



HAL
open science

Méthodes numériques et algorithmes parallèles pour la dynamique rapide des systèmes fluide-structure fortement couplés.

Vincent Faucher

► **To cite this version:**

Vincent Faucher. Méthodes numériques et algorithmes parallèles pour la dynamique rapide des systèmes fluide-structure fortement couplés.. Mécanique des structures [physics.class-ph]. INSA de Lyon; Université Claude Bernard - Lyon I, 2014. tel-01011205

HAL Id: tel-01011205

<https://theses.hal.science/tel-01011205>

Submitted on 26 Jun 2014

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.

MEMOIRE D'HABILITATION A DIRIGER DES RECHERCHES

présenté devant

**l'Institut National des Sciences Appliquées de Lyon
et l'Université Claude Bernard Lyon I**

Spécialité : Mécanique

*Méthodes numériques et algorithmes parallèles pour
la dynamique rapide des systèmes fluide-structure
fortement couplés*

Par

Vincent FAUCHER

Soutenance publique prévue le 19/06/2014 devant la Commission d'examen

| | | |
|--------------|--|------------|
| C. Calvin | Chef de projet (docteur, HDR) au CEA | Examineur |
| F. De Vuyst | Professeur à l'Ecole Normale Supérieure de Cachan | Rapporteur |
| P. Díez | Professeur à l'Université Polytechnique de Catalogne | Rapporteur |
| A. Gravouil | Professeur à l'Institut National des Sciences Appliquées de Lyon | Examineur |
| E. Jacquelin | Professeur à l'Université Claude Bernard Lyon I | Examineur |
| B. Raffin | Chargé de recherche (CR1, HDR) à l'INRIA | Examineur |
| F.-X. Roux | Professeur associé à l'Université Pierre et Marie Curie | Rapporteur |

Préambule

Je tiens avant toute chose à remercier sincèrement Florian De Vuyst, François-Xavier Roux et Pedro Díez pour avoir accepté la lourde tâche de rapporter ce travail. Leur investissement et la pertinence de leurs retours sont à la hauteur de ce qu'ils représentent pour moi en tant que références dans la communauté du calcul scientifique et des mathématiques appliquées.

Mes pensées suivantes vont naturellement aux membres du jury, qui m'ont fait l'honneur d'examiner la soutenance, et conjointement, au LaMCoS et à l'INSA de Lyon qui ont accepté de porter ma candidature en tant que chercheur du CEA, en vertu de nos nombreuses collaborations.

Pour en venir au chemin qui m'a conduit à cette HDR, avec un parcours relativement éloigné des standards académiques (j'emprunte ici les mots très pertinents de Pedro Díez dans son rapport), il est majoritairement marqué par des rencontres déterminantes, venues confirmer au fur et à mesure ma vocation de chercheur en environnement industriel.

A tout seigneur, tout honneur, je commence par Georges Devesa, d'EDF R&D : après un premier stage instructif dans mon cursus d'ingénieur aux Etudes et Recherches EDF, il m'a ouvert la voie du développement dans un code de simulation en mécanique pendant mon stage de DEA, avec une orientation vers la dynamique des structures et des fluides. Au regard de la suite, c'est un geste décisif, porté par un enthousiasme et une compétence technique sans faille.

J'ai croisé dans ce stage Serguei Potapov, dont je suis resté proche par la suite dans l'expérience EPX, et qui m'a conduit à ma deuxième rencontre marquante, celle du professeur Alain Combescure pour ma thèse. Son approche de la recherche tentant de réaliser le compromis idéal entre des théories numériques analysées en profondeur et leurs applications sur des cas concrets de l'industrie, est rapidement devenue le socle de mon travail et c'est très naturellement avec lui, et jamais très loin d'Anthony Gravouil, que j'ai réalisé par la suite mes premiers co-encadrements de thèse.

De retour dans mes années doctorales, j'y ai rencontré l'environnement de développement du programme EUROPLEXUS (ou EPX comme je préfère le nommer avec un soupçon de modernité et de coquetterie) : Michel Lepareux, Haridh Bung et Folco Casadei en particulier. L'avenir a montré que l'apprentissage, via leur expertise reconnue, des techniques propres à la dynamique rapide des fluides et des structures a sérieusement orienté mon parcours par la suite...

Néanmoins, EPX n'est pas ma seule famille scientifique et les trois années passées chez Mecalog (devenu Altair Development) à l'issue de ma thèse sont également tout à fait décisives. En particulier, ma route a croisé celle de Gérard Winkelmueller, qui complète à merveille le panel d'experts en dynamique rapide déjà présents sur mon chemin. Y a-t-il quelque chose que Gérard n'a pas compris dans ce domaine ? La question reste ouverte. Je lui suis de plus très reconnaissant d'avoir participé à mon recrutement comme ingénieur de développement... et de m'avoir confié pendant tout le temps de ma présence, des travaux de recherche sur les méthodes et les algorithmes. Au final, cette expérience industrielle a totalement nourri mon cursus de chercheur, alimentée en plus par la passion des ingénieurs locaux, comme Eric Lequinou ou Olivier Wienholtz, mes maîtres avérés pour le calcul parallèle, ou des proches collaborateurs, comme Yannick Chauveau dans le domaine des analyses multiphysiques.

J'en arrive logiquement à mon environnement actuel au CEA, de retour dans le giron d'EPX (merci notamment à Haridh, Laurent Borsoi et Christophe Dellis pour cette opportunité). Le consortium EPX est un environnement dynamique et stimulant : merci donc à Serguei, Frédéric Daude, Fabien Crouzet et les autres d'EDF, à Roland Ortiz, Bertrand Langrand, Eric Deletombe (et les autres...) de l'ONERA, à Folco, Martin Larcher (et les autres...) du Centre Commun de Recherche d'Ispra. La nature collaborative et multidisciplinaire de nos travaux est une force qui tient à vous tous. Et, *last but not least*, je remercie profondément l'équipe de développement EPX du Laboratoire d'Etudes de Dynamique : Haridh, Pascal Galon, Fabienne Bliard, Daniel Guilbaud et Olivier Jamond. Déjà, vous me supportez au quotidien. Et ensuite, votre niveau de compétence et votre implication font de la gestion du développement du code une tâche gratifiante et enrichissante. Il me reste à remercier, au risque assumé de passer pour un flatteur carriériste, mon chef Thomas Laporte, digne représentant pour moi d'une longue lignée de chefs d'envergure de notre laboratoire et à qui je dois une grande partie de mon confort de travail, installé entre recherche stratégique et satisfaction des besoins industriels du CEA et de son environnement.

Bien sûr, dans tout ça, je n'oublie à aucun moment ma famille, ma fille Marine et mon épouse Véronique. Elles sont la priorité, un point, c'est tout. Le reste est de l'occupation intelligente de mon temps, et tout ce qui est écrit au-dessus montre à quel point j'ai de la chance dans ce domaine...

