



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

Frédéric Perales, Frédéric Dubois, Yann Monerie, Rémy Mozul, Fabrice Babik, Talib Dbouk, Raphaël Monod

### ► To cite this version:

Frédéric Perales, Frédéric Dubois, Yann Monerie, Rémy Mozul, Fabrice Babik, et al.. Xper: une plateforme pour la simulation numérique distribuée d'interactions multiphysiques entre corps.. 12e Colloque national en calcul des structures, CSMA, May 2015, Giens, France. hal-01516448

HAL Id: hal-01516448

<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01516448>

Submitted on 1 May 2017

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

## 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>, T. Dbouk<sup>1,3</sup>, R. Monod<sup>2,3</sup>

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

<sup>2</sup> LMGC, CNRS-Université Montpellier 2, case 048, Place Eugène Bataillon, F-34095 cedex 5, France

<sup>3</sup> Laboratoire MIST, CNRS - IRSN - Université Montpellier 2

---

**Résumé** — Le papier concerne l'outil numérique parallèle développé pour l'étude des interactions entre corps rigides ou déformables. Les interactions concernent d'une part la séparation dans le cadre de la rupture dynamique de matériaux hétérogènes et d'autre part le contact entre particules en présence de fluide. La plateforme numérique associée repose sur le couplage du logiciel LMGC90 (Dynamique des Contacts) pour la prise en compte d'interactions complexes entre les corps et la bibliothèque PELICANS pour la résolution des comportements volumiques (Eléments finis ou Volumes Finis) des corps.

**Mots clés** — Fissuration, Modèles de Zone Cohésive Frottante, Dynamique non régulière, Ecoulements particuliers denses, Frontières Immersées, Message Passing Interface.

---

## 1 Introduction

Les travaux concernent la plateforme numérique développée 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, les études présentées dans ce papier portent d'une part sur les interactions de séparation : rupture dynamique des matériaux fortement hétérogènes et d'autre part sur les interactions de contact en présence de fluide : particules immergées dans un fluide.

Les modélisations d'interactions reposent sur l'approche Non Smooth Contact Dynamics (NSCD) [1] avec frottement dédiée au traitement de systèmes dynamiques en présence de contraintes unilatérales sans régularisation ni pénalisation.

*Interactions de séparation.* Dans le cadre de la fissuration 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) [2]. 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 [2, 3].

*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) [4, 5]. L'approche, développée dans le logiciel **Xper**, permet de traiter des problèmes d'écoulements non compressible complexes [6, 7].

**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) [8] pour la résolution des problèmes volumiques (Eléments finis ou Volumes Finis) et du logiciel LMGC90 (Logiciel de Mécanique Gérant le Contact) [9, 10] pour le traitement des interactions non régulières. 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).

Les modèles implémentés dans la plateforme sont succinctement présentés puis les potentialités du logiciel sont illustrées sur la fissuration d'un bimatériau, un essai de fissuration en mode mixte 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 [1] 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  $\alpha$  :

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

où  $\rho > 0$  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 quantités  $N$  et  $T$  indiquent respectivement les parties normales et tangentielles.

Le système non linéaire (1) est résolu par une méthode de Newton généralisé [11].

### 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 [12] est introduite (voir [13]) :

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

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

### 2.3 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) :

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

où  $\sigma = -pI + \mu[\nabla u + (\nabla u)^T]$  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,  $\mu$  la viscosité du fluide et  $\eta$  une fonction permettant de définir la position des particules. Dans cette étude,  $\eta$  est choisi tel que :  $\eta(X) = 1 - \varepsilon$  si  $X \in \Omega_s$ ,  $\eta(X) = \varepsilon$  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 [14] et Van Kan [15]. Pour plus de détails, voir [7].

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

### 3 Applications

#### 3.1 Fissuration : rupture d'un bimatériau

Une première application concerne la fissuration d'un bimatériau. Le domaine, divisé en 48 sous domaines, est rectangulaire ( $5 \cdot 10^{-5} \times 5 \cdot 10^{-5} m^2$ ) et contient des inclusions rectangulaires (voir FIGURE 1). Les mailles sont triangulaires de taille  $\sim 5 \cdot 10^{-7} m$ . La matrice élastoplastique et les inclusions élastiques ont les propriétés suivantes :  $E^{mat} = 99GPa$ ,  $E^{incl} = 135GPa$ ,  $\nu^{mat} = 0.325$ ,  $\nu^{incl} = 0.32$ ,  $\rho^{mat} = \rho^{incl} = 7850kg/m^3$ ,  $\sigma_0^{mat} = 250MPa$  et  $H_Y = 850MPa$ . Les propriétés surfaciques sont :  $C_N^{mat} = C_T^{mat} = 2 \cdot 10^{19} Pa/m$ ,  $C_N^{incl} = C_T^{incl} = 2C_N^{mat}$ ,  $C_N^{mat/incl} = C_T^{mat/incl} = 2C_N^{mat}$ ,  $w^{mat} = 0.5J/m^2$ ,  $w^{incl} = 0.8w^{mat}$  et  $w^{mat/incl} = 10w^{mat}$ . Une zone cohésive est introduite entre chaque maille. Les conditions aux limites sont imposées à gauche et à droite, respectivement  $v_x = 2m/s$  et  $v_x = -2m/s$ . Une préfissure perpendiculaire au chargement est présente en bas et les calculs sont effectués sans frottement.

La FIGURE 1 montre la propagation de la fissure dans les sous domaines pour 4 et 48 processeurs (gauche) et le faciès de rupture pour 48 processeurs (droite). La fissure se propage dans la matrice puis dans les inclusions. L'efficacité pour 48 processeurs est d'environ 0.7.

