

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

F. Perales<sup>1,3</sup>, F. Dubois<sup>2,3</sup>, Y. Monerie<sup>2,3</sup>, R. Mozul<sup>2,3</sup>, F. Babik<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup> IRSN, PSN/SEMIA, BP3 - 13115 St Paul-Lez-Durance Cedex, France, frederic.perales@irsn.fr

<sup>2</sup> LMGC - UMR 5508, Université de Montpellier - CC048, 163 rue Auguste Broussonnet, 34090 Montpellier, France

<sup>3</sup> Laboratoire MIST, CNRS - IRSN - Université Montpellier

---

**Résumé** — Xper est un outil numérique parallèle développé dans le cadre du laboratoire commun MIST pour l'étude des interactions entre corps rigides ou déformables. Les interactions concernent d'une part la séparation dans le cadre de la rupture thermo-chimio-poro-mécanique et dynamique de matériaux hétérogènes et d'autre part le contact frottant entre particules en présence de fluide. La plateforme numérique 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 ou Volumes Finis) des corps.

**Mots clés** — Fissuration thermo-chimio-poro-mécanique, Modèles de Zone Cohésive Frottante, Dynamique non régulière, Eigenerosion, Ecoulements particuliers denses, Frontières Immergées, 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 Sécurité Nucléaire relatives sur la sûreté des réacteurs à eau sous pression. Plus précisément, deux types d'interactions sont développées dans la suite : les interactions de séparation permettant l'étude de la rupture thermo-chimio-poro-mécanique et dynamique des matériaux fortement hétérogènes et les interactions de contact en présence de fluide pour la simulation de particules immergées dans un fluide ou le contact lubrifié entre fragments.

Les modélisations d'interactions reposent sur l'approche Non Smooth Contact Dynamics (NSCD) [11] dédiée au traitement de systèmes dynamiques en présence de contraintes unilatérales sans régularisation ni pénalisation.

*Interactions de séparation.* Dans le cadre de la fissuration thermo-chimio-poro-mécanique et dynamique de matériaux hétérogènes, l'approche NSCD est étendue à une modélisation multicorps volumique-surfacique périodique reposant sur des Modèles de Zone Cohésive Frottante (MCFZ) [23]. La plateforme numérique associée, appelée **Xper** (eXtended cohesive zone models and PERiodic homogenization), permet de simuler en trois dimensions la rupture dynamique de matériaux hétérogènes et notamment à gradients de propriétés, de l'amorçage de multifissures jusqu'à la ruine des structures ainsi que des interactions complexes post-rupture [23, 24]. Une spécificité de l'approche numérique développée est la prise en compte des discontinuités dans les diffusions thermique et d'espèces [3, 27].

*Interactions de contact en présence de fluide.* L'étude des milieux granulaires immergés repose sur le couplage d'un solveur de Navier-Stokes (Marker-And-Cell) pour la modélisation de la phase fluide et de l'approche NSCD pour la phase granulaire par la méthode "direct-forcing immersed boundary method" (DF-IBM) [25, 18]. L'approche, développée dans le logiciel **Xper**, permet de traiter des problèmes d'écoulements non compressibles complexes [6].

**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 ou Volumes Finis) et du logiciel LMGC90 (Logiciel de Mécanique Gérant le Contact) [14, 13] pour le traitement des interactions non régulières. Afin de prendre en compte des comportements mécaniques complexes, le logiciel est couplé

aux codes MatLib[15] 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 [8].

Les modèles sont succinctement présentés puis les potentialités du logiciel sont illustrées sur la fissuration d'une poutre trouée en flexion, un essai de fissuration en mode mixte, une rupture thermo-mécanique d'un matériau cimentaire et l'effet d'un fluide sur la sédimentation de deux grains.