SOMMAIRE

| | |
|--|------------|
| SOMMAIRE | 2 |
| CURRICULUM VITAE ETENDU | 10 |
| A. RESUME DES ACTIVITES DOCTORALES | 14 |
| 1. Problématique et enjeux | 14 |
| 2. Solutions algorithmiques proposées | 16 |
| 3. Illustration | 20 |
| 4. Principaux acquis | 22 |
| 5. Bibliographie réduite et publications spécifiques (surlignées) | 23 |
| B. ACTIVITES SCIENTIFIQUES POST-DOCTORALES | 24 |
| 1. PREAMBULE : DYNAMIQUE RAPIDE EN INTERACTION FLUIDE-STRUCTURE | 24 |
| 1.1 Systèmes physiques considérés et équations locales | 24 |
| 1.2 Discrétisation en espace et en temps | 27 |
| 1.2.1 Discrétisation en temps pour les entités lagrangiennes | 27 |
| 1.2.2 Discrétisation en temps pour les entités eulériennes ou ALE | 28 |
| 1.2.3 Remarque sur la sévérité de la condition de stabilité des schémas explicites | 28 |
| 1.2.4 Discrétisation en espace et système matriciel à considérer à chaque pas de temps | 28 |
| 1.2.5 Evaluation des forces de réactions aux contraintes cinématiques | 29 |
| 1.3 Enjeux et thèmes de recherche | 33 |
| 1.4 Références | 35 |
| 2. DEFINITION ET IMPLEMENTATION DE METHODES, DE MODELISATIONS ET DE COUPLAGES | 37 |
| 2.1 Représentation robuste de l'endommagement et de la fissuration des systèmes mécaniques sous chargement extrême | 37 |
| 2.1.1 Approche particulière pour les coques métalliques avec transition endommagement-déchirure | 37 |
| 2.1.2 Extension de l'approche XFEM en dynamique rapide pour la propagation tridimensionnelle de fissures | 50 |
| 2.1.3 Eléments discrets pour la ruine des structures en béton armé sous impact | 65 |
| 2.1.4 Bibliographie et publications spécifiques (surlignées) | 68 |
| 2.2 Ecoulements et systèmes complexes en interaction fluide-structure | 72 |
| 2.2.1 Fuites de réservoir sous impact | 72 |
| 2.2.2 Approche anti-diffusive pour les écoulements à interfaces | 83 |
| 2.2.3 Simulation des conséquences mécaniques de l'APRP à l'échelle réacteur | 97 |
| 2.2.4 Bibliographie et publications spécifiques (surlignées) | 111 |
| 3. PASSAGE A L'ECHELLE DES METHODES DE RESOLUTION EN DYNAMIQUE RAPIDE EN PRESENCE DE CONTRAINTES CINEMATiques COMPLEXES | 114 |
| 3.1 Parallélisme à mémoire distribuée extensible et dynamique | 115 |
| 3.1.1 Motivations, stratégie globale et objectifs pour le parallélisme à mémoire distribuée | 115 |
| 3.1.2 Solveur à mémoire distribuée pour la dynamique rapide des fluides et des structures | 115 |

| | | |
|------------|--|------------|
| 3.1.3 | Projet ANR RePDyn : présentation et première phase d'identification des verrous parallèles | 120 |
| 3.1.4 | Projet ANR RePDyn : décomposition de domaine dynamique et solveur extensible pour les contraintes cinématiques inter-domaines | 132 |
| 3.1.5 | Bibliographie et publications spécifiques (surlignées) | 147 |
| 3.2 | Parallélisme hybride dynamique et collaboratif | 149 |
| 3.2.1 | Parallélisme à mémoire partagée avec ordonnancement dynamique pour les transitoires rapides en interaction fluide-structure | 149 |
| 3.2.2 | Formalisme hybride à grande échelle sur le supercalculateur TGCC/Curie | 150 |
| 3.2.3 | Illustration sur les transitoires accidentels de référence pour les réacteurs nucléaires actuels et futurs | 154 |
| 3.2.4 | Bibliographie et publications spécifiques (surlignées) | 160 |
| C. | PROJET SCIENTIFIQUE | 161 |
| 1. | Directions de recherche pour la modélisation et les algorithmes pour les systèmes couplés | 161 |
| | Interaction fluide-structure avec précision accrue pour les structures immergées | 161 |
| | Mise en œuvre générique, robuste et parallèle de techniques de raffinement adaptatif de maillage | 162 |
| | Extension des modélisations multi-fluides multi-phasiques en environnement industriel | 164 |
| 2. | Directions de recherche pour le calcul à haute performance en dynamique rapide | 165 |
| | Parallélisme hybride à grande échelle | 165 |
| | Veille sur les nouvelles architectures, les nouveaux modèles de programmation, leurs avantages et leurs conséquences sur les algorithmes | 165 |
| | Maîtrise de la précision des simulations parallèles | 165 |
| 3. | Références | 169 |

