE 2 – Maillage non conforme de la zone d'intérêt (a) et faciès de rupture obtenus (b) par la simulation et (c) experimentalement [5]. La fissure bleue est obtenue avec un maillage fin uniforme ($\sim$ 1 000 000 mailles au total) et en rouge celle obtenue avec un maillage raffiné dans la zone d'intérêt ($\sim$ 200 000 mailles au total)

La FIGURE 4 montre l'influence de la fissuration sur la cinétique et la localisation du transport réactif, représenté ici par le champ de concentration de l'ettringite. La valeur g_{max} impacte le coefficient de diffusion dans la fissure tel que $D = D_0 * \max(1, g/g_{max})$ [28].

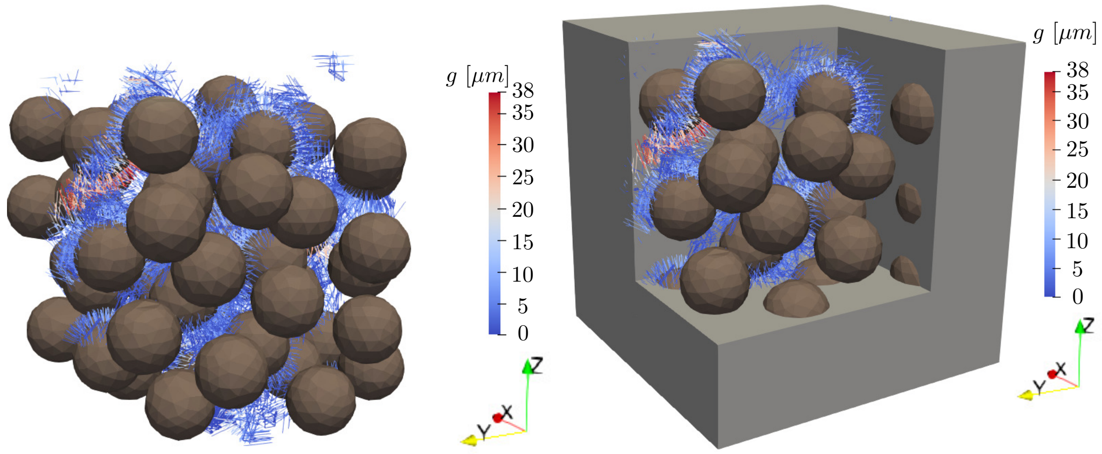


FIGURE 3 – Réaction Sulfatique Interne : échantillon pré-fissuré. g correspond à l'ouverture de la fissure.