## 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  $\theta$ -méthode. Les inconnues du problème sont alors des vitesses et des impulsions. Le système est condensé sur les inconnues de contact  $\alpha$  :

$$\begin{cases} U^\alpha - U_{loclib}^\alpha - W^{\alpha\alpha} h R^\alpha = 0 \\ R_N^\alpha - \text{proj}_{\mathbb{R}^+}(R_N^\alpha - \tau U_N^\alpha) = 0 \\ R_T^\alpha - \text{proj}_{D(\mu|R_N^\alpha|)}(R_T^\alpha - \tau U_T^\alpha) = 0 \end{cases} \quad (1)$$

où  $\tau > 0$  et  $D(\mu|R_N^\alpha|)$  est le disque de centre 0 et de rayon  $\mu|R_N^\alpha|$ ,  $\mu$  le coefficient de frottement de Coulomb et  $U$  et  $R$  les valeurs locales de la vitesse et de la réaction de contact,  $U_{loclib}^\alpha$  la vitesse au contact  $\alpha$  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 généralisé [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  $R^{\text{adh}} = K(\beta) \cdot [u]$  traduisant l'effort qu'il faut fournir pour ouvrir les lèvres d'une fissure en train de se créer d'une ouverture  $[u]$ . La variable  $\beta$  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  $\|[u]\|$ . Une variante de la loi d'endommagement surfacique de [17] est introduite (voir [19]) :

$$\beta = \min(g(\|[u]\|), g(\|[u]\|_{\max})), \quad g(x) = \begin{cases} \beta_0 & \text{si } x \leq \delta_0, \\ \beta_0 \frac{\delta_0}{x} \left(1 - \left(\frac{x - \delta_0}{\delta_c - \delta_0}\right)^2\right) & \text{si } \delta_0 < x < \delta_c, \\ 0 & \text{si } x \geq \delta_c, \end{cases}$$

$$\text{avec } \delta_0 = \frac{R_{\max}}{2} \left(\frac{1}{C_N} + \frac{1}{C_T}\right), \quad \delta_c = \frac{3}{2} \left(\frac{w}{R_{\max}} + \frac{\delta_0}{6}\right), \quad 0 \leq \beta_0 \leq 1, \quad C_N \text{ et } C_T \text{ des raideurs (Pa/m),}$$

$0 \leq \beta_0 \leq 1$  un niveau d'endommagement surfacique initial,  $w$  une énergie de référence (en  $J/m^2$ ),  $R_{\max}$  et  $\|[u]\|_{\max}$  sont les valeurs maximales atteintes respectivement par la réaction adhésive (MPa) et par  $\|[u]\|$ .

### 2.3 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 [9] et assure ainsi un critère énergétique de type Griffith basé sur la notion de taux de restitution d'énergie critique  $G_c$  [ $J.m^{-2}$ ].

L'approche variationnelle est écrite à l'aide la forme régularisée proposée par [26] sur la base d'une notion de pointe de fissure émoussée et d'un  $e$ -voisinage  $C_e$  du trajet de fissure :

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

où  $\bar{T}$  est le chargement sur le bord  $\partial\Omega_T$  de la frontière de  $\Omega$ ,  $u$  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,  $\varepsilon^*$  est un champ d'eigendéformation,  $G_c$  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 [26].

La mise en oeuvre est décrite dans [2].

## 2.4 Granulaire immergé : Direct Forcing/Immersed Boundary Method - NSCD

La méthode Direct-Forcing Immersed Boundary Method permet de prendre en compte la présence de solides rigides dans un fluide. L'approche combine la description lagrangienne pour les solides et l'approche eulérienne pour la discrétisation fluide. Un terme de forçage est appliqué sur les équations de Navier-Stokes (2) :

$$(1 - \xi)\rho_f \frac{\partial u}{\partial t} + (1 - \xi)[\rho_f u \cdot \nabla u - \nabla \cdot \sigma - f_{ext}] = \rho_f \xi \frac{u_s - u}{\delta t} \quad \text{et} \quad \nabla \cdot u = 0 \quad (2)$$

où  $\sigma = -pI + \eta[\nabla u + (\nabla u)^T]$  est le tenseur des contraintes fluide et  $f_{ext}$  une force externe,  $u$  la vitesse fluide,  $u_s$  la vitesse des solides,  $\rho_f$  la densité fluide,  $p$  la pression,  $\eta$  la viscosité du fluide et  $\xi$  une fonction permettant de définir la position des particules. Dans cette étude,  $\xi$  est choisi tel que :  $\xi(X) = 1 - \varepsilon$  si  $X \in \Omega_s$ ,  $\xi(X) = \varepsilon$  sinon avec  $\varepsilon = 10^{-12}$  et  $\Omega_s$  le domaine solide.

