

# Couplage thermoélastique partitionné basé sur une conductivité effective dépendante du déplacement : application dans un cadre HPC.

P. Dubois<sup>1,2</sup>, I. Ramière<sup>1</sup>, R. Prat<sup>1</sup>, H. Barucq<sup>2</sup>, S. Gounand<sup>3</sup>

<sup>1</sup> CEA, DES, IRESNE, DEC, SESC, Cadarache, F-13108 Saint-Paul-Lez Durance, France

<sup>2</sup> Project-Team Makutu, Inria–TotalEnergies–UPPA, LMAP, UMR CNRS 5142

<sup>3</sup> CEA, DES, ISAS, DRMP, SRMA, Université Paris-Saclay, F-91191 Gif-sur-Yvette, France

**Résumé** — Dans les couplages thermomécaniques partitionnés, l'influence du déplacement mécanique sur la thermique, au cours des itérations de résolution, est généralement négligée ou traitée en appliquant le modèle thermique sur la géométrie déformée. Cette stratégie étant parfois limitante, nous investiguons une approche basée sur une conductivité effective, tenant compte du déplacement, afin de réaliser les calculs thermiques sur la configuration initiale. Cette approche est vérifiée dans Cast3M puis implémentée dans la librairie MFEM basée sur une parallélisation en mémoire distribuée.

**Mots clés** — Thermomécanique, Couplage partitionné, Flux de chaleur de Piola, Conductivité effective, Calculs parallèles.

## 1 Introduction

Les simulations thermomécaniques interviennent dans de nombreux domaines industriels, comme la fabrication additive métallique ou la simulation du comportement du combustible nucléaire en réacteur. Dans ces contextes, les gradients thermiques induisent des contraintes importantes et l'impact de la déformation mécanique sur le champ de température n'est souvent pas négligeable. Obtenir une solution couplée précise, tenant compte des interactions entre phénomènes thermiques et mécaniques est un enjeu important pour l'optimisation des procédés et la sûreté des composants.

Deux grandes familles de méthodes numériques permettent de résoudre des problèmes multiphysiques couplés : l'approche monolithique et l'approche partitionnée. La première résout simultanément l'ensemble des équations via un solveur unique. La seconde consiste à appeler itérativement des solveurs monophysiques et échanger des grandeurs d'intérêt entre physiques jusqu'à convergence. L'approche monolithique permet d'obtenir une précision accrue de la solution mais certains couplages complexes, notamment avec de fortes non-linéarités, peuvent être difficiles à résoudre avec cette approche. Par ailleurs, le développement d'un solveur monolithique est souvent intrusif et peu généralisable à d'autres couplages multiphysiques. L'approche partitionnée offre une plus grande flexibilité, une meilleure gestion de la mémoire, et permet de réutiliser des solveurs robustes développés pour chaque physique. Cette méthode repose toutefois sur des itérations de point fixe dont la convergence peut être lente voire non atteignable, limitations pour lesquelles diverses méthodes d'accélération ont été développées [1]. La plupart des logiciels de simulation thermomécanique (Abaqus, Ansys, FEniCS, etc.) intègrent ces deux stratégies. Le travail présenté ici se concentre sur l'approche partitionnée pour sa modularité, particulièrement adaptée aux applications industrielles intégrant de multiples modèles physiques [2].

Le problème d'intérêt étudié dans ce papier est un problème thermoélastique linéaire statique, pour lequel la dépendance du comportement mécanique à la température est prise en compte via la dilatation thermique. Inversement, la température dépend de la déformation mécanique induite par le champ de déplacement. Sous l'hypothèse des petites déformations, cette rétroaction n'est souvent pas prise en compte dans la littérature. Cependant, dans certains cas, la conséquence de cette rétroaction n'est pas négligeable. L'approche de référence pour traiter la dépendance du champ de température à la déformation mécanique consiste à déformer le maillage suivant le déplacement calculé puis à résoudre le problème thermique sur cette géométrie déformée. Cette solution est notamment implémentée dans les plateformes multiphysiques MOOSE [3] et PLEIADES [2]. Toutefois, cette stratégie présente plusieurs limitations : un surcoût de calcul et de mémoire lié à la mise à jour et au stockage du maillage déformé à chaque itération de convergence. Par exemple en éléments finis, il faut recalculer les transformations par rapport à

l'élément de référence. Par ailleurs, pour des calculs quasi-statiques, une projection des champs est souvent nécessaire. Une alternative permettant de maintenir la résolution thermique sur la géométrie initiale tout en tenant compte du déplacement mécanique sur la solution en température, existe dans la littérature. Cependant elle reste, à notre connaissance, rarement (voire jamais ?) implémentée dans les codes de calcul thermomécaniques partitionnés industriels. Cette approche, introduite initialement pour les grandes déformations [4], repose sur une reformulation mathématique du problème thermique : au lieu de déformer le maillage, un flux et une conductivité thermiques effectives sont déterminés analytiquement afin de garantir l'obtention de la même solution en température via la résolution du problème thermique associé sur la configuration initiale. Cette stratégie préserve la qualité du maillage tout au long de la simulation et évite les projections de champs entre géométries. En contrepartie, il est nécessaire d'effectuer des calculs locaux (de faible dimension) pour déterminer la conductivité thermique (anisotrope) effective et de reconstruire un système linéaire à chaque itération.