LISTE DES FIGURES

| | |
|---|----|
| Figure 1 : maillages incompatibles pour le découplage espace/temps | 14 |
| Figure 2 : <i>Floating Frame of Reference</i> | 17 |
| Figure 3 : Modèle de calcul avec décomposition de domaine et réduction modale selon les deux approches proposées | 20 |
| Figure 4 : Vue en coupe du propulseur et localisation des points de mesure (en particulier l'élément E_1) | 21 |
| Figure 5 : Déplacement à l'extrémité de l'aile et contraintes dans le propulseur pendant 100 ms | 21 |
| Figure 6 : Simulation du premier mode d'ébranlement de l'aile | 22 |
| Figure 7 : Contraintes cinématiques permanentes | 30 |
| Figure 8 : Exemples de contraintes cinématiques non-permanentes | 30 |
| Figure 9 : Crash d'un avion et incendie | 37 |
| Figure 10 : Arrangement classique des particules SPHC et des <i>stress points</i> | 38 |
| Figure 11 : Fonction <i>spline B3</i> à support compact de rayon 2h | 39 |
| Figure 12 : Définition des repères locaux | 40 |
| Figure 13 : Particule SPHC | 42 |
| Figure 14 : Représentation d'une fissure par l'approche SPHC | 45 |
| Figure 15 : Insertion de discontinuités fortes dans un modèle SPHC | 46 |
| Figure 16 : Suppression par méthode de visibilité : cas pathologiques aux conséquences limitées pour l'approche SPHC | 46 |
| Figure 17 : Traction d'une plaque rectangulaire fissurée [Zi et al., 2007] | 47 |
| Figure 18 : Trajet de fissuration expérimental [Ramulu et Kobayashi, 1985] | 47 |
| Figure 19 : Trajet de fissuration simulé avec une approche spécifique par <i>phantom nodes</i> [Song et al., 2006] | 47 |
| Figure 20 : Endommagement et fissuration avec l'approche SPHC (visualisation sur un maillage de Delaunay) | 47 |
| Figure 21 : Perforation d'une plaque à haute vitesse [Rusinek et al., 2009] | 48 |
| Figure 22 : Vue de la cible après pétalisation | 48 |
| Figure 23 : Simulation éléments finis avec érosion sur critère en déformation plastique pour des vitesses d'impact de 50 m.s^{-1} (à gauche) et 75 m.s^{-1} (à droite) [Rusinek et al., 2009] | 48 |
| Figure 24 : Simulation de la pétalisation avec l'approche SPHC pour des vitesses d'impact de 50 m.s^{-1} (à gauche) et 75 m.s^{-1} (à droite) | 48 |
| Figure 25 : Fragmentation d'un cylindre [Goto et al., 2008] | 49 |
| Figure 26 : Modèle numérique : éléments finis pour l'explosif, SPHC pour le cylindre | 49 |
| Figure 27 : Vitesse d'expansion radiale et pression dans l'explosif | 49 |
| Figure 28 : Distribution des fragments par masse | 49 |
| Figure 29 : Déformée du cylindre après $30 \mu\text{s}$ (à gauche) et $100 \mu\text{s}$ (à droite) | 49 |
| Figure 30 : Actualisation géométrique des fonctions de niveau | 52 |
| Figure 31 : Pas de temps critique pour un élément monodimensionnel XFEM en fonction de la position de la discontinuité (extraite de [Menouillard, 2007]) | 53 |
| Figure 32 : Projection des nœuds de la grille auxiliaire pour les fonctions de niveau sur le front de fissure pour le discrétiser | 54 |
| Figure 33 : Vitesse de propagation sur les nœuds du front de fissure | 54 |
| Figure 34 : Illustration des difficultés de convergence associées à la mise en œuvre de la méthode des équations d'Hamilton-Jacobi | 55 |
| Figure 35 : Points de référence sur le front de fissure | 56 |
| Figure 36 : Découpage du plan normal au front de fissure en 4 zones | 56 |
| Figure 37 : Mise à jour des fonctions de niveau pour des propagations de fronts complexes | 57 |
| Figure 38 : Transition entre angle de traction et angle de cisaillement | 59 |
| Figure 39 : Validation expérimentale du critère de rupture | 59 |
| Figure 40 : Formes envisagées pour le voisinage du front de fissure en 3D | 60 |
| Figure 41 : Test utilisé pour les analyses comparatives sur la forme et la taille du voisinage pour l'estimation des tenseurs sur le front de fissure | 60 |
| Figure 42 : Essai de Kalthoff ($H=L=100 \text{ mm}$, $h_f=25 \text{ mm}$, $a_0=50 \text{ mm}$) | 61 |
| Figure 43 : Essai de Kalthoff : évolution de la longueur de la fissure en 2D et 3D | 61 |
| Figure 44 : Propagation de la fissure dans la simulation de l'expérience de Kalthoff | 62 |
| Figure 45 : Epruvette avec pré-entaille inclinée ($L=140 \text{ mm}$, $H=70 \text{ mm}$, $R=30 \text{ mm}$, $a_0=15 \text{ mm}$, $V_0=12.4 \text{ m.s}^{-1}$) | 62 |
| Figure 46 : Chargement imposé par un système de barres de Hopkinson | 62 |
| Figure 47 : Comparaison des avancées de fissure pour l'expérience et la simulation | 63 |

| | |
|---|----|
| Figure 48 : Propagation de la fissure dans la simulation de l'essai avec pré-entaille inclinée | 63 |
| Figure 49 : Trajet de fissuration expérimental pour une pré-entaille inclinée | 64 |
| Figure 50 : Simulations de référence pour la modélisation du béton en dynamique rapide par éléments discrets | 65 |
| Figure 51 : Configuration de l'essai d'arrachement | 66 |
| Figure 52 : Formulation de la liaison entre acier et béton | 66 |
| Figure 53 : Relation non-linéaire entre force et glissement relatif dans la direction tangente | 66 |
| Figure 54 : Relation non-linéaire entre force et déplacement dans la direction normale | 66 |
| Figure 55 : Poutre et ferrailage | 67 |
| Figure 56 : Tour de chute du CEA/Saclay | 67 |
| Figure 57 : Endommagement dans la poutre après 20 ms | 67 |
| Figure 58 : Endommagement dans la liaison entre armatures et béton après 20 ms | 67 |
| Figure 59 : Déformée et fissuration de la poutre après l'essai | 68 |
| Figure 60 : Flèche au droit de l'impacteur au cours du temps | 68 |
| Figure 61 : Contact par la méthode des <i>pinballs</i> | 73 |
| Figure 62 : Détection du contact par la méthode des <i>pinballs</i> | 73 |
| Figure 63 : Mauvaise approximation de la topologie réelle de la coque par des sphères | 74 |
| Figure 64 : <i>Pinballs</i> cylindriques | 74 |
| Figure 65 : Paramètres du contact SPH-SPHC | 74 |
| Figure 66 : Banc pour impact balistique | 75 |
| Figure 67 : Etat final du réservoir pour une vitesse d'impact de 730 m.s^{-1} | 75 |
| Figure 68 : Simulation sans fluide interne | 75 |
| Figure 69 : Simulation avec fluide interne | 75 |
| Figure 70 : Dispositif expérimental pour les essais d'impact sur réservoir ONERA | 76 |
| Figure 71 : Visualisation du jet dans le bac de récupération | 77 |
| Figure 72 : Modèle de calcul pour la simulation des essais | 77 |
| Figure 73 : Fuite avec trou circulaire – Mesures de pression | 78 |
| Figure 74 : Fuite avec trou circulaire – Déplacement du piston | 78 |
| Figure 75 : Fuite avec trou circulaire – Vitesse de sortie des particules SPH | 78 |
| Figure 76 : Fuite avec trou circulaire – Déformation du système et forme du jet après 3 ms | 79 |
| Figure 77 : Fuite avec préfissure en U – Mesures de pression | 80 |
| Figure 78 : Fuite avec préfissure en U – Déformation de la languette | 79 |
| Figure 79 : Fuite avec préfissure en U – Système complet et visualisation du jet | 80 |
| Figure 80 : Représentation de la plaque inférieure avec couplage éléments finis – particules SPHC | 81 |
| Figure 81 : Fuite avec préfissure en X – Comparaison des profils de fissuration | 81 |
| Figure 82 : Fuite avec préfissure en X – Système complet et visualisation du jet | 81 |
| Figure 83 : Exemple illustratif du problème de diffusion numérique | 84 |
| Figure 84 : Problème d'advection d'une fonction de Heavyside dans un champ de vitesse uniforme | 85 |
| Figure 85 : Cellule typique d'un maillage non-structuré | 87 |
| Figure 86 : Densité le long du tube après 4.74×10^{-7} s avec le schéma VOFIRE original | 89 |
| Figure 87 : Artefacts sur la frontière avec le schéma VOFIRE original | 89 |
| Figure 88 : Pulsation d'une bulle de gaz incondensable dans un liquide | 90 |
| Figure 89 : Pulsation de la bulle au cours du temps avec le schéma VOFIRE | 91 |
| Figure 90 : Pulsation de la bulle au cours du temps avec une représentation ALE assurant la stricte non-miscibilité entre les fluides | 91 |
| Figure 91 : Evolution du rayon de la bulle au cours du temps dans les deux cas de simulation | 92 |
| Figure 92 : Balancement dans un réservoir | 92 |
| Figure 93 : Balancement dans un réservoir – Visualisation de la surface du liquide au cours du temps | 92 |
| Figure 94 : Caractéristiques des simulations de balancement dans un réservoir | 93 |
| Figure 95 : Balancement dans un réservoir – Comportement de l'interface liquide-gaz dans les 3 cas de calcul | 94 |
| Figure 96 : Essai MARA10 | 95 |
| Figure 97 : Essai MARA10 – Déformation des structures et champ de densité dans le fluide | 96 |
| Figure 98 : Géométrie pour la cuve et ses internes | 97 |
| Figure 99 : Exemple de modèle de calcul représentant un circuit primaire complet | 98 |