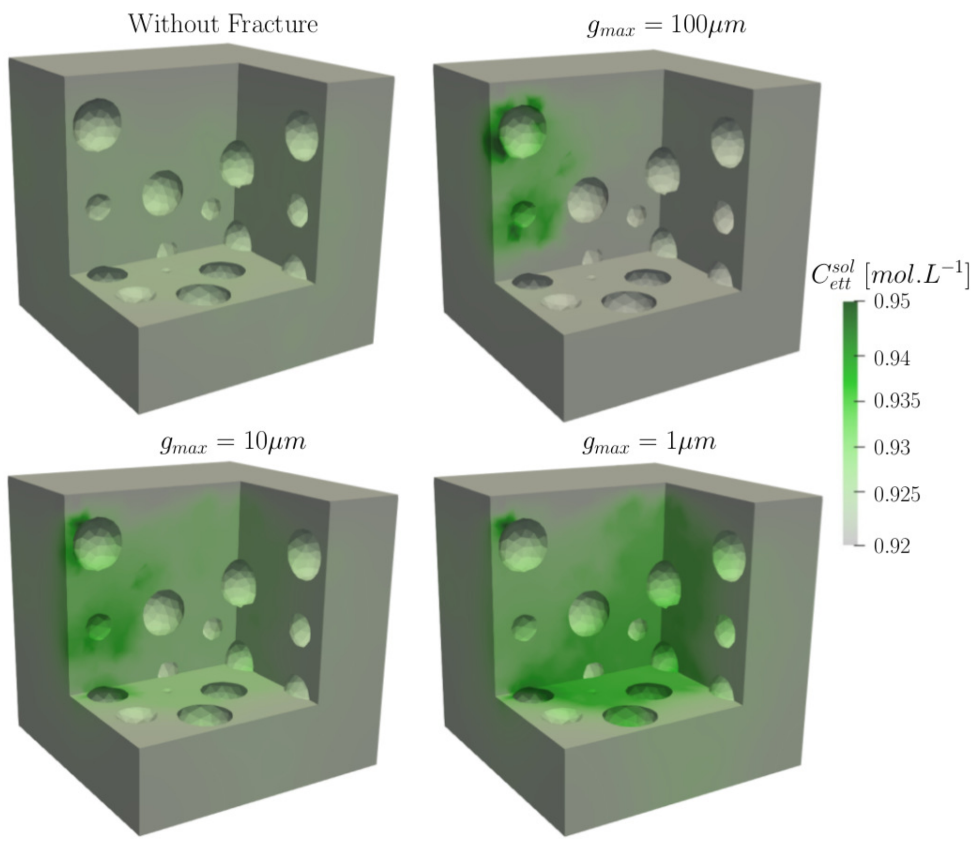


FIGURE 4 – Réaction Sulfatique Interne : champs d'ettringite à 2500 jours pour 4 ouvertures critiques.

3.3 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 NaSO4 [27]. Le gonflement différentié entre la matrice et le granulat non réactif entraîne la fissuration du matériau. La FIGURE 5 présente l'évolution du faciès de rupture et la FIGURE 6 présente l'effet de la fissuration sur les champs chimiques.

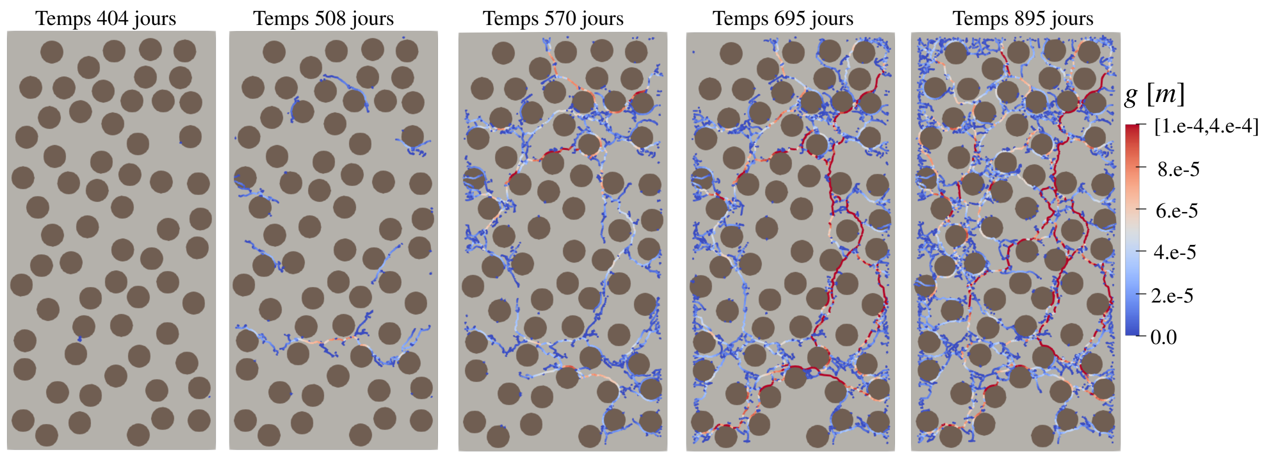


FIGURE 5 – Évolution des ouvertures de fissures en fonction du temps.

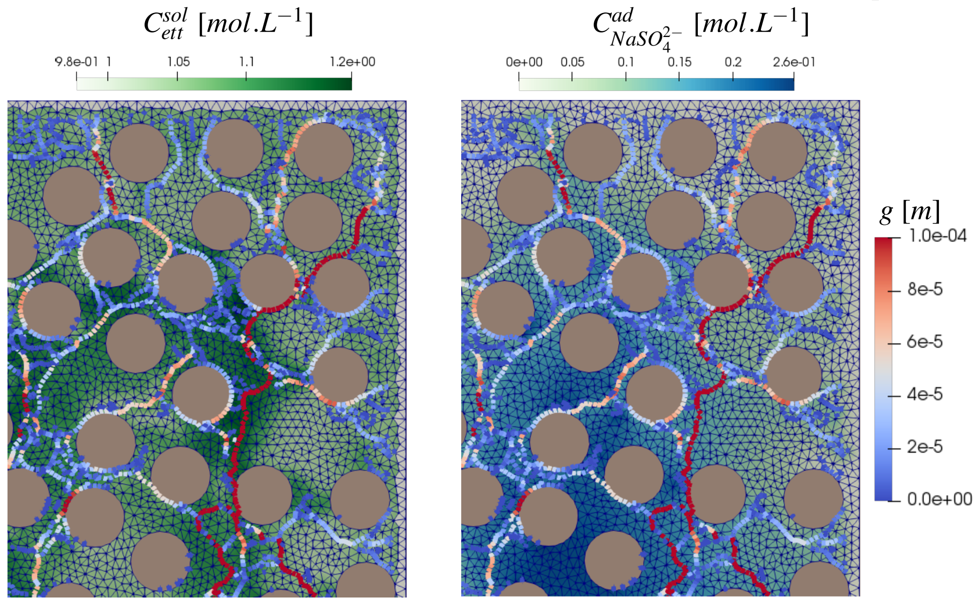


FIGURE 6 – Impact de la fissuration sur le champ de concentration sur la partie supérieure côté droit de l'éprouvette (les couleurs en pointillés représentent les ouvertures de fissures) : a) champ d'ettringite et b) champ de sulfate de sodium sorbé.

