

XPER : une plateforme pour la simulation numérique distribuée d'interactions multiphysiques complexes dans des milieux hétérogènes discontinus

F. Perales¹, F. Babik¹, F. Dubois², C. Leclere¹, A. Jelea¹, Y. Monerie², R. Mozul², C. Pelissou¹, P.-G Vincent¹

¹ Autorité de Sûreté Nucléaire et de Radioprotection (ASNR), PSN-RES, BP3, Saint-Paul-Lez-Durance, 13115, frederic.perales@asn.fr

² Laboratoire de Mécanique et Génie Civil (LMGC) - UMR5508, Université de Montpellier - CC048, 163 rue Auguste Broussonnet, 34090 Montpellier, France

Résumé — XPER est une plateforme numérique parallélisée multiphysique, chimio-poromécanique, dédiée à la rupture dynamique de matériaux hétérogènes dans des milieux discontinus. Elle 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.

Mots clés — Fissuration, Couplage thermo-chimio-poromécanique, Modèles de Zones Cohésives, Dynamique non régulière, Eigenerosion, Message Passing Interface, Raffinement maillage adaptatif.

1 Introduction

La plateforme numérique distribuée **XPER** (eXtended cohesive zone models and PERiodic homogenization) est dédiée à la rupture dynamique tridimensionnelle de matériaux hétérogènes et discontinus, 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 [27, 28]. La modélisation repose sur les Modèles de Zones Cohésives Frottantes (MZCF) [28] dans le cadre d'une approche multicorps. La résolution numérique repose sur l'approche Non Smooth Contact Dynamics (NSCD) [9] dédiée au traitement de systèmes dynamiques en présence de contraintes unilatérales et de frottement sans régularisation ni pénalisation. Une spécificité de l'approche numérique développée est la prise en compte des discontinuités dans les couplages multiphysiques, ici les transports thermique et d'espèces chimiques [1, 32, 33].

L'approche générique permet de simuler un certain nombre de problèmes physiques. Dans le cadre de la sûreté des installations nucléaires, les potentialités du logiciel sont illustrées par des applications concernant des activités de recherche sur la prolongation de la durée d'exploitation des installations. Les applications concernent d'une part le vieillissement des matériaux aciers dans le cadre de l'étude de la rupture d'une éprouvette mini-C(T) et d'autre part le vieillissement des matériaux cimentaires avec l'étude des conséquences de pathologies tels que la Réaction Sulfatique Interne et la Réaction Alkali-Silice.

2 Modélisation

2.1 Fissuration : Non Smooth Fracture Dynamics dans une approche multicorps

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 [9] 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 $[u]$. 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 [19, 31, 33], une loi ductile [21, 22, 35], 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 [2, 31].

Une prise en compte de la présence de défauts dans les matériaux est actuellement en cours de développement et fait l'objet d'un développement spécifique d'un modèle de zones cohésives probabilistes.

2.2 Approche multiphysique en milieu poreux fissuré

L'approche multiphysique repose sur un modèle thermo-chimio-poromécanique. Ce modèle résulte du couplage entre le transport réactif, transport d'ions et réactions chimiques, et le comportement mécanique dans un milieu poreux fissuré [31, 32, 33]. 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 ou plusieurs minéraux est le moteur de la fissuration via une pressurisation du milieu poreux.

La diffusion des espèces est modélisée par les équations de Fick dans un milieu poreux fissuré [1, 30, 32]. Une spécificité de cette approche est la prise en compte de la diffusion à travers et dans les fissures. Afin de prendre en compte les transports par gradient de pression et de température et les interactions entre ions, une approche reposant sur le potentiel chimique est en cours de développement [8].

La résolution chimique repose sur une approche thermodynamique et cinétique prenant en compte les réactions aqueuses, de sorption et de précipitation/dissolution [32]. Les espèces solides entraînent une pressurisation du milieu par un gonflement issu d'une dilation volumique (approche poromécanique) et d'une pression appliquée sur les lèvres des fissures [31]. Une nouvelle approche par pression de cristallisation (pression exercée durant la formation des minéraux) et de disjonction (pression exercée par répulsion électrostatique) est en cours de développement [11].

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) [26] 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) [13, 12] 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[14] est une bibliothèque de loi de comportement développée en langage C++ par l'Ecole Centrale de Nantes et distribuée sous licence GNU GPL.

MFront[16, 17, 15, 18] 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) développé 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, en particulier le temps de calcul, 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 [3, 4, 5].