| | |
|---|-----|
| Figure 100 : Dispositif de la maquette pour l'analyse de la propagation d'une onde de dépressurisation à travers un diaphragme | 100 |
| Figure 101 : Vue de la maquette au CEA/Saclay | 100 |
| Figure 102 : Disques de rupture (face arrière et cône de rupture) | 100 |
| Figure 103 : Position des capteurs de pression dans l'embout inférieur et dans la conduite principale | 100 |
| Figure 104 : Mesures de pression dans l'expérience comparées à une simulation préliminaire avec EPX | 101 |
| Figure 105 : Modèle de calcul pour <i>Code_Safari</i> | 102 |
| Figure 106 : Comparaison entre <i>Code_Safari</i> et l'expérience pour la propagation d'une onde à travers un diaphragme | 103 |
| Figure 107 : Mesures de pression pour la calibration de la longueur caractéristique du modèle d'impédance | 104 |
| Figure 108 : Réponse du modèle d'impédance pour le signal expérimental après calibration | 104 |
| Figure 109 : Qualification d'EPX par comparaison avec <i>Code_Safari</i> pour la propagation d'onde à travers un diaphragme | 105 |
| Figure 110 : Configuration de calcul pour la calibration d'impédances pour les plaques perforées | 105 |
| Figure 111 : Visualisation des champs de pression de référence (en haut) et avec une relation d'impédance (en bas) entre 69 et 70 bars | 106 |
| Figure 112 : Pression au point S pour la référence et pour différentes valeurs du temps caractéristique (en trait plein, la valeur optimale) | 106 |
| Figure 113 : Visualisation des champs de pression de référence (en haut) et avec une relation d'impédance (en bas) entre 68.5 et 70 bars | 107 |
| Figure 114 : Pression au point S pour la référence et pour différentes valeurs du temps caractéristique (en trait plein, la valeur optimale) | 107 |
| Figure 115 : Visualisation des champs de pression de référence (en haut) et avec une relation d'impédance identique pour chaque plaque (en bas) entre 69.5 et 70 bars | 108 |
| Figure 116 : Pression au point S pour la référence et pour la valeur optimale du temps caractéristique identifiée pour une plaque seule | 108 |
| Figure 117 : Maillage de la cuve (domaine fluide à gauche, structures au centre, position des points d'arrêt de l'enveloppe de cœur à droite) | 109 |
| Figure 118 : Historique de débit et d'effort au niveau des pompes durant le transitoire fictif conduisant au régime nominal stationnaire | 109 |
| Figure 119 : Résultats du calcul du régime nominal | 110 |
| Figure 120 : Champ de pression au cours du transitoire de dépressurisation | 110 |
| Figure 121 : Déformation de l'enveloppe de cœur (déplacement amplifié par 1000) | 111 |
| Figure 122 : Mesure des différentiels de pression maximaux sur le cloisonnement | 111 |
| Figure 123 : Décomposition de domaine par <i>Recursive Orthogonal Bisection</i> | 116 |
| Figure 124 : Frontières entre les sous-domaines | 117 |
| Figure 125 : Nœuds <i>remote</i> pour les contraintes non-permanentes avec sous-domaines | 119 |
| Figure 126 : Groupes de contraintes cinématiques couplées | 120 |
| Figure 127 : Instabilité de Richtmeyer-Meshkov – Evolution du champ de masse volumique dans le fluide au cours du temps et localisation des chocs | 123 |
| Figure 128 : Test EDF 1 - Cartographie du coût numérique | 124 |
| Figure 129 : Test EDF 1 - Evolution de décomposition de domaine avec l'utilisation de la pondération | 125 |
| Figure 130 : Test EDF 1 - Décomposition de domaine avec pondération brute | 125 |
| Figure 131 : Simulation de l'impact balistique sur un réservoir | 126 |
| Figure 132 : Simulation de l'essai Meppen | 128 |
| Figure 133 : Simulation de l'essai Meppen - Courbes d'évolution du coût par tâche et par processus | 129 |
| Figure 134 : Simulation de l'essai Meppen - Evolution du <i>speed-up</i> | 130 |
| Figure 135 : Perte de pales sur un rotor – Etat initial | 130 |
| Figure 136 : Perte de pales - Evolution des sous-domaines en cours de simulation, avec la rotation du rotor par rapport au stator | 131 |
| Figure 137 : Structure typique d'une matrice de contraintes impliquant des degrés de liberté <i>remote</i> | 133 |
| Figure 138 : Structure de l'opérateur \mathbf{H}^{n+1} , en séparant les termes calculables localement des termes de couplage entre les sous-domaines | 134 |
| Figure 139 : Procédure d'actualisation de la décomposition de domaine | 136 |
| Figure 140 : Onde de choc dans un tunnel – Dispositif | 137 |
| Figure 141 : Onde de choc dans un tunnel – Champ de pression pendant la simulation | 138 |
| Figure 142 : Onde de choc dans un tunnel – Efficacité parallèle | 138 |
| Figure 143 : Pertes d'aubes sur un rotor – Dispositif | 139 |