Ce travail investigate l'approche alternative basée sur une conductivité effective sur des problèmes thermoélastiques linéaires statiques avec petits déplacements. Un couplage partitionné de type Gauss-Seidel (appel successif des solveurs) est choisi. L'équivalence numérique des approches travaillant sur géométrie déformée ou initiale est tout d'abord vérifiée dans le logiciel Cast3M [5]. Il est important de souligner que l'implémentation de l'approche basée sur la conductivité effective dans Cast3M s'appuie sur des fonctionnalités de calcul tensoriel introduites dans la version 2025 [6]. Deux cas tests sont investigués : un benchmark numérique proposé par Novascone et al. [7] et un cas test typique du comportement d'une pastille de combustible nucléaire [8]. Puis, les performances parallèles du couplage thermoélastique basé sur l'approche conductivité effective sont évaluées dans un contexte de calcul haute performance (HPC) à l'aide de la bibliothèque MFEM [9] intégrant une parallélisation en mémoire distribuée.

## 2 Système d'équations et stratégies de couplage thermoélastique

Le comportement thermoélastique linéaire statique d'un solide occupant initialement un domaine ouvert borné  $\Omega \subset \mathbb{R}^d$  est régi par deux équations couplées : l'équation de la chaleur et l'équilibre mécanique. En négligeant les effets d'advection et d'inertie, le système s'écrit :

$$\begin{cases} -\nabla \cdot (\mathbf{K}\nabla T) = S & \text{dans } \Omega, \\ -\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}, T) = \mathbf{B} & \text{dans } \Omega, \\ \text{CL thermiques} & \text{sur } \partial\Omega, \\ \text{CL mécaniques} & \text{sur } \partial\Omega, \end{cases} \quad (1)$$

où  $T$  désigne le champ de température (K),  $\mathbf{u}$  le champ de déplacement (m),  $\mathbf{K}$  le tenseur de conductivité thermique ( $\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ ),  $\boldsymbol{\sigma}$  le tenseur des contraintes de Cauchy (Pa),  $S$  la source volumique de chaleur ( $\text{W}\cdot\text{m}^{-3}$ ) et  $\mathbf{B}$  une densité volumique de force ( $\text{N}\cdot\text{m}^{-3}$ ).

Des conditions aux limites classiques (Dirichlet, Neumann) en température et déplacement sont appliquées sur  $\partial\Omega$  afin que le problème (1) soit bien posé.

Le tenseur des contraintes  $\boldsymbol{\sigma}$  suit une loi de comportement thermoélastique linéaire :

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}, T) = \lambda \text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}))\mathbf{I} + 2\mu\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}) - (3\lambda + 2\mu)\alpha(T - T_{\text{ref}})\mathbf{I}, \quad (2)$$

où  $\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}) = \frac{1}{2}(\nabla\mathbf{u} + \nabla^T\mathbf{u})$  est le tenseur des déformations linéarisé,  $\lambda$  (Pa) et  $\mu$  (Pa) sont les coefficients de Lamé,  $\alpha$  ( $\text{K}^{-1}$ ) est le coefficient de dilatation thermique linéaire,  $T_{\text{ref}}$  (K) est la température de référence et  $\mathbf{I}$  est la matrice identité.

Par définition, le problème mécanique est résolu sur la géométrie initiale puisque son inconnue est le champ de déplacement. Mais il est important de noter que les propriétés thermiques (et la loi de Fourier) sont supposées connues uniquement dans la configuration actuelle (géométrie déformée). Dans le cas où la déformation mécanique n'est pas négligeable (i.e. configuration actuelle  $\neq$  configuration initiale), cela ne correspond pas au tenseur  $\mathbf{K}$  du problème (1) et un couplage fort est nécessaire. Deux approches de couplage thermoélastique partitionné sont ainsi présentées dans les sections suivantes.

### 2.1 Approche basée sur la déformation du maillage

Dans cette approche, le problème thermique est résolu dans la géométrie actuelle du domaine, notée  $\Omega_x$ , mise à jour au cours des itérations thermomécaniques à partir du déplacement. Cette approche est

considérée comme l'approche de référence car tous les effets géométriques complexes et la dépendance éventuelle des propriétés thermiques à la déformation sont pris en compte dans le calcul thermique.

En conservant la notation  $\Omega$  pour la géométrie initiale, le couplage thermomécanique partitionné s'écrit :

$$\begin{cases} -\nabla_x \cdot (\mathbf{k} \nabla_x T) = s & \text{dans } \Omega_x, \\ \text{CL thermiques} & \text{sur } \partial\Omega_x, \end{cases} \quad \text{et} \quad \begin{cases} -\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}, T) = \mathbf{B} & \text{dans } \Omega, \\ \text{CL mécaniques} & \text{sur } \partial\Omega, \end{cases} \quad (3)$$

où  $\nabla_x$  désigne le gradient sur le maillage déformé associé à  $\Omega_x$ .