Les équations de Navier-Stokes (2) sont discrétisées en temps à l'aide d'un schéma Euler explicite et en espace par un schéma Marker-And-Cell. Le système numérique est résolu itérativement par une méthode "Pressure Schur Complement method" dérivant d'une méthode de projection classique de Chorin [5] et Van Kan [12]. Pour plus de détails, voir [6].

Le contact entre les particules est résolu à l'aide de l'approche Non Smooth Contact Dynamics.

## 3 Applications

### 3.1 Fissuration : poutre trouée en flexion

Une première application concerne la fissuration d'une poutre trouée en flexion trois points [4]. 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 Fissuration : matériau cimentaire, essai de Nooru-Mohamed

L'application concerne la fissuration en mode mixte, à l'aide de l'approche *Non Smooth Fracture Dynamics*, d'une éprouvette pré entaillée [20]. Le domaine, divisé en 48 sous domaines, est carré ( $0,2 \times 0,2m^2$ )



et est pré-entailé à gauche et à droite (voir FIGURE 3). Les mailles sont triangulaires de taille  $\sim 2 \cdot 10^{-3}m$ . La matrice en béton est supposée élastique :  $E^{\text{mat}} = 32GPa$ ,  $\nu^{\text{mat}} = 0,2$ ,  $\rho^{\text{mat}} = 2200kg/m^3$ . Les propriétés surfaciques sont :  $C_N^{\text{mat}} = C_T^{\text{mat}} = 2 \cdot 10^{14}Pa/m$ ,  $w^{\text{mat}} = 110J/m^2$ . Ici encore une zone cohésive est introduite entre chaque maille. Les conditions aux limites en vitesse sont imposées en haut, bas, bord gauche haut et bord droit bas respectivement  $v_y = 0.1m/s$ ,  $v_y = -0.1m/s$ ,  $v_x = 0.1m/s$  et  $v_x = -0.1m/s$ .

La FIGURE 3 montre la propagation de la fissure dans les sous domaines pour 4 et 48 processeurs. Les résultats sont conformes à la littérature [20]. L'efficacité pour 48 processeurs est d'environ 0.7.

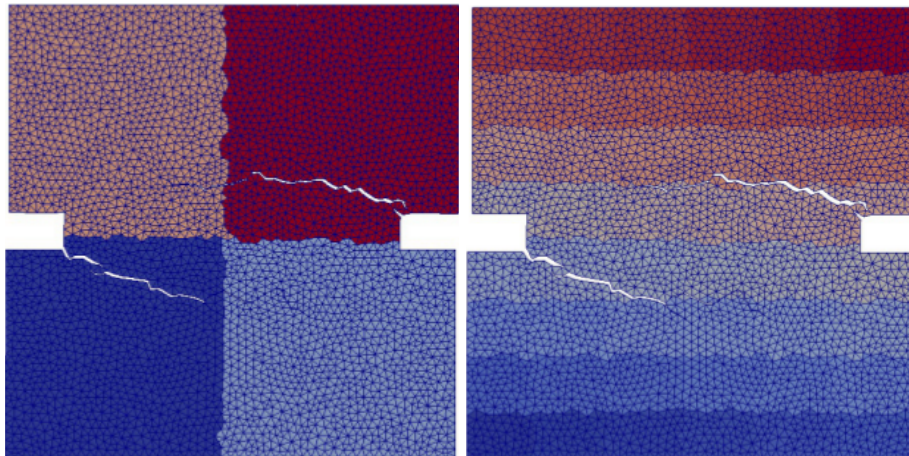


FIGURE 3 – Fissuration d'un essai de Nooru-Mohamed [20] : découpage par 4 et 48 domaines.