3.4 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 7 gauche) [15].

La FIGURE 7 (droite) montre le maillage déformé et en particulier l'ouverture de fissure, et les contraintes de von Mises. La FIGURE 8 montre la triaxialité des déformations en pointe de fissure pour différentes valeurs du déplacement imposé. Le pic de triaxialité est atteint plus rapidement dans la section médiane que sur le bord.

4 Remerciements

Les auteurs remercient tous les contributeurs et en particulier : L. Bichet, E. Delaume, T. Helfer, M. Meïté, R. Monod, L. Stainier

Références

[1] P. Alart, A. Curnier *A generalized Newton method for contact problems with friction.* Journal de Mécanique Théorique et Appliquée, 7 :67-82, 1988

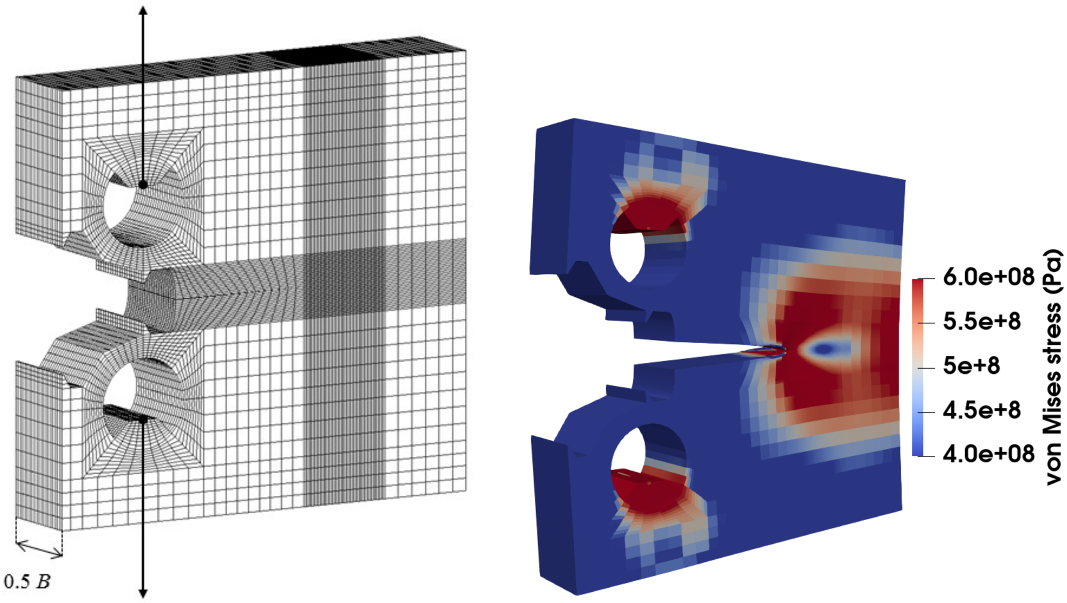


FIGURE 7 – Eprouvette C(T) : simulation 3D d'une demi-éprouvette. A gauche : maillage et sollicitation. A droite : maillage déformé. Les couleurs resprésentent les contraintes de von Mises.