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 [6], Paraview [25], PETSc [29], MUMPS [20]).

Le couplage est illustré sur la Figure 1.

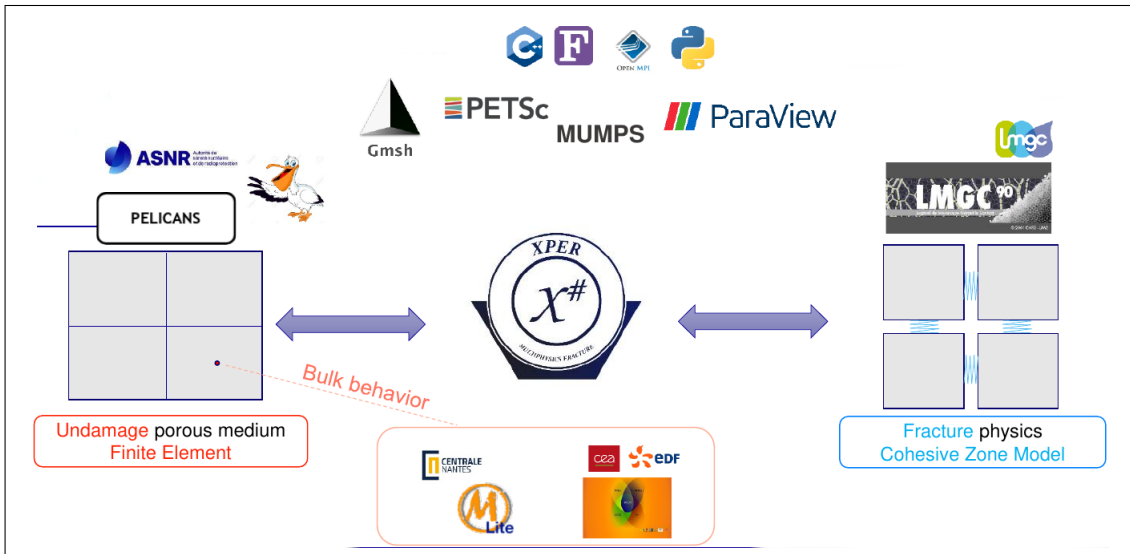


FIGURE 1 – XPER

4 Applications

4.1 Vieillessement des aciers : rupture d’une éprouvette mini-C(T)

L’application est dédiée à la rupture d’éprouvette mini-C(T) dans le cadre du programme européen FRACTESUS [34]. L’éprouvette est pré-entaillée et est soumise à des déplacements imposés sur les goupilles. La Figure 2 décrit les dimensions de l’éprouvette, le maillage et les sollicitations. La taille de maille de la zone raffinée en pointe de fissure est de $50 \mu\text{m}$ entraînant une discrétisation avec 6200 mailles. Le temps calcul est de 4 heures sur 40 processeurs.

La Figure 3 montre le maillage déformé et en particulier l’ouverture de fissure, et les contraintes de von Mises. Cette application met en évidence la capacité du logiciel à simuler la propagation fragile de fissure dans une éprouvette mini-C(T).

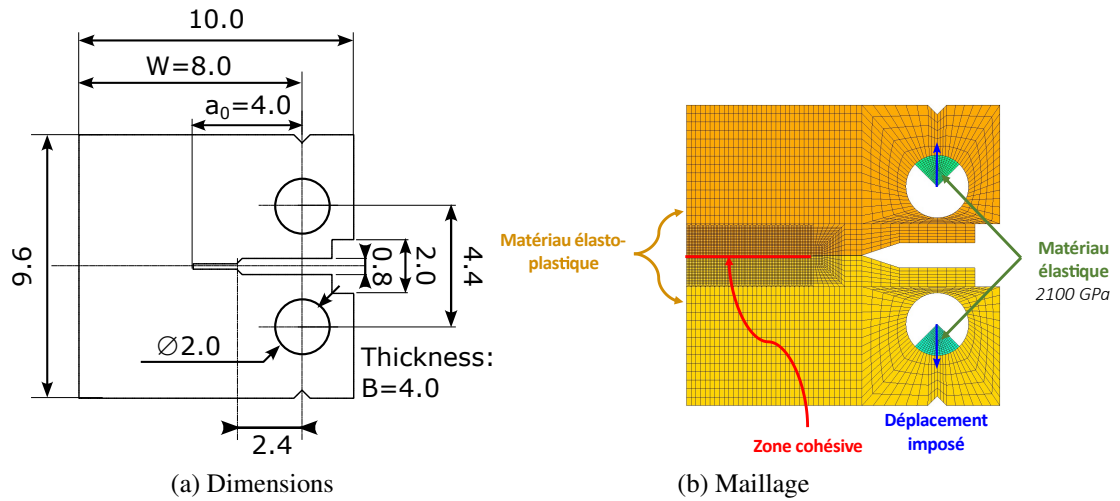


FIGURE 2 – Eprouvettes mini-C(T)