### 3.3 Fissuration thermo-mécanique : matériau cimentaire

L'application concerne la fissuration thermo-mécanique d'un matériau cimentaire pré-dégradé. La modélisation repose sur un *Modèle de Zone Cohésive Frottante thermo-mécanique* [3]. Le domaine, distribué sur 48 processeurs, est rectangulaire de taille  $300mm \times 150mm$ . Les granulats sont introduits aléatoirement dans le mortier sans recouvrement entre eux et avec le bord du domaine. Le maillage est de type Delaunay. Des défauts représentant les conséquences d'une dégradation chimique du béton sont introduits à l'interface des granulats (en noir sur la FIGURE 4 gauche).

Une température de  $150^\circ C$  est imposée sur la frontière gauche, les autres frontières sont considérées adiabatiques et la température initiale est  $T_{ini} = 0^\circ C$ . Des conditions de bords libres mécaniques sont imposées sur toutes les frontières.

Les interfaces pré-dégradées sont des lieux privilégiés pour l'initiation et la propagation de fissures (FIGURE 4 droite). Deux phénomènes sont mis en évidence : une fissuration de type écaillante (partie supérieure gauche) entraînant la formation d'une barrière thermique (conductivité d'interface réduite) et une fissuration pénétrante (perpendiculaire au chargement thermique) dans le volume.

### 3.4 Fissuration chimio-poro-mécanique : matériau cimentaire

L'application concerne la fissuration d'une éprouvette immergée. La modélisation repose sur un *Modèle de Zone Cohésive Frottante chimio-poro-mécanique* [27].

Le modèle prend en compte la diffusion d'espèces chimiques ( $SO_4^{-2}$ ,  $Al(OH)_4^-$ ,  $Na^+$ ) entraînant la précipitation d'une espèce appelée ettringite et la mise sous pression du milieu. La désorption des sulfates par le lessivage des alcalins et la concentration d'ettringite sont estimées par un modèle chimique. Une suppression locale due à l'ettringite est évaluée pour alimenter le modèle microporomécanique de la pâte de ciment et la loi de pression post-rupture de la loi cohésive.

L'éprouvette est encadrée sur le bord inférieur. Sur les autres frontières, on impose :  $[Na^+] = 0 \text{ mol/L}$ .

Le gonflement de l'éprouvette entraîne un faciès de rupture suivant les zones de forte concentration en ettringite (FIGURE 5).