| | |
|--|-----|
| Figure 144 : Rotor/Stator – Evolution du système au cours du temps | 140 |
| Figure 145 : Rotor/stator – Haute précision pour des situations de contact complexes | 141 |
| Figure 146 : Rotor/stator – Performances parallèles | 142 |
| Figure 147 : Rotor/Stator – Evolution d'un sous-domaine donnée avec une décomposition de domaine statique | 142 |
| Figure 148 : Explosion dans une rame de métro – Dispositif | 143 |
| Figure 149 : Explosion dans une rame de métro – Evolution temporelle des structures | 144 |
| Figure 150 : Explosion dans une rame de métro – Evolution temporelle de la pression dans le fluide | 145 |
| Figure 151 : Explosion dans une rame de métro – Section du champ de vitesse fluide soulignant l'interaction fluide-structure et vue rapprochée du contact entre les portes de la voiture et le mur de séparation | 146 |
| Figure 152 : Explosion dans une rame de métro – Performances parallèles | 147 |
| Figure 153 : Validation de l'implémentation de la librairie KAAPI dans EPX sur le cas du crash du missile Meppen | 150 |
| Figure 154 : Performances de l'approche hybride MPI/KAAPI pour le cas de rotor/stator (5 000 cycles en temps) | 151 |
| Figure 155 : Interaction entre une onde de choc et un container métallique – Propagation de l'onde dans le tunnel | 153 |
| Figure 156 : Interaction entre une onde de choc et un container métallique – Déformation du container | 153 |
| Figure 157 : Résultats de la simulation d'APRP | 155 |
| Figure 158 : Géométrie considérée pour le remontage du prototype ASTRID | 156 |
| Figure 159 : ADC dans un remontage du prototype ASTRID – Vue globale de l'accident | 157 |
| Figure 160 : ADC dans un remontage du prototype ASTRID – Ecoulement dans le déversoir | 158 |
| Figure 161 : Champ de pression dans un essai sur l'installation RUT | 159 |
| Figure 162 : Explosion hydrogène dans une enceinte (à gauche, front de flamme, à droite, pression) | 159 |
| Figure 163 : Difficultés de maillage pour des systèmes industriels avec interaction fluide-structure conforme | 161 |
| Figure 164 : Détection des interactions fluide-structure avec maillages déconnectés | 162 |
| Figure 165 : Raffinement local d'un quadrangle | 163 |
| Figure 166 : Principes des critères pour l'AMR | 163 |
| Figure 167 : Projectile balistique dans un réservoir | 164 |
| Figure 168 : Exemple de modèle de calcul intégrant la tuyauterie et le volume de fuite | 164 |
| Figure 169 : Dispersion des modes de flambage pour la compression d'une poutre caisson | 167 |
| Figure 170 : Traction d'un barreau métallique | 168 |
| Figure 171 : Représentation d'un résultat en ajoutant le nombre de chiffres significatifs avec lequel il est connu | 169 |

LISTE DES TABLES

| | |
|---|----|
| Table 1 : Axes de recherche pour le travail doctoral | 16 |
| Table 2 : Solveur spécifique pour le problème condensé avec projection en présence de modes rigides de grande amplitude | 19 |
| Table 3 : Acquis du travail doctoral pour l'organisation d'une activité de recherche dans le domaine de la dynamique rapide | 22 |
| Table 4 : Transitoires brutaux représentatifs des méthodes numériques proposées | 25 |
| Table 5 : Equations locales pour structures et fluides | 26 |
| Table 6 : Résumé des non-linéarités considérées | 27 |
| Table 7 : Stratégie de calcul des forces de réaction aux contraintes cinématiques | 32 |
| Table 8 : Avantages et inconvénients des deux stratégies | 32 |
| Table 9 : Axes de recherche principaux pour la période post-doctorale | 33 |
| Table 10 : Aperçu des actions de recherche pour l'axe 1 | 34 |
| Table 11 : Aperçu des actions de recherche pour l'axe 2 | 34 |
| Table 12 : Mesure des déformations pour la cinématique de coque | 41 |
| Table 13 : Contrainte et équations du mouvement pour la cinématique de coque | 42 |
| Table 14 : Viscosité pour la stabilisation de l'approche SPHC | 44 |
| Table 15 : Simulations de validation de l'approche SPHC pour l'endommagement, la fissuration et la fragmentation de coques | 49 |
| Table 16 : Aspects techniques principaux de l'approche XFEM pour la mécanique de la rupture | 50 |
| Table 17 : Evolution des fonctions de niveau par la résolution d'équations d'Hamilton-Jacobi | 51 |
| Table 18 : Principaux acquis de l'approche existante pour la propagation de fissure bidimensionnelle en dynamique et perspectives d'extension pour le cas tridimensionnel | 54 |
| Table 19 : Procédure d'actualisation des fonctions de niveau générique 2D/3D | 56 |

| | |
|---|-----|
| Table 20 : Evaluation des grandeurs pour la propagation de la fissure | 59 |
| Table 21 : Simulations de validation de l'approche XFEM en dynamique rapide tridimensionnelle | 64 |
| Table 22 : Liaison cinématique entre éléments finis de poutre pour les armatures et éléments discrets pour le béton | 66 |
| Table 23 : Impact sur une poutre en béton armé modélisé par éléments discrets avec armatures en éléments finis | 68 |
| Table 24 : Equations pour un fluide modélisé par des particules lagrangiennes SPH | 72 |
| Table 25 : Procédure de détection du contact pour les particules SPHC | 74 |
| Table 26 : Impact balistique sur un réservoir cylindrique | 75 |
| Table 27 : Validation de l'approche SPH-SPHC sur des simulations complexes d'impact sur réservoir | 82 |
| Table 28 : Classes de méthodes pour le suivi d'interface entre fluides non-miscibles | 84 |
| Table 29 : Problème modèle pour l'analyse de la diffusion numérique | 85 |
| Table 30 : Equations de conservation de la masse (continues et discrètes) et lois d'état pour un écoulement liquide-gaz | 87 |
| Table 31 : Schéma VOFIRE initial pour un écoulement liquide-gaz | 88 |
| Table 32 : Problèmes identifiées avec le schéma VOFIRE original | 89 |
| Table 33 : Calculs de validation de l'approche VOFIRE pour les écoulements liquide-gaz | 96 |
| Table 34 : Thèmes de recherche pour la simulation des conséquences mécaniques de l'APRP | 99 |
| Table 35 : Maquette pour l'analyse de la propagation d'une onde de dépressurisation à travers un diaphragme | 100 |
| Table 36 : Procédure de calibration des relations d'impédance pour des géométries tridimensionnelles quelconques | 108 |
| Table 37 : Simulation des conséquences mécaniques d'un transitoire de dépressurisation dans un REP | 111 |
| Table 38 : Court glossaire des termes courants utilisés pour l'analyse des performances d'un algorithme parallèle | 115 |
| Table 39 : Avantages et inconvénients de la stratégie de gestion centralisée des groupes <i>globaux</i> de liaisons couplées | 120 |
| Table 40 : Objectifs initiaux et étendus du projet RePDyn | 121 |
| Table 41 : Exemple de sortie sur le fichier <i>listing</i> pour l'autodiagnostic d'EPX | 122 |
| Table 42 : Instabilité de Richtmeyer-Meshkov - Extensibilité entre 4 et 80 processus | 124 |
| Table 43 : Couplage SPH et SPHC – Extensibilité entre 4 et 32 processus | 126 |
| Table 44 : Situations de calcul représentatives du comportement satisfaisant du solveur à mémoire distribuée | 126 |
| Table 45 : Simulation de l'essai MARA 10 - Extensibilité entre 4 et 32 processus | 127 |
| Table 46 : Situations de calcul fonctionnelles mais soulevant des limites du solveur à mémoire distribuée | 130 |
| Table 47 : Situation de calcul mettant en échec le solveur à mémoire distribuée | 131 |
| Table 48 : Suivi de la réalisation des objectifs au terme de la première phase du projet | 132 |
| Table 49 : Itération de l'algorithme de Gradient Conjugué Préconditionné | 133 |
| Table 50 : Séparation de l'évaluation du vecteur $\mathbf{H}^{n+1}\mathbf{P}_k$ pour faire apparaître des contributions locales | 134 |
| Table 51 : Cas de démonstration des capacités du solveur à mémoire distribuée optimisé | 147 |
| Table 52 : Avantages et limitations d'une approche SMP classique | 149 |
| Table 53 : Mesures d'extensibilité pour le calcul d'interaction d'une onde de choc avec un container métallique sur le calculateur TGCC/Curie | 154 |
| Table 54 : Synthèse de la mise en œuvre d'un cas industriel représentatif sur le calculateur TGCC/Curie | 154 |
| Table 55 : Transitoires accidentels de référence considérés | 155 |
| Table 56 : Simulation des transitoires de référence et commentaires sur les performances parallèles | 160 |
| Table 57 : Eléments méthodologiques pour l'AMR en dynamique rapide | 163 |
| Table 58 : Quelques éléments techniques pour l'AMR en parallèle à mémoire distribuée | 163 |
| Table 59 : Perspectives de recherche pour les écoulements multi-fluides et multi-phasiques | 164 |
| Table 60 : Différentes influences de l'arithmétique à virgule flottante sur un algorithme de simulation en dynamique rapide | 166 |
| Table 61 : Influence de l'arithmétique à virgule flottante en fonction de la stabilité physique du problème considéré | 168 |