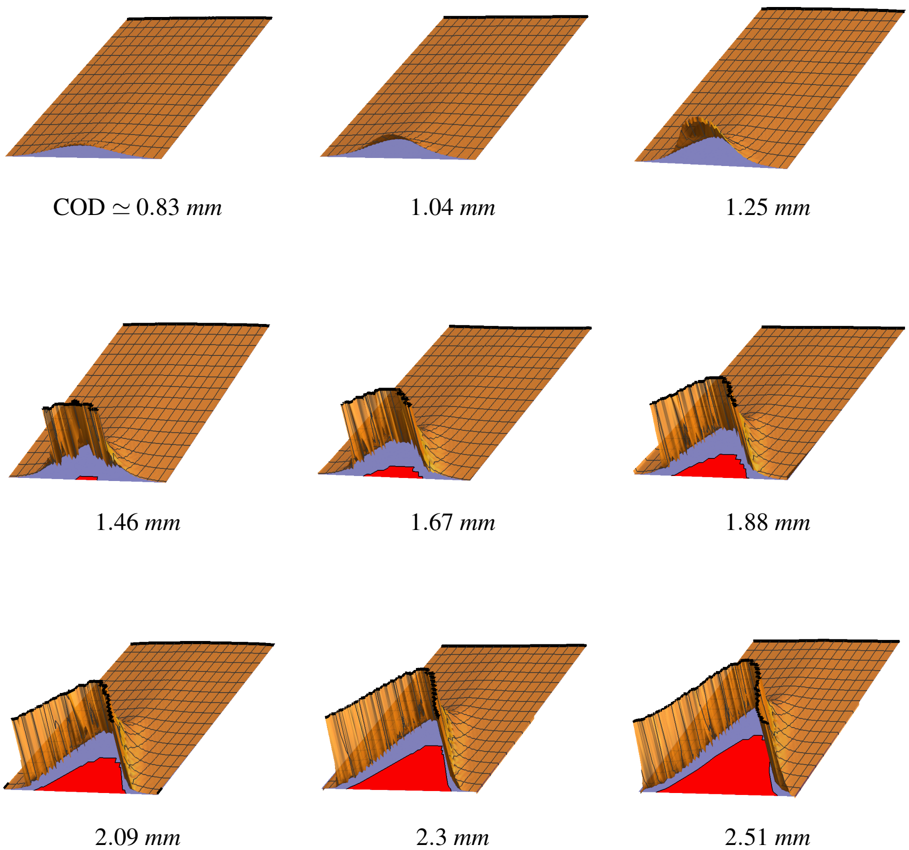


FIGURE 8 – Triaxialité des déformations (jaune) et surface de fissuration (rouge) pour différentes valeurs de COD (ici COD = $2U_y$ i.e. déplacement imposé). Le champ de triaxialité est écrêté à 0.2.

[2] L. Bichet, F. Dubois, Y. Monerie, C. Pelissou, F. Perales *Une méthode d'Eigenerion pour les matériaux hétérogènes.* Matériaux & Téchniques, 103 :307, 2015

[3] 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

[4] M. Bisoffi-Sauve, S. Morel, F. Dubois *Modelling mixed mode fracture of mortar joints in masonry building.* Engineering Structures, 182 :316-330, 2019

[5] T.N. Bittencourt, P.A. Wawrzynek,A.R. Ingraffea, J.L. Sousa *Quasi-automatic simulation of crack propagation for 2D LEFM problems.* Enineering Fracture Mechanics, 55 :321-334, 1996

[6] L. Daridon, E. Delaume, Y. Monerie, F. Perales *Local adaptive refinement method applied to solid mechanics.* Applied and computational Mechanics, 14, 2, 2020

[7] 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

[8] E. Delaume, L. Daridon, F. Dubois, Y. Monerie, F. Perales *Méthode de raffinement local adaptatif multi-niveaux pour la fissuration des matériaux hétérogènes.* 13éme Colloque National en Calcul des Structures, Giens, 15-19 mai, 2017

[9] C. de Dieuleveult, J. Erhel, M. Kern. *A global strategy for solving reactive transport equations.* Journal of Computational Physics, 228 :6395-6410, 2009.

[10] G.A. Francfort, J.-J. Marigo *Revisiting brittle fracture as an energy minimization problem.* Journal of the Mechanics and Physics of Solids, Elsevier, 1319-1342, 1998

[11] M. Jean *The non-smooth contact dynamics method.* Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 235–257, 177, 1999

[12] LMGC90 *Web site : http ://transfert.lmgc.univ-montp2.fr/LMGC90/*

[13] F. Dubois, R. Mozul. *LMGC90.* 13ème colloque national en calcul de structures, Giens, 2017

[14] 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

[15] M. Meïte, 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

[16] 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

[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] Y. Monerie, M. Raous, F.-H. Leroy, O. Sudre, F. Feyel and J.-L. Chaboche *Comparaison de lois d'interface fibre/matrice sur la base d'un modèle uniaxial d'expérience de micro-indentation.* Comptes Rendus des Onzièmes Jounées Nationales sur les Composites, AMAC, J. Lamon and D. Baptiste ed., 565-574, 1998

[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] A. Pandolfi et M. Ortiz *An eigenerosion approach to brittle fracture.* International Journal For Numerical Methods In Engineering, Wiley, 694-714, 2012

[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] B. Schmidt, F. Fraternali, M. Ortiz *Eigenfracture : an eigendeforamtion approach to variational fracture.* Multiscale Modeling and Simulation, SIAM, 1237-1266, 2009

[26] 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.

[27] 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

[28] 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

[29] P. Suquet *Discontinuities and Plasticity* Nonsmooth Mechanics and Applications, 279–340, 1988