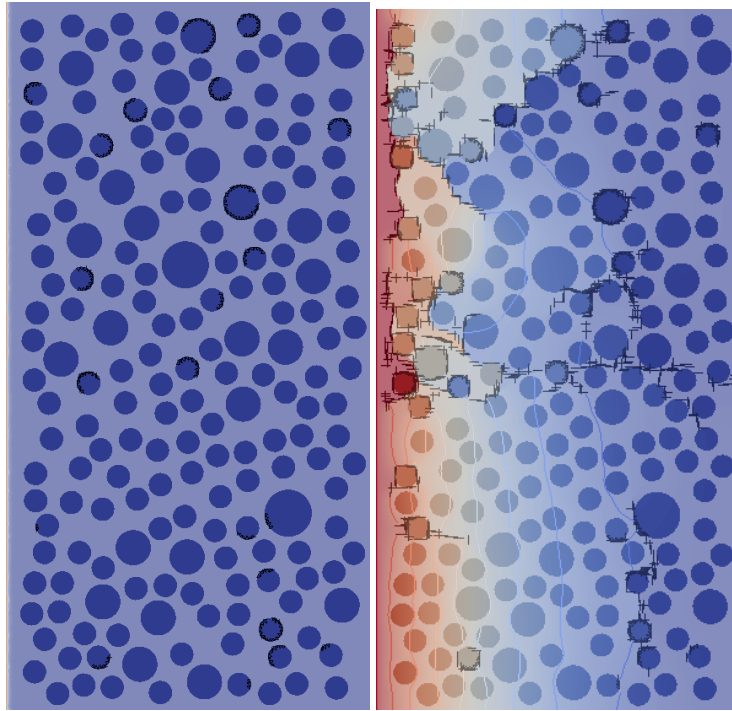


FIGURE 4 – Matériaux cimentaires pré-dégradé : champs de température et fissures

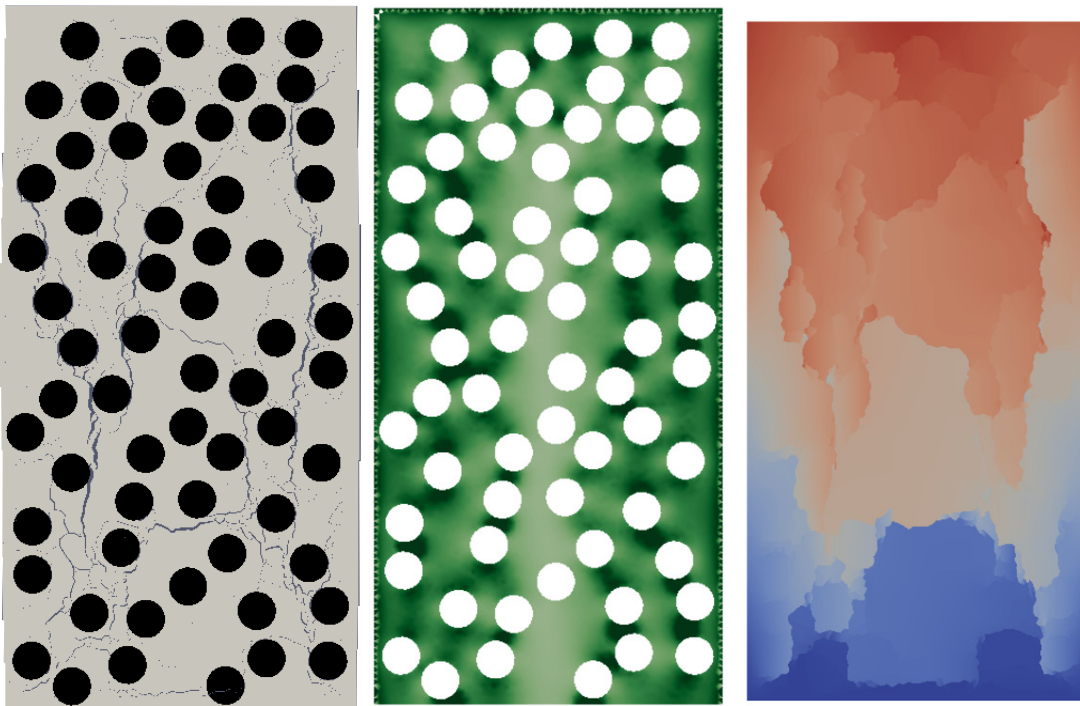


FIGURE 5 – Matériaux cimentaires : fissures, champs d'ettringite et déplacement vertical

### 3.5 Granulaire immergé : sédimentation de deux grains

Cette application illustre les potentialités du logiciel pour la simulation du comportement de particules immergées dans un fluide. Les disques sont rigides de diamètre  $d = 8 \cdot 10^{-4} \text{m}$  immergés dans un domaine fluide rectangulaire de dimension  $[4d \times 40d]$ . Les interactions suivent une loi de contact de Signorini-Coulomb avec un coefficient de frottement égal à 0,5. La densité du fluide est égale à celle de l'eau  $\rho_f = 1000 \text{kg/m}^3$  et celle des particules est fixée à  $\rho_s = 1,2\rho_f$ . La viscosité du fluide est de  $\eta = 4 \cdot 10^3 \text{Pa} \cdot \text{s}^{-1}$ .

La FIGURE 6 montre la sédimentation sous gravité des deux particules immergées. Dans un premier temps, les particules se rapprochent ("draft"), puis se touchent ("kiss") et enfin chutent ("tumble"). Ces phénomènes sont conformes aux résultats de la littérature [10].