Cette méthode présente l'avantage d'une mise en œuvre directe lorsque le code de calcul dispose nativement de fonctionnalités de déformation de maillage. En effet les paramètres thermiques ( $\mathbf{k}$  et  $s$ ) et les conditions aux limites requis sont ceux supposés connus.

## 2.2 Approche basée sur une conductivité effective dans la configuration initiale

Cette approche consiste à résoudre le problème thermique directement sur la configuration initiale  $\Omega$  (cf. problème (1)). Il s'agit alors de déterminer  $\mathbf{K}$  et  $S$  à partir des grandeurs  $\mathbf{k}$  et  $s$  connues sur la configuration déformée. Concernant la conductivité effective  $\mathbf{K}$ , le point de départ est l'expression de la puissance dissipée par conduction thermique dans la configuration déformée  $\Omega_x$  :

$$\mathcal{P}_{\text{th}} = \int_{\Omega_x} \mathbf{q} \cdot \nabla_x T dv, \quad \text{avec} \quad \mathbf{q} = -\mathbf{k} \nabla_x T, \quad (4)$$

où  $\cdot$  représente le produit scalaire,  $\mathbf{q}$  ( $\text{W} \cdot \text{m}^{-2}$ ) est la densité de flux thermique donné par la loi de Fourier dans la configuration déformée,  $\nabla_x T$  est le gradient de température dans la configuration déformée, et  $\mathbf{k}$  est la conductivité thermique connue dans  $\Omega_x$ , considérée ici par simplification indépendante de la température et du déplacement.

L'objectif est de trouver la densité de flux thermique effective  $\mathbf{Q}$  dans la configuration initiale  $\Omega$  permettant de conserver la puissance dissipée :

$$\mathcal{P}_{\text{th}} = \int_{\Omega_x} \mathbf{q} \cdot \nabla_x T dv = \int_{\Omega} \mathbf{Q} \cdot \nabla T dV, \quad (5)$$

où  $\nabla T$  désigne le gradient de température dans la configuration initiale.

En notant  $\mathbf{x} \in \Omega_x$  (resp.  $\mathbf{X} \in \Omega$ ) la position dans la configuration déformée (resp. initiale), nous avons

$$\mathbf{x} = \mathbf{X} + \mathbf{u}(\mathbf{X}) \quad \text{et} \quad \mathbf{F} = \partial \mathbf{x} / \partial \mathbf{X} = \mathbf{I} + \nabla \mathbf{u}, \quad (6)$$

avec  $\mathbf{F}$  le tenseur gradient de la transformation (ou tenseur gradient de la déformation).

Le gradient de température dans la configuration déformée s'exprime alors selon la relation :

$$\nabla_x T = \mathbf{F}^{-T} \nabla T, \quad (7)$$

Par ailleurs, les éléments de volume sont reliés par l'expression

$$dv = J dV, \quad \text{avec} \quad J = \det(\mathbf{F}). \quad (8)$$

En substituant ces relations dans l'expression de la puissance dissipée (4), on obtient :

$$\int_{\Omega_x} \mathbf{q} \cdot \nabla_x T dv = \int_{\Omega} \mathbf{q} \cdot (\mathbf{F}^{-T} \nabla T) J dV = \int_{\Omega} (J \mathbf{F}^{-1} \mathbf{q}) \cdot \nabla T dV. \quad (9)$$

Par identification avec l'égalité de puissance (5), on définit la densité de flux thermique dit de Piola ou Piola-Kirchhoff [4] :

$$\mathbf{Q} := J \mathbf{F}^{-1} \mathbf{q}. \quad (10)$$

En utilisant la définition (4) de la densité de flux thermique  $\mathbf{q}$  et la transformation (7), on identifie ainsi une loi constitutive de type Fourier dans la configuration initiale

$$\mathbf{Q} = -\mathbf{K} \cdot \nabla T, \quad \text{avec} \quad \mathbf{K} = J \mathbf{F}^{-1} \mathbf{k} \mathbf{F}^{-T}. \quad (11)$$

La puissance volumique effective  $S$  dans la configuration initiale s'obtient aisément en utilisant la relation (8) dans l'expression de la conservation de la quantité de chaleur produite :

$$\mathcal{P}_s = \int_{\Omega_x} s dv = \int_{\Omega} s J dV = \int_{\Omega} S dV. \quad (12)$$

L'expression de la densité de flux effectif (10) permet également de garantir l'égalité de l'intégrale des flux sortants sur les frontières :

$$\int_{\partial\Omega_x} \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} \, da = \int_{\partial\Omega} \mathbf{Q} \cdot \mathbf{N} \, dA, \quad (13)$$

où  $\mathbf{n}$  et  $\mathbf{N}$  désignent les normales unitaires sortantes sur les frontières  $\partial\Omega_x$  et  $\partial\Omega$  respectivement. En effet, en utilisant l'expression (8) et les relations  $dv = \mathbf{dl} \cdot (\mathbf{n} \, da)$ ,  $dV = \mathbf{dL} \cdot (\mathbf{N} \, dA)$ ,  $\mathbf{dl} = \mathbf{F} \mathbf{dL}$  on obtient la formule de Nanson [10]

$$\mathbf{n} \, da = J \mathbf{F}^{-T} \mathbf{N} \, dA, \quad \text{et} \quad da = J \|\mathbf{F}^{-T} \mathbf{N}\| \, dA. \quad (14)$$