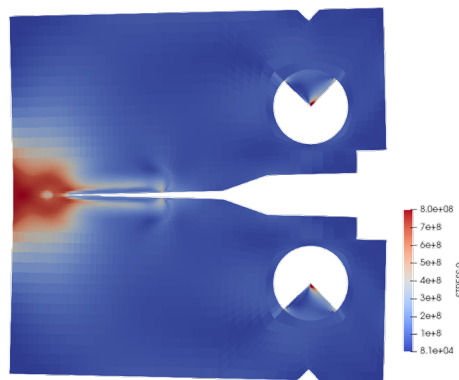


FIGURE 3 – Eprouvette mini-C(T) déformée et contraintes de vonMises.

4.2 Viellissement des matériaux cimentaires

4.2.1 Fissuration de composite ciment/granulat atteint de RSI

L'application concerne la simulation des conséquences de la Réaction Sulfatique Interne dans une éprouvette composite composée de ciment et granulat issue du travail expérimental de Jebli et al. [10]. La Figure 4(a) décrit le cas test. La taille de maille est 1mm et l'éprouvette est discrétisée en 29236 mailles tétraédriques. Le temps calcul est de 8 heures sur 32 processeurs (voir Figure 4 (b)).

La pathologie est caractérisée par l'expansion de la matrice induite par la précipitation de l'ettringite issue de la sorption des sulfates et du départ des ions sodium [33]. Le gonflement différencié entre la zone de précipitation proche des bords et la zone saine à l'intérieur de la matrice cimentaire entraîne la fissuration du matériau. La Figure 5 (a) met en évidence l'influence de la fissuration sur le transport réactif, en particulier sur les zones de précipitation d'ettringite.

Les Figures 5 (b) et (c) montrent une bonne concordance entre le faciès de rupture expérimental et numérique.

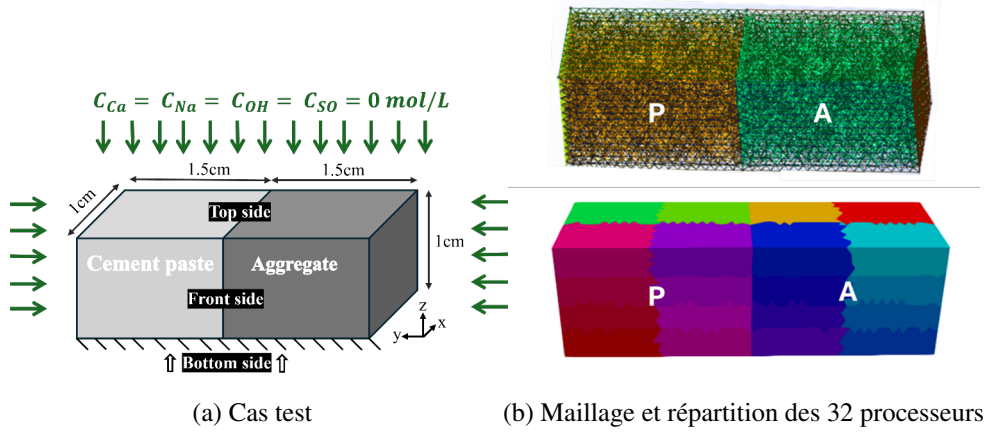


FIGURE 4 – Cas test RSI issu de [10]