CURRICULUM VITAE ÉTENDU

39 ans, né le 23 avril 1975.

Parcours professionnel

| | |
|-------------|---|
| Depuis 2006 | <p>Ingénieur-chercheur au CEA <i>Affectation : DEN/DANS/DM2S/SEMT/DYN (Laboratoire d'Etudes de Dynamique)</i></p> <p>Responsable du développement du code de simulation en dynamique rapide EUROPLEXUS (http://www-epx.cea.fr) : algorithmes de résolution et calcul haute performance, définition d'orientations stratégiques pour le programme, animation du Comité Technique du consortium supportant le code (impliquant le CEA, la Commission Européenne, EDF et ONERA).</p> <p>Recherche et expertise, dans le domaine des transitoires accidentels pour les réacteurs actuels et futurs (écoulement multi-composants multi-phasiques, structures immergées, suivi d'interfaces liquide-gaz, modèles complexes fortement couplés).</p> <p><i>Mots-clés</i> : interaction fluide-structure, transitoires explosifs, multiplicateurs de Lagrange</p> <p>Depuis 2010 : Responsable de l'Opération de Recherche Mécanique Numérique du Laboratoire de Mécanique pour les Structures Industrielles Durables (LaMSID, UMR EDF-CNRS-CEA 2832)</p> <p><i>Faits marquants</i> :</p> <ul style="list-style-type: none"> ❖ Pilote du projet RePDyn (ANR-COSI-09-011, 2010-2013), pour le passage à l'échelle des méthodes de calcul en dynamique rapide sur les supercalculateurs massivement parallèles (http://www.repdyn.fr) <ul style="list-style-type: none"> ○ Budget : 1.6 M€ - Aide ANR : 643 k€ ○ Partenaires : CEA, EDF, LaMSID, ONERA, LaMCoS INSA Lyon, INRIA ○ Thématiques : simulations industrielles multi-physiques, solutions de référence et couplages de modélisations en environnement parallèle, parallélisme hybride (collaboration INRIA EPI/MOAI), ❖ Calcul de démonstration en interaction fluide-structure avec interfaces (transitoire explosif dans un réacteur de 4^e génération) pour l'inauguration du mur d'image de la Direction de l'Energie Nucléaire (septembre 2011), ❖ Simulation en interaction fluide-structure sur le supercalculateur TGCC/Curie (1024 cœurs mobilisés) dans le cadre d'un PRACE Preparatory Access (Février-Août 2012) ❖ Grand Prix 2013 de la Société Française d'Energie Nucléaire : prix collectif pour l'équipe de développement EPX pour son utilisation en tant qu'outil de haute technologie pour la simulation des transitoires accidentels de référence pour les réacteurs actuels et futurs. |
| 2003-2006 | <p>Ingénieur pour la société MECALOG (Agence de Sophia Antipolis)</p> <p>Développement dans le code de dynamique rapide RADIOSS. Responsabilité de nouvelles fonctionnalités dans deux domaines principaux :</p> <ul style="list-style-type: none"> ❖ Couplage choc-vibrations dans le cadre du franchissement d'obstacle par un véhicule, ❖ Interaction fluide-structure pour le déploiement des airbags. |
| 2000-2003 | <p>Thèse de doctorat au Laboratoire de Mécanique et Technologie de l'ENS Cachan en partenariat avec Snecma Moteurs, EDF et le CEA/Saclay</p> <p>Simulation en dynamique rapide. Couplage multi-domaines de méthodes modales et directes pour l'analyse de l'ébranlement de structures complexes impactées localement.</p> |

| | |
|-----------|---|
| 1999-2000 | Service National en tant que Scientifique du Contingent au CEA/CESTA |
| 1999 | Stage de DEA à la Direction des Etudes et Recherches (DER) d'EDF |

Formation

| | |
|------|--|
| 2003 | Doctorat de l'Ecole Normale Supérieure de Cachan mention Très Honorable avec les félicitations du jury |
| 1999 | Diplôme de l'Ecole Nationale des Ponts et Chaussées DEA Dynamique des Structures et Couplages mention Très Bien (major) |

Encadrement & co-encadrement

| Thèses | |
|-----------|---|
| 2008-2011 | Fabien Caleyron Directeur : A. Combescure (Laboratoire de Mécanique des Contacts et des Structures, INSA Lyon) Simulation numérique par la méthode SPH de fuites de fluide consécutives à la déchirure d'un réservoir sous impact. Soutenue en novembre 2011. |
| 2010-2013 | Romains Pelée de Saint Maurice (co-encadrement) Directeur : A. Combescure (Laboratoire de Mécanique des Contacts et des Structures, INSA Lyon) Extension de l'approche X-FEM en dynamique rapide pour la propagation tridimensionnelle de fissure dans des matériaux ductiles. Soutenue en février 2014. |
| 2011-2014 | Aurélien Masurel (co-encadrement) Directeur : L. Daudeville (Laboratoire Sols, Solides, Structures, Risques, UJF Grenoble) Calcul de structures industrielles en béton armé jusqu'à la ruine par une méthode d'éléments discrets avec une attention particulière pour la liaison entre le béton et les aciers de ferrailage. |
| 2013-2016 | Marwa Sridi Directeur : B. Raffin (Laboratoire d'Informatique de Grenoble, INRIA) Auto-paramétrage et parallélisme collaboratif pour la dynamique rapide des fluides et des structures en interaction. |
| Stages | |
| 2011 | Damien Leone Stage de Master 2 Recherche co-encadré avec B. Raffin (Laboratoire d'Informatique de Grenoble, INRIA) Parallélisme et équilibrage dynamique dans un contexte de couplage d'algorithmes en dynamique rapide des fluides et des structures |