Ainsi

$$\mathbf{q} \cdot \mathbf{n} \, da = \mathbf{q} \cdot (J \mathbf{F}^{-T} \mathbf{N}) \, dA = (J \mathbf{F}^{-1} \mathbf{q}) \cdot \mathbf{N} \, dA = \mathbf{Q} \cdot \mathbf{N} \, dA. \quad (15)$$

Les expressions (14) et (15) permettent d'obtenir les conditions de Neumann effectives. Ainsi une condition de Neumann homogène sera conservée sur la configuration initiale. Les conditions de Dirichlet sur la configuration initiale sont obtenues directement via la transformation (6).

Le couplage thermomécanique partitionné dans la configuration initiale s'écrit ainsi :

$$\begin{cases} -\nabla \cdot (\mathbf{K} \nabla T) = sJ & \text{dans } \Omega, \\ \text{CL thermiques adaptées} & \text{sur } \partial\Omega, \end{cases} \quad \text{et} \quad \begin{cases} -\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}, T) = \mathbf{B} & \text{dans } \Omega, \\ \text{CL mécaniques} & \text{sur } \partial\Omega. \end{cases} \quad (16)$$

Cette formulation de l'équation de la chaleur permet de résoudre le problème thermique sur un maillage fixe, tout en conservant rigoureusement l'effet du déplacement sur la solution thermique.

### 3 Présentation des résultats

Cette section présente la mise en œuvre et la vérification de la stratégie de couplage thermoélastique basée sur une conductivité effective. Cette approche, introduite précédemment, conserve un maillage fixe (configuration initiale) tout au long des itérations de couplage. La vérification sera effectuée en regard de l'approche de référence basée sur la déformation du maillage. Bien que les cas tests considérés se situent dans le cadre des petites déformations, un niveau de précision important est requis sur la solution multiphysique, ce qui implique des itérations de point fixe entre les deux solveurs. Le critère de convergence est basé sur l'erreur relative de la norme euclidienne du déplacement entre 2 itérations de point fixe, qui doit être inférieure à un seuil fixé dans ce travail à  $10^{-6}$ . Les résultats obtenus permettent d'apprécier les performances numériques de l'approche conductivité effective en termes de précision et de temps de calcul, mais également d'applicabilité dans un environnement HPC.

#### 3.1 Comportement thermoélastique d'une barre

Ce premier cas test porte sur l'étude du comportement thermoélastique d'une barre de 5m de long et de section  $1\text{m} \times 1\text{m}$  soumise à des conditions de température imposées à ses extrémités : l'une est maintenue à 100 K tandis que l'autre est portée à 1100 K, induisant un gradient thermique le long de la barre (cf. figures 1a et 1c). Aucune source thermique volumique n'est considérée. Les conditions aux limites mécaniques sont choisies de sorte que la déformation ne s'effectue que dans la direction axiale de la barre. Le maillage et les paramètres physiques sont issus des travaux de Novascone et al. [7].

Ce cas test a été reproduit avec le code Cast3M (version 2025) en utilisant les deux stratégies de couplage partitionné. Les deux approches convergent en 3 itérations de point fixe. Les résultats obtenus sont présentés en figure 1.

La première conclusion à dresser est que dans le cas du couplage avec déformation explicite du maillage, les résultats obtenus avec Cast3M sont en parfaite cohérence avec ceux obtenus avec MOOSE/BISON, voir [7, figure 1]. Concernant la comparaison des deux approches de couplage réalisées en Cast3M, un écart relatif sur le déplacement maximal et la température de l'ordre de l'erreur machine ( $\sim 10^{-15}$ ) est obtenu, ce qui valide numériquement la stratégie basée sur la conductivité effective.

Le tableau 1 présente la décomposition des temps de calcul pour chaque méthode de couplage. Quatre phases sont mesurées :

- le pré-calcul thermique : cette phase regroupe, pour l'approche par conductivité effective, la mise à jour du tenseur de conductivité effective et, pour l'approche par déformation explicite, la déformation du maillage thermique. Cette phase inclut également, pour les deux approches, l'assemblage de la matrice de rigidité thermique et la formation du système linéaire associé.