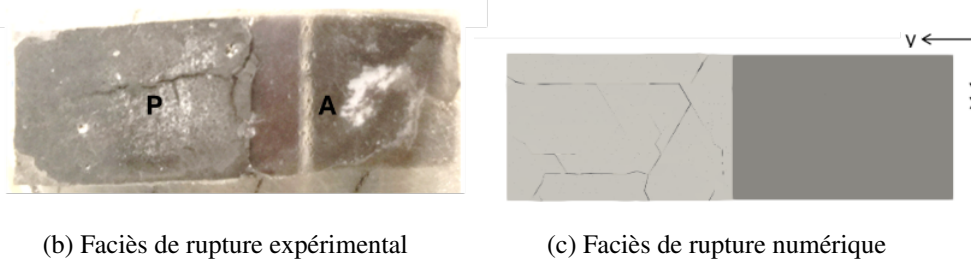
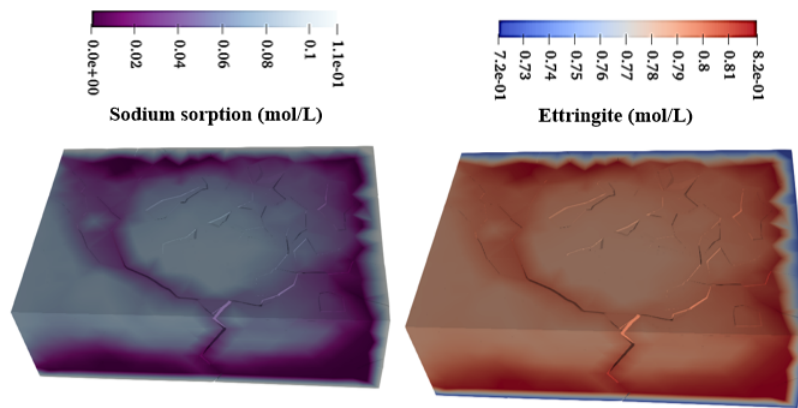


FIGURE 5 – Résultats de la simulation du cas test RSI issu de [10]

4.2.2 Fissuration d'éprouvettes en béton par gonflement équivalent de RSI

L'application concerne la simulation des conséquences de la Réaction Sulfatique Interne par gonflement mécanique interne équivalent. Les éprouvettes cylindriques de dimension $110 \times 220 \text{ mm}^2$ contiennent 40% de granulats sphériques (3 tailles, voir Figure 6 (a) et (b)) ou polyhédriques (3 tailles voir Figure 6 (c) et (d)). Les éprouvettes sont soumises à un gonflement interne imposé (température fictive) autour des granulats suivant une loi de Brunetaud ou de Kchakech.

La taille de maille est de 5mm entraînant une discrétisation en 6.5 millions de mailles et 10.8 millions de mailles tétraédriques pour les granulats cylindriques et polyhédriques, respectivement. Le temps calcul est de 22 heures sur 80 processeurs.

Les résultats sont comparés à la fissuration d'éprouvettes expérimentales issues du programme ODOBA [23, 24] (voir Figure 7). Une surestimation de la fissuration est observée due à l'identification de la loi de gonflement sans prise en compte de la fissuration.

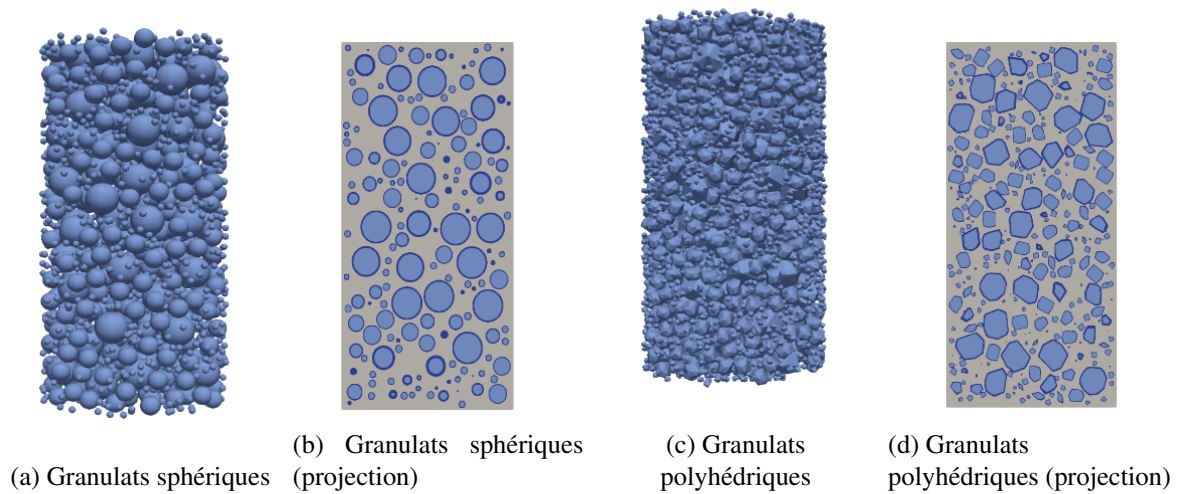


FIGURE 6 – Eprouvettes cylindriques du cas test RSI pour les deux types de granulats sphériques et polyhédriques.