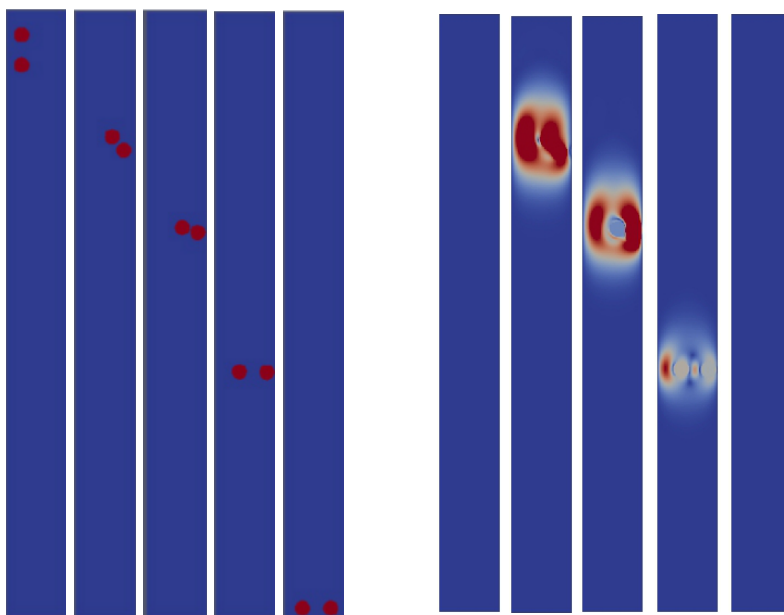


FIGURE 6 – Sédimentation de deux grains immergés : "draft", "kiss" et "tumble" : à droite, champs de vitesse

**Remerciements** : les auteurs remercient tous les contributeurs et en particulier : L. Bichet, T. Dbouk, E. Delaume, T. Helfer, R. Monod, A. Socié, L. Stainier, V. Topin

### 3.6 Références bibliographiques

#### 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
- [2] L. Bichet, F. Dubois, Y. Monerie, C. Pelissou, F. Perales *Une méthode d'Eigenerion pour les matériaux hétérogènes*. Matériaux & Techniques, 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] T.N. Bittencourt, P.A. Wawrzynek, A.R. Ingraffea, J.L. Sousa *Quasi-automatic simulation of crack propagation for 2D LFM problems*. Engineering Fracture Mechanics, 55 :321-334, 1996
- [5] A. J. Chorin *Numerical solution of the Navier-Stokes equations*. Mathematics of Computation, 33 :745-762, 1968
- [6] T. Dbouk, F. Perales, F. Babik and R. Mozul *A DF-IBM/NSCD coupling framework to simulate immersed particle interactions*. Computer methods in applied mechanics and engineering, 309 :610-624, 2016
- [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*. 13ème Colloque National en Calcul des Structures, Giens, 15-19 mai, 2017
- [9] 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
- [10] S. Ghosh, J. M. Stockie *Numerical simulations of particle sedimentation using the immersed boundary method*. Journal of Computational Physics, May 2013
- [11] M. Jean *The non-smooth contact dynamics method*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 235-257, 177, 1999

- [12] J. Van Kan *A second order accurate pressure-correction scheme for viscous incompressible flow*. SIAM Journal on Scientific Computing, 7 :870-891, 1986
- [13] LMGC90 *Web site* : <http://transfert.lmgc.univ-montp2.fr/LMGC90/>
- [14] F. Dubois, R. Mozul. *LMGC90*. 13ème colloque national en calcul de structures, Giens, 2017
- [15] 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
- [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] J. Mohd-Yusof *Combined immersed-boundary/B-spline methods for simulations of flow in complex geometries*. Annual Research Briefs. Center for Turbulence Research, Stanford University, CA, 317-327, 1997
- [19] 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 Journées Nationales sur les Composites, AMAC, J. Lamon and D. Baptiste ed., 565-574, 1998
- [20] M. B. Nooru-Mohamed *Mixed-mode fracture of concrete : an experimental approach*. PhD thesis, Delft University of Technology, 1992
- [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, 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
- [24] 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
- [25] C.S. Peskin *Flow patterns around heart valves : A numerical method*. Journal of Computational Physics, 10(2) :252-271, 1972
- [26] B. Schmidt et F. Fraternali et M. Ortiz *Eigenfracture : an eigendeforamtion approach to variational fracture*. Multiscale Modeling and Simulation, SIAM, 1237-1266, 2009
- [27] A. Socie, Y. Monerie, F. Dubois, F. Perales *Simulation du vieillissement des matériaux cimentaires par une modélisation chimio-poromécanique (diffusion-précipitation-fissuration)*. Materiaux 2018, Strasbourg, 19-23 novembre, 2018