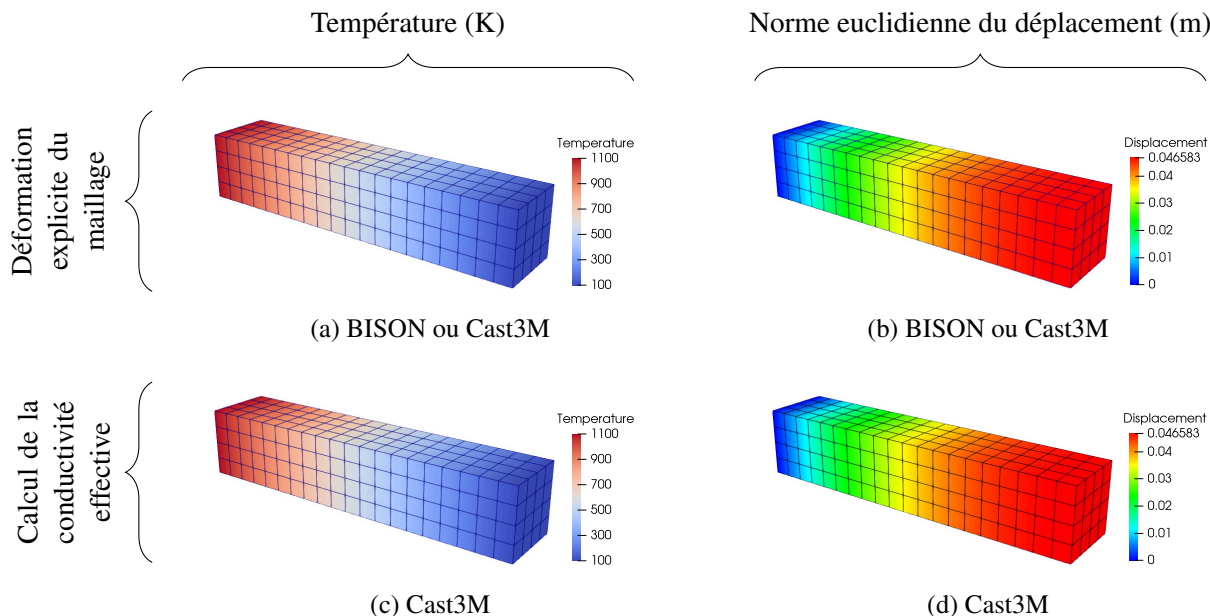


FIGURE 1 – Cas test barre – Distribution de la température (K) et du déplacement (m) obtenues avec les deux approches pour la résolution du problème thermoélastique couplé (maillage de 2560 nœuds).

- le pré-calcul mécanique : cette phase comprend le calcul du chargement thermique induit par le champ de température, l’assemblage du vecteur force correspondant et la formation du système linéaire. La matrice de rigidité mécanique et les conditions aux limites mécaniques sont assemblées une seule fois au début du calcul.
- la résolution thermique et la résolution mécanique qui désignent la résolution du système linéaire associé à chaque problème, réalisée via un solveur direct. Les étapes de factorisation des matrices sont conservées par Cast3M.

Phase	Conductivité effective				Déformation explicite			
	It. 1	It. 2	It. 3	Total	It. 1	It. 2	It. 3	Total
Pré-calc. therm. (s)	0.495	1.943	1.941	4.379	0.244	0.245	0.251	0.740
Résol. therm. (s)	49.185	26.792	26.573	102.550	49.804	34.231	27.080	111.115
Pré-calc. méca. (s)	0.337	0.319	0.323	0.979	0.337	0.337	0.329	1.003
Résol. méca. (s)	132.666	4.022	4.592	141.280	132.533	4.129	3.660	140.322
Total (s)	182.683	33.076	33.429	<b>249.188</b>	182.918	38.942	31.320	<b>253.180</b>

TABLE 1 – Cas test barre – Temps de calcul en séquentiel (par itération et par phase de calcul) pour chaque stratégie de couplage partitionné. Calculs Cast3M, maillage de 100 000 nœuds, solveur direct, PC Intel Core Ultra 5 135H (18 threads) avec 16 Go RAM.

À la première itération, les temps totaux sont quasi-identiques pour les deux approches ( $\sim 182$  s), dominés par les résolutions thermique et mécanique incluant les factorisations initiales des matrices des systèmes linéaires. Les phases de pré-calcul restent négligeables ( $< 1\%$  du temps total). Aux itérations suivantes, les temps de résolution diminuent significativement, surtout pour la mécanique, car les factorisations de matrice sont réutilisées. L’approche par conductivité effective présente un surcoût du pré-calcul thermique à partir de la seconde itération lié à la construction du tenseur de conductivité  $\mathbf{K}$  (orthotropique dans ce cas), alors que l’approche par déformation explicite utilise une conductivité isotrope. Ce surcoût est compensé par un gain sur la résolution thermique, l’approche par conductivité effective résolvant le système sur le maillage initial (non déformé) évitant les recalculs liés à la transformation du maillage. Les temps de calcul totaux restent *in fine* très comparables pour ce premier cas test.

### 3.2 Comportement thermoélastique d’une pastille de combustible

Ce second cas test porte sur une géométrie représentative d’un fragment de pastille de combustible nucléaire [8], de hauteur 7mm et de rayon 4mm. Le problème thermique intègre une source volumique qui représente la puissance dégagée par les réactions de fission. La face de la pastille en regard de la

gaine est maintenue à une température de 600 K. Les conditions aux limites mécaniques sont choisies pour reproduire les effets d’empilement et de confinement d’une pastille contenue dans un assemblage combustible. Les propriétés des matériaux considérés sont :  $\mathbf{k} = k_0 \mathbf{I}$  avec  $k_0 = 2.5 \text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ ,  $E = 190 \text{ GPa}$ ,  $\nu = 0.3$ ,  $\alpha = 1 \times 10^{-5} \text{ K}^{-1}$  et  $T_{\text{ref}} = 96.8 \text{ K}$ . La figure 2 reporte les champs de température et de déplacement obtenus avec Cast3M pour l’approche avec conductivité effective. Les écarts vis-à-vis de l’approche avec déformation du maillage sont également reportés, normalisés par la valeur maximale de l’approche de référence.