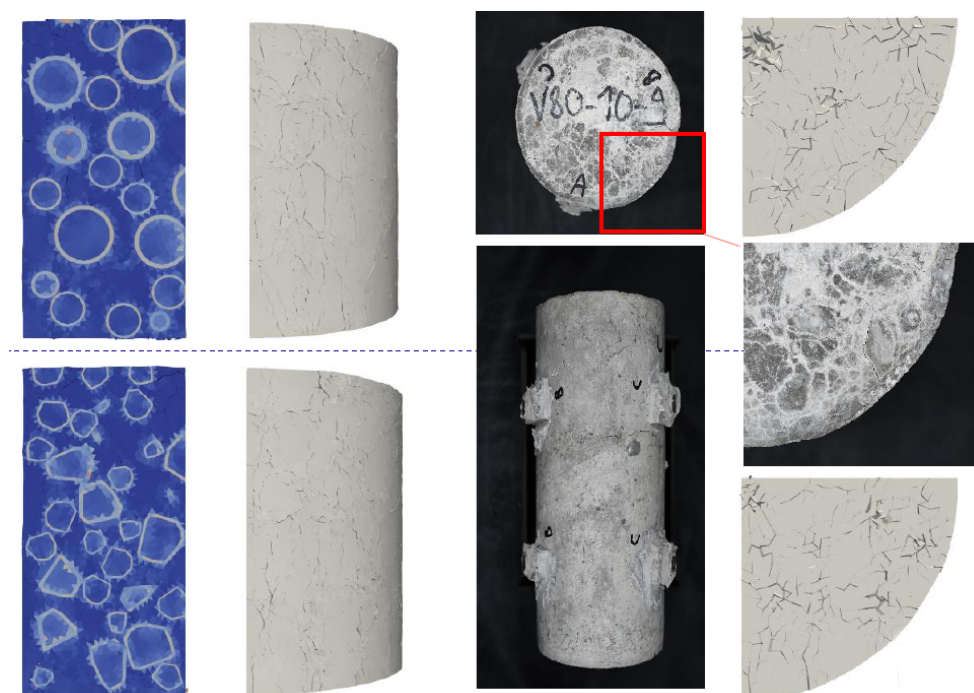


FIGURE 7 – Comparaison des faciès de rupture pour les granulats sphériques et polyhédriques (droite) entre les résultats numériques (gonflement mécanique interne, gauche) et expérimentaux issus du programme ODOBA [23] (milieu).

4.2.3 Gonflement d'une éprouvette atteinte de RAG

L'application concerne le gonflement d'éprouvettes de béton atteintes de la Réaction Alkali-Silice issues du travail expérimental et numérique de Gomez [7]. Des primes en béton de dimension $300 \times 75 \times 75 \text{ mm}^3$ avec une fraction volumique de granulats de 40% (3 tailles) sont conservés dans des milieux saturés. Numériquement, les éprouvettes sont représentés en 2D ($300 \times 75 \text{ mm}^2$). La taille de maille est de 3mm, l'éprouvette est discrétisée en 15638 mailles triangulaires. Le temps calcul est de 10 heures sur 48 processeurs.

La Figure 8 met en évidence la précipitation hétérogène de la kanémite (petits granulats très attaqués), de la tobermorite (interface interne des granulats) et la répartition des contraintes principales entre les granulats.