Responsabilités & contrats

| | |
|---|---|
| Consortium EPX | Accord de copropriété et de collaboration méthodologique entre le CEA et le <i>Joint Research Center</i> de la Commission Européenne pour la dynamique rapide avec EPX. Accords de partenariat majeur avec EDF et ONERA pour le support d'actions de R&D avec EPX. Responsabilité de l'animation du Comité Technique du Consortium. |
| Projet <i>Dynamique Rapide</i> de l'Institut Tripartite (I3P) | Actions de recherche, prospectives et appliquées, pour la simulation des transitoires accidentels pour les réacteurs entre le CEA et EDF (information vers AREVA). Correspondant Opérationnel du projet pour le CEA (pilotage par EDF). |

| | |
|---------------|--|
| Logiciel EPX | Suivi du développement : plan de développement collaboratif, contrôle de la qualité, soutien méthodologique aux partenaires majeurs... Responsabilité de la distribution des versions de Production à destination des industriels et gestion des relations avec les établissements académiques, en particulier via la diffusion d'une version Education Recherche gratuite pour les laboratoires. |
| Action au CEA | Pilotage de l'équipe de développement EPX du laboratoire d'Etudes de Dynamique au CEA, pour répondre aux demandes d'études avancées et d'expertises relevant de sa compétence. |

Publications

| <i>Articles dans revues internationales avec comité de lecture</i> | |
|--|---|
| | Hybrid parallel strategy for the simulation of fast transient accidental situations at reactor scale, V. Faucher , P. Galon, A. Beccantini, F. Crouzet, F. Debaud, T. Gautier, Annals of Nuclear Energy, numéro special après SNA+MC 2013, accepté en mars 2014. |
| | Mechanical consequences of LOCA in PWR – Full scale coupled 1D/3D simulations with fluid-structure interaction, V. Faucher , F. Crouzet, F. Debaud, Nuclear Engineering and Design, volume 270, avril 2014, pages 359-378. |
| | Advanced parallel strategy for strongly coupled fast transient fluid-structure dynamics with dual management of kinematic constraints, V. Faucher , Advances in Engineering Software, volume 67, janvier 2014, pages 70-89. |
| | SPH modeling of fluid-solid interaction for dynamic failure analysis of fluid-filled thin shells, F. Caleyron, A. Combescure, V. Faucher , S. Potapov, Journal of Fluids and Structures, volume 39, mai 2013, pages 102-125. |
| | Extended Vofire Algorithm for Fast Transient Fluid-Structure Dynamics with Liquid-Gas Flows and Interfaces, V. Faucher , S. Kokh, Journal of Fluids and Structures, volume 30, mai 2013, pages 126-153. |
| | Mechanical consequences of LOCA in PWR - Numerical and experimental analysis of transient wave propagation through perforated plates, V. Faucher , F. Crouzet, P. Piteau, P. Galon, P. Izquierdo, Nuclear Engineering and Design, volume 253, décembre 2012, pages 1-11. |
| | Advanced simulation of damage of reinforced concrete structures under impact, L. Daudeville, V. Faucher , S. Potapov, European Journal of Environmental and Civil Engineering, volume 16(9), octobre 2012, pages 1090-1101. |
| | Dynamic Simulation of Damage-Fracture Transition in SPH Shells, F. Caleyron, A. Combescure, V. Faucher , S. Potapov, Int. J. for Num. Meth. In Engrg, volume 90(6), mai 2012, pages 707-738. |
| | Méthodologie de simulation d'impact sur un bâtiment industriel en béton armé, S. Moulin, P. Koechlin, S. Potapov, V. Faucher , Revue Européenne des Eléments Finis, volume 13(5-6-7), 2004, pages 605-616. |
| | Local modal reduction in explicit dynamics with domain decomposition. Part 2 : Specific interface treatment when modal subdomains are involved, V. Faucher , A. Combescure, Int. J. for Num. Meth. in Engrg., volume 61, 2004, pages 69-95. |
| | Local modal reduction in explicit dynamics with domain decomposition. Part 1 : Extension to subdomains undergoing finite rigid rotations, V. Faucher , A. Combescure, Int. J. for Num. Meth. in Engrg., volume 60, 2004, pages 2531-2560. |
| | A time and space mortar method for coupling linear modal subdomains and non-linear subdomains in explicit structural dynamics, V. Faucher , A. Combescure, Comput. Methods Appl. Mech. Engrg., volume 192(5-6), 2003, pages 509-533. |
| <i>Conférences internationales avec comité de lecture</i> | |
| | X-KAAPI: a Multi Paradigm Runtime for Multicore Architectures, T. Gautier, F. Lementec, V. Faucher , B. Raffin, Sixth International Workshop on Parallel Programming Models and Systems Software for High-End Computing (P2S2) (2013), Lyon, 1 ^{er} octobre. |
| | Contribution of ANR RePDyn project to the parallel simulation of fast transient accidental phenomena at nuclear reactor scale, V. Faucher , Complex Systems Design & Management Conference (2012) Paris, France, December 12-14 |
| | LOCA Simulation: Analysis of Rarefaction Waves Propagating through Geometric Singularities, F. Crouzet, V. Faucher , P. Piteau, P. Galon, P. Izquierdo, ASME PVP 2011 (2011), Baltimore (USA), July 17 – 21. |

Conférences nationales et internationales avec acceptation sur résumé

Hybrid parallel strategy for the simulation of fast transient accidental situations at reactor scale, **V. Faucher**, P. Galon, A. Beccantini, F. Cruzet, F. Debaud, T. Gautier, Supercomputing for Nuclear Applications + Monte Carlo 2013 (2013), Paris, 27-31 octobre.

Dynamic simulation of crack propagation in 3D by X-FEM method. R. Pelée de Saint Maurice, T. Elguedj, A. Combescure, B. Prabel, **V. Faucher**, XFEM 2013, Lyon (France) (2013), 11-13 septembre.

Simulation de l'Accident de Dimensionnement du Confinement dans un réacteur de IVe génération avec une approche parallèle hybride, **V. Faucher**, T. Gautier, 6ème biennale des mathématiques appliquées et industrielles, SMAI (2013), Seignosse, 27-31 mai.

Simulation de l'Accident de Dimensionnement du Confinement dans un réacteur de IVe génération avec une approche parallèle hybride dans EUROPLEXUS, **V. Faucher**, T. Gautier, 11ème Colloque National sur le Calcul des Structures, Giens (France) (2013), 13-17 mai.