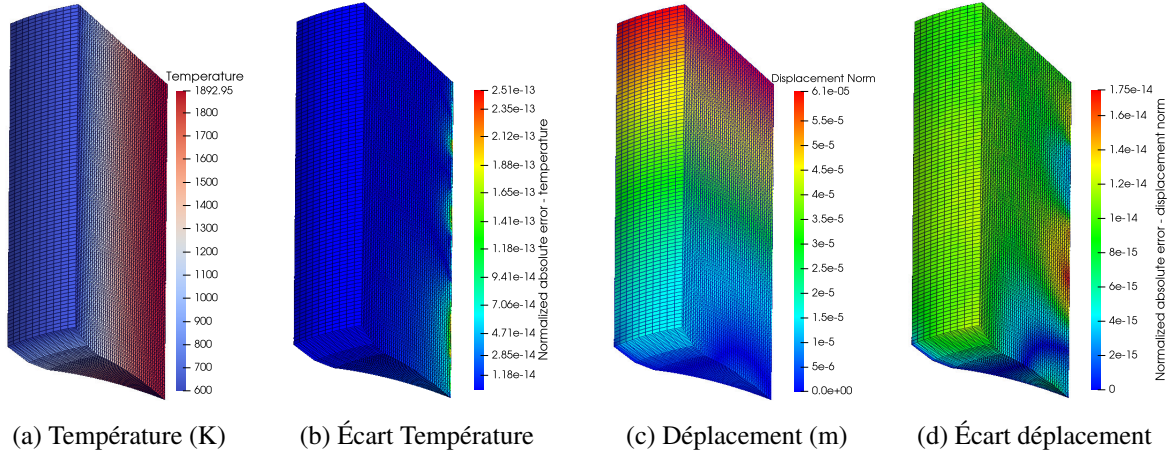


FIGURE 2 – Cas test combustible – Solutions obtenues avec le calcul de la conductivité effective – Écarts relatifs vs approche avec déformation du maillage. Calculs Cast3M, maillage de 120 221 nœuds.

Les deux approches de couplage nécessitent 5 itérations pour converger, et les écarts relatifs entre elles sont au maximum de  $10^{-13}$  pour la température et de  $10^{-14}$  pour le déplacement, confirmant que l’approche par conductivité effective est fiable même pour des géométries 3D plus complexes et des problèmes avec un terme source. Les tendances observées sur les temps de calculs par phase sur le cas test barre (cf. tableau 1) se confirment sur ce problème plus complet.

### 3.3 Évaluation des performances de l’approche avec calcul de la conductivité effective

Afin d’évaluer les performances de l’approche par conductivité effective dans un cadre de calcul haute performance, le cas test de la barre (cf. section 3.1) a été reproduit avec la bibliothèque MFEM [9]. Pour l’évaluation des performances, deux solveurs linéaires sont comparés : un solveur direct utilisant MUMPS (Multifrontal Massively Parallel sparse direct Solver) et un solveur itératif de type gradient conjugué (CG) natif MFEM avec préconditionnement par multigrille algébrique HypreBoomerAMG. Une tolérance absolue de  $10^{-6}$  sur le résidu est fixée pour la convergence du solveur itératif. Des optimisations de temps de calculs sont effectuées pour les 2 solveurs : conservation de la factorisation de la matrice associée au problème mécanique dans le cas du solveur direct et initialisation du solveur itératif avec les champs de solution de l’itération précédente. Dans toutes les configurations testées, le schéma de couplage converge en trois itérations, conformément à la section 3.1. La figure 3 présente les champs de température et de déplacement obtenus avec MFEM en utilisant le solveur itératif. Ces derniers sont visuellement indistinguables des solutions obtenues avec Cast3M et BISON (cf. figure 1), ce qui confirme la validité de l’implémentation de l’approche basée sur la conductivité effective dans MFEM.

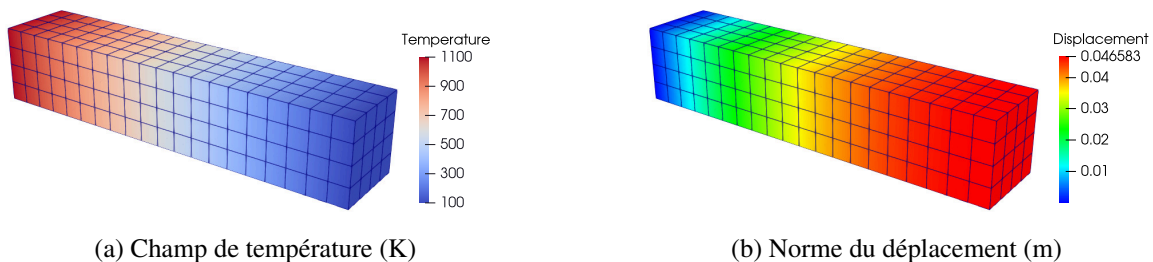


FIGURE 3 – Cas test barre – Distribution de la température (K) et du déplacement (m) obtenues avec l’approche de couplage basée sur la conductivité effective. Calcul MFEM, maillage de 2560 nœuds.