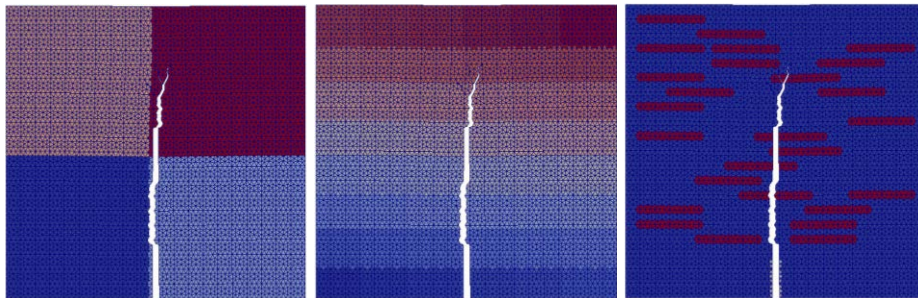


FIGURE 1 – Fissuration d'un matériau hétérogène : découpage par 4 et 48 domaines (gauche) et faciès pour 48 domaines (droite).

#### 3.2 Fissuration : essai de Nooru-Mohamed

L'application concerne la fissuration en mode mixte d'une éprouvette pré entaillée [17]. Le domaine, divisé en 48 sous domaines, est carré ( $0.2 \times 0.2 m^2$ ) et est pré entaillé à gauche et à droite (voir FIGURE 2). Les mailles sont triangulaires de taille  $\sim 2 \cdot 10^{-3} m$ . La matrice est élastique :  $E^{mat} = 32GPa$ ,  $\nu^{mat} = 0.2$ ,  $\rho^{mat} = 2200kg/m^3$ . Les propriétés surfaciques sont :  $C_N^{mat} = C_T^{mat} = 2 \cdot 10^{14} Pa/m$ ,  $w^{mat} = 110J/m^2$ . Ici encore une zone cohésive est introduite entre chaque maille. Les conditions aux limites 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 2 montre la propagation de la fissure dans les sous domaines pour 4 et 48 processeurs. Les résultats sont conformes au résultat de la littérature [17]. L'efficacité pour 48 processeurs est d'environ 0.7.

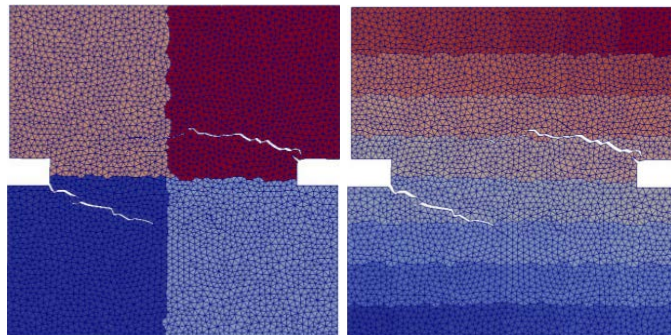


FIGURE 2 – Fissuration d'un essai de Nooru-Mohamed [17] : découpage par 4 et 48 domaines.

### 3.3 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  $[4dx40d]$ . 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 3 montre la sédimentation sous gravité des deux particules immergés. 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 [16].

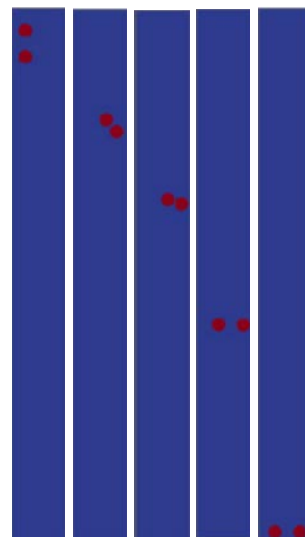


FIGURE 3 – Sédimentation de deux grains immergés : "draft", "kiss" et "tumble".

### Références

- [1] M. Jean. *The non-smooth contact dynamics method*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 235–257, 177, 1999.
- [2] 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.
- [3] 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.
- [4] C.S. Peskin. *Flow patterns around heart valves : A numerical method*, Journal of Computational Physics, 10(2) :252-271, 1972.
- [5] 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.
- [6] T. Dbouk, F. Perales and F. Babik *Numerical Modeling of the Dynamics of Immersed Granular Materials*, Modeling Granular Media Across Scales, Montpellier, France, July 9-11, 2014
- [7] T. Dbouk, F. Perales, F. Babik and R. Mozul *Rheology of Immersed Granular Materials*, Journal of Computational Physics, In Progress
- [8] PELICANS. *Web site : <https://gforge.irsn.fr/gf/project/pelicans/>*
- [9] F. Dubois, R. Mozul. *LMGC90*. 11ème colloque national en calcul de structures, Giens, 2013.
- [10] LMG90. *Web site : <http://transfert.lmgc.univ-montp2.fr/LMG90/>*
- [11] P. Alart and A. Curnier. *A generalized newton method for contact problems with friction*. Journal de Mécanique Théorique et Appliquée, 7 :67-82, 1988.
- [12] J.-C. Michel, P. Suquet and 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.
- [13] 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.
- [14] A. J. Chorin *Numerical solution of the Navier-Stokes equations*. Mathematics of Computation, 33 :745-762, 1968
- [15] J. Van Kan *A second order accurate pressure-correction scheme for viscous incompressible flow* SIAM Journal on Scientific Computing, 7 :870-891, 1986
- [16] S. Ghosh and J. M. Stockie *Numerical simulations of particle sedimentation using the immersed boundary method* Journal of Computational Physics, May 2013
- [17] M. B. Nooru-Mohamed *Mixed-mode fracture of concrete : an experimental approach* PhD thesis, Delft University of Technology, 1992