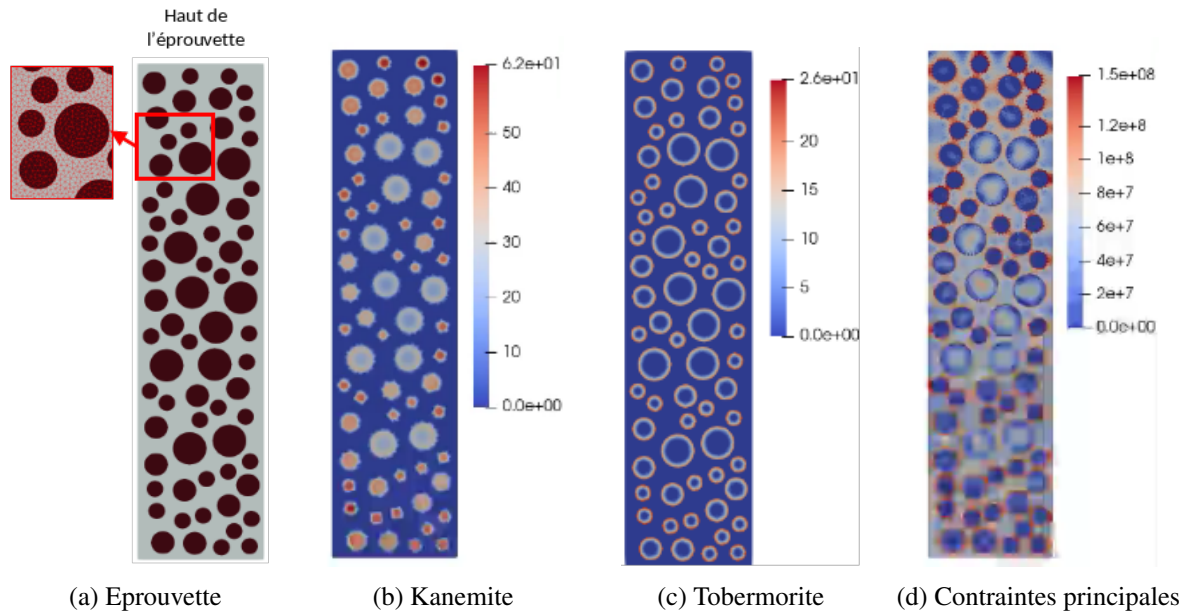


FIGURE 8 – Résultats de simulation d’une éprouvette de béton atteinte de RAG [7].

5 Remerciements

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

Références

- [1] 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
- [2] M. Bisoffi-Sauve, S. Morel, F. Dubois *Modelling mixed mode fracture of mortar joints in masonry building*. Engineering Structures, 182 :316-330, 2019
- [3] L. Daridon, E. Delaume, Y. Monerie, F. Perales *Local adaptive refinement method applied to solid mechanics*. Applied and computational Mechanics, 14, 2, 2020
- [4] 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
- [5] 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
- [6] GMSH Web site : <https://gmsh.info/>
- [7] L. Gomez *Caractérisation expérimentale et numérique des mécanismes de dégradation des granulats au cours d’une réaction alcali-granulats*. Thèse, Université de Toulouse et Université Laval (Québec), 2024.
- [8] E. P. Hossou *Développement d’une formulation numérique unifiée de problèmes de transport multi-espèces et multi-physiques dans des domaines discontinus. Application à la réaction sulfatique interne dans les matériaux cimentaires*. Thèse, Ecole Centrale Nantes. En cours.
- [9] M. Jean *The non-smooth contact dynamics method*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 235–257, 177, 1999
- [10] M. Jebli, F. Jamin, C. Pelissou, M.S. El Youssoufi *Characterization of the expansion due to the internal sulfate attack at the cement paste-aggregate interface*. Construction and Building Materials, 50(2), 224-231, 2021
- [11] V. Khom *Étude expérimentale et numérique du comportement chimio-mécanique de béton atteint par la réaction alcali-granulat à l’échelle mésoscopique* Thèse, Université de Toulouse et Université Laval (Québec). En cours.
- [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] MFront *Web site* : <https://tfel.sourceforge.net/>
- [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] 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
- [18] MGIS *Web site* : <https://github.com/thelfer/MFrontGenericInterfaceSupport>
- [19] 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
- [20] MUMPS <https://mumps-solver.org/>
- [21] 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
- [22] N.B. Nkoumbou Kaptchouang, Y. Monerie, F. Perales, P.-G. Vincent *Cohesive GTN model for ductile fracture simulation* Engineering Fracture Mechanics, 107437, 2021
- [23] ODOBA project *Web site* : <https://research-assessment.asnr.fr/research/odoba-project>
- [24] ODOBA STATUS REPORT *Report N° ASNR/2025-00267*, 2024
- [25] PARAVIEW *Web site* : <https://www.paraview.org/>
- [26] PELICANS *Web site* : <https://gforge.irsrn.fr/gf/project/pelicans/>
- [27] 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
- [28] 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
- [29] PETSc <https://petsc.org/>
- [30] 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.
- [31] 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
- [32] 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
- [33] 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
- [34] A. Somera, F. Perales, P.G. Vincent *Simulation of Crack Growth in Mini-C(T) Fracture Tests in the Ductile-to-Brittle Transition Using a Cohesive Zone Model : Application to Reactor Pressure Vessel Steels*. ASME 2024 Pressure Vessels & Piping Conference, Bellevue, Washington, USA, 2024
- [35] C. Tosi, R. Largenton, 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.