Le tableau 2 reporte la décomposition des temps de calcul pour les deux solveurs linéaires utilisés dans MFEM en séquentiel, avec des phases similaires à celles de la section 3.1 permettant une comparaison directe avec les résultats obtenus via Cast3M présentés précédemment (cf. tableau 1). Pour rappel, le calcul Cast3M a été réalisé avec un solveur direct pour les résolutions thermiques et mécaniques. Le

Phase	Solveur Direct (MUMPS)				Solveur Itératif (CG + prec. AMG)			
	It. 1	It. 2	It. 3	Total (s)	It. 1	It. 2	It. 3	Total (s)
Pré-calc. therm. (s)	3.172	3.139	3.086	9.397	3.117	3.094	3.106	9.317
Résol. therm. (s)	2.581	2.569	2.556	7.706	0.804	1.014	1.025	2.843
Pré-calc. méca. (s)	0.383	0.386	0.388	1.157	3.400	0.378	0.381	4.159
Résol. méca. (s)	42.523	0.738	0.735	43.996	28.075	16.147	11.690	55.912
Total (s)	48.66	6.83	6.77	<b>62.26</b>	35.40	20.63	16.20	<b>72.23</b>

TABLE 2 – Cas test barre – Temps de calcul en séquentiel (par itération et par phase de calcul) pour deux types de solveur linéaire (direct vs itératif) dans MFEM. Approche basée sur la conductivité effective, maillage de 100 000 nœuds. PC Intel Core Ultra 5 135H (18 threads) avec 16 Go RAM.

comportement global observé avec l'utilisation d'un solveur direct dans un calcul séquentiel avec MFEM diffère de celui observé avec Cast3M. Les phases de précalcul et de résolution thermiques ne semblent pas impactées par le calcul de la conductivité effective. Même si la phase de précalcul thermique est rallongée dans MFEM, le temps total passé dans le modèle thermique est considérablement réduit avec MFEM. Les temps concernant le modèle mécanique sont plus cohérents entre MFEM et Cast3M, avec une réduction importante du temps de calcul observée dès la deuxième itération grâce à l'utilisation de la factorisation obtenue à la première itération. Le calcul mécanique est toutefois plus rapide avec MFEM que Cast3M. *In fine*, le temps de calcul total est principalement dominé par la résolution mécanique.

L'utilisation d'un solveur itératif permet de bien réduire le coût de la première itération en comparaison du solveur direct. Cependant le coût des itérations suivantes diminue moins que dans le cas du solveur direct, ce qui conduit au final à un temps de calcul légèrement plus important avec le solveur itératif. Néanmoins, le solveur itératif demeure le choix privilégié pour l'analyse de scalabilité car le nombre de degrés de liberté sera beaucoup plus important, facteur limitant du solveur direct.

Une analyse de scalabilité forte a été conduite avec un nombre de processus MPI allant de 64 à 4096 sur le cluster TOPAZE du CCRT composé de nœuds AMD EPYC Milan 7763 cadencés à 2.45 GHz avec 128 cœurs par nœud et 256 Go de RAM. Les résultats peuvent être visualisés en figure 4.

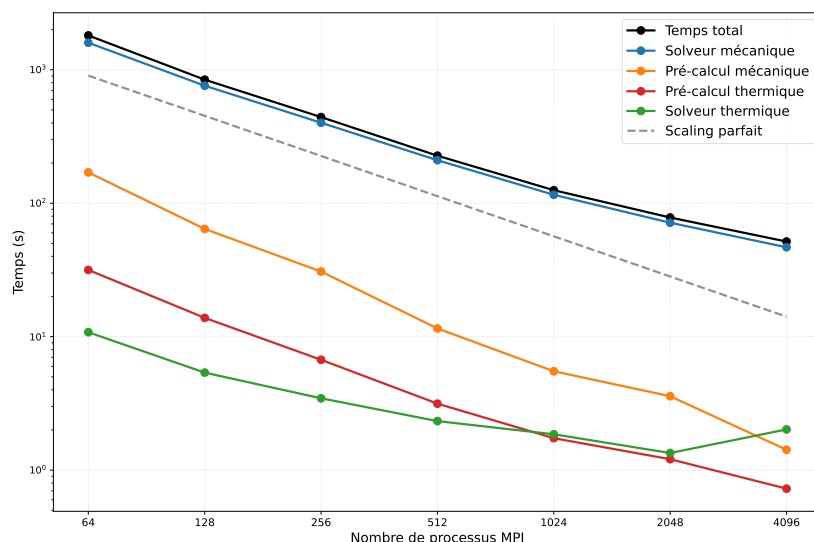


FIGURE 4 – Cas test barre – Scalabilité forte pour la stratégie basée sur conductivité effective. Calculs MFEM sur Topaze, solveur itératif, maillage de  $83 \times 10^6$  de nœuds, un cœur de calcul par processus MPI.

Tout d'abord, nous observons pour les phases de pré-calculation thermique et mécanique une accélération des temps de calcul quasi-idéale ainsi qu'un impact très faible de ces phases sur les temps de simulation totaux. Concernant le solveur thermique, celui-ci conserve une bonne scalabilité jusqu'à 2048 processus MPI puis les temps de calcul remontent légèrement. Cependant, celui-ci a aussi l'impact le

plus négligeable sur les performances globales, représentant moins de 1% du temps de calcul total sur 2048 processus MPI. La phase de résolution du problème mécanique quant à elle prédomine largement le temps de calcul total. Elle présente aussi une scalabilité quasi parfaite jusqu'à 1024 processus MPI puis on note un léger décrochage même si des gains sont toujours notables. Finalement, nous pouvons conclure de la figure 4 que les performances en parallèle de cette simulation dépendent en grande partie du choix du solveur et du préconditionneur du solveur linéaire du problème mécanique. Un couplage partitionné de type Jacobi (appel synchrone des solveurs) aurait été certainement plus intrusif, impliquant une répartition des calculs très déséquilibrée entre les solveurs thermique et mécanique pour compenser la différence de temps de résolution.

## 4 Conclusion et perspectives

Cette étude a investigué deux stratégies de couplage partitionné thermoélastique statique linéaire permettant de prendre en compte l'effet du déplacement mécanique sur la solution du problème thermique. La première méthode, considérée comme l'approche de référence, repose sur la déformation explicite du maillage à chaque itération du couplage. La seconde résout le problème thermique sur la géométrie initiale, intégrant l'influence du déplacement via un tenseur de conductivité et un terme source modifiés.

Les résultats obtenus sur deux cas tests implémentés dans Cast3M démontrent l'équivalence numérique des deux approches. Les performances analysées confirment que l'approche basée sur la conductivité effective n'implique pas de surcoût significatif en temps de calcul. De plus, cette approche est aussi adaptée au HPC et a été implémentée dans MFEM pour des problèmes de plusieurs dizaines de millions de degrés de liberté sur des clusters de calcul composés de plusieurs milliers de processeurs.

Ces travaux ouvrent plusieurs perspectives, notamment l'application de l'approche par conductivité effective sur des comportements matériaux plus complexes impliquant des couplages forts.

## 5 Remerciements

Dans le cadre de France 2030, ce travail a bénéficié d'une aide de l'État, gérée par l'Agence Nationale de la Recherche et attribuée au projet Exa-MA, qui fait partie du programme prioritaire de recherche NumPEX, sous la référence ANR-22-EXNU-0002. Ce travail a également été réalisé à l'aide des ressources HPC du CCRT, financées par le programme de simulation du CEA/DES.

## Références

- [1] I. Ramière and T. Helfer. Iterative residual-based vector methods to accelerate fixed point iterations. *Computers & Mathematics with Applications*, 70(9) :2210–2226, 2015.
- [2] S. Bernaud, I. Ramière, G. Latu, and B. Michel. PLEIADES : A numerical framework dedicated to the multiphysics and multiscale nuclear fuel behavior simulation. *Annals of Nuclear Energy*, 205 :110577, September 2024.
- [3] C. Permann, D. Gaston, D. Andrš, R. Carlsen, F. Kong, A. Lindsay, J. Miller, J. Peterson, A. Slaughter, R. Stogner, and R. Martineau. Moose : Enabling massively parallel multiphysics simulation. *SoftwareX*, 11 :100430, 2020.
- [4] B. Wcisło and J. Pamin and L. Rose and A. Menzel. On Spatial vs Referential Isotropic Fourier's Law in Finite Deformation Thermomechanics. *Engineering Transactions*, 71(1) :111–140, 2023.
- [5] S. Gounand, P. Verpeaux, S. Pascal, F. Di Paola, and C. Berthinier. Cast3M, a problem-solving software for structural and fluid analysis. In *ECCOMAS 2024 – 9th European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering*, Lisbon, Portugal, Jun 2024, 2024. hal-04609241.
- [6] CEA. Cast3m. <https://www-cast3m.cea.fr/>, 2025.
- [7] S.R. Novascone, B.W. Spencer, J.D. Hales, and R.L. Williamson. Evaluation of coupling approaches for thermomechanical simulations. *Nuclear Engineering and Design*, 295 :910–921, 2015.
- [8] C. Introïni, I. Ramière, J. Sercombe, B. Michel, T. Helfer, and J. Fauque. ALCYONE : the fuel performance code of the PLEIADES platform dedicated to PWR fuel rods behavior. *Annals of Nuclear Energy*, 207 :110711, 2024.
- [9] R. Anderson, J. Andrej, A. Barker, J. Bramwell, J.-S. Camier, J. Cervený, V. Dobrev, Y. Dudouit, A. Fisher, T. Kolev, W. Pazner, M. Stowell, V. Tomov, I. Akkerman, J. Dahm, D. Medina, and S. Zampini. MFEM : a modular finite element methods library. *Computers & Mathematics with Applications*, 81 :42–74, 2021.
- [10] J. Bonet and R. D. Wood. *Nonlinear Continuum Mechanics for Finite Element Analysis*. Cambridge University Press, Cambridge, UK ; New York, NY, USA, 2 edition, 2008.