Propagation de fissures 3 dimensions et en dynamique rapide, R. Pelée de Saint Maurice, **V. Faucher**, T. Elguedj, A. Combescure, B. Prabel, 11ème Colloque National sur le Calcul des Structures, Giens (France) (2013), 13-17 mai.

Advanced Parallel Computing for Explosive Fluid-Structure Interaction, **V. Faucher**, COMPDYN 2011 (2011), Corfu (Greece), May, 26 – 28.

Calcul parallèle pour l'interaction fluide-structure en situation explosive, **V. Faucher**, 10ème Colloque National en Calcul des Structures, Giens (France) (2011) May, 9 – 13.

Endommagement et ruine des structures renforcées sous impact, S. Potapov, **V. Faucher**, 10ème Colloque National en Calcul des Structures, Giens (France) (2011) May, 9 – 13.

Une méthode sans maillage pour la modélisation des interactions fluide-structure : application à la rupture d'un réservoir sous impact, F. Caleyron, A. Combescure, **V. Faucher**, S. Potapov, 10ème Colloque National en Calcul des Structures, Giens (France) (2011) May, 9 – 13.

Explosive fluid structure interaction using multi-component flows with anti-dissipation, **V. Faucher**, S. Kokh, ECCM 2010, Paris (France), (2010) May, 16 – 21.

High-Performance Fluid-Structure Interactions for Impacts with Fast Dynamic EUROPLEXUS Software, F. Caleyron, A. Combescure, **V. Faucher**, S. Potapov, 5th International SPHERIC Workshop, Manchester (UK), (2010) June, 23 – 25.

Fully Coupled Time-Varying Links using Lagrange Multipliers for Fast Transient Dynamics using EUROPLEXUS, **V. Faucher**, H. Bung and F. Casadei, WCCM VIII, Venice (Italy), (2008) June, 30 – July, 4.

Modelling Complex Fluid-Structure Interaction Problems with EUROPLEXUS Fast Dynamic Software, P. Galon, **V. Faucher**, F. Casadei and S. Potapov, WCCM VIII, Venice (Italy), (2008) June, 30 – July, 4.

Simulation de chocs par couplage de méthodes dynamique explicite et de décomposition modale pour des corps en rotation, A. Combescure, A. Gravouil, **V. Faucher**, XIVe Colloque "Vibrations, Chocs et Bruit", ECL Lyon (France), (2004) 16-18 juin.

Subdomains assembly with non matching time space interfaces : an efficient way to solve large structural transient analysis, A. Combescure, A. Gravouil, B. Herry, **V. Faucher**, Second MIT Conference on Computational Fluid and Solid Mechanics, K.J. Bathe- Elsevier, Boston (USA), (2003) June, 17-20, vol. 2 1907-1914.

Méthode de réduction multi échelles en dynamique explicite avec décomposition de domaines, **V. Faucher**, A. Combescure, Actes du 6ème Colloque National en Calcul des Structures, Giens (France), (2003) 20-23 mai, vol. II 381-389.

A new method for the analysis of structures under impact: under-fields with modal reduction and algorithm on several scales of time with EUROPLEXUS, **V. Faucher**, A. Combescure, A. Gravouil, Journées Utilisateurs Samtech, Toulouse (France), (2003) février.

Modal reduction methods in explicit dynamics with domain decomposition, **V. Faucher**, A. Combescure, WCCM V, Vienna, Austria), (2002) July, 7-12.

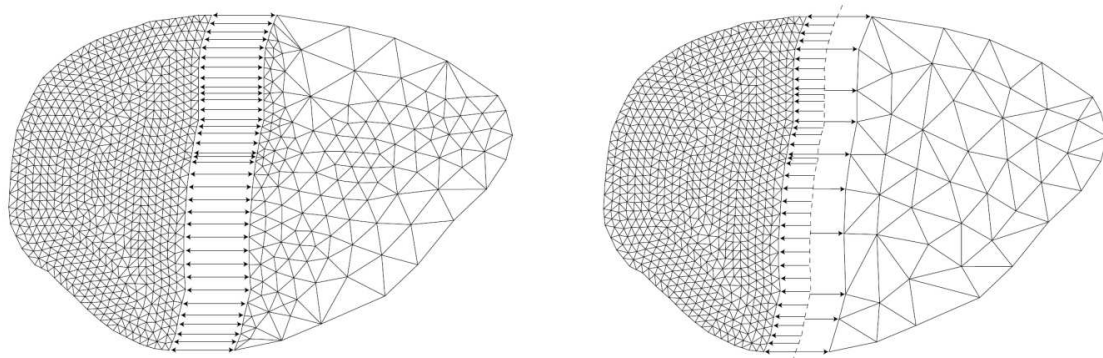
Modal reduction methods in explicit dynamics with domain decomposition, **V. Faucher**, A. Combescure, S. Potapov, Eurodyn 2002, Munich (Germany), (2002) September, 2-5.

A. RESUME DES ACTIVITES DOCTORALES

Ce chapitre introductif est consacré à une brève présentation du travail doctoral, en particulier pour en identifier les principaux acquis et pour en dégager des concepts repris et étendus dans les travaux de recherche suivants. Le travail est supporté industriellement par EDF et SNECMA Moteurs et les développements sont portés dans le code EUROPLEXUS (abrégié EPX dans la suite du document). Dans les références bibliographiques, les contributions spécifiques à ce travail sont distinguées par un surlignement : en jaune, les articles et communications, en vert, la thèse correspondante.

1. Problématique et enjeux

Le travail doctoral s'inscrit dans le cadre des actions de recherche initiées par A. Combescure et A. Gravouil [Gravouil, 2000][Gravouil et Combescure, 2001] sur les approches multi-échelles en temps en dynamique. Dans le cas particulier de la dynamique rapide des structures avec intégration explicite, le système mécanique est divisé en sous-domaines, chacun étant doté de son propre pas de temps. Il s'agit d'une fonctionnalité très avantageuse dans un contexte séquentiel, en raison de la stabilité conditionnelle de l'intégration explicite, faisant dépendre le pas de temps maximal utilisable de la discrétisation et de caractéristiques matérielles locales. Ainsi, la contrainte de stabilité peut être imposée sous-domaine par sous-domaine, évitant de pénaliser l'intégration temporelle sur le modèle entier à partir d'une condition sévère sur quelques éléments. C'est en partie le cas pour les structures complexes soumises à des impacts, pour lesquelles le maillage est localement raffiné pour reproduire avec précision les phénomènes non-linéaires à proximité des zones de chargement. Le découplage complet de la condition de stabilité entre les sous-domaines est obtenu en ajoutant à la méthode à plusieurs pas de temps une gestion des incompatibilités de maillage entre les sous-domaines, inspirée de [Herry et al., 2002], chaque domaine étant alors doté de la discrétisation adaptée aux phénomènes locaux qu'il subit, sans contrainte issue des domaines voisins. Cette situation est illustrée par la Figure 1, extraite de [Faucher, 2003].



(a) Maillages compatibles

(b) Maillages incompatibles

Les flèches indiquent les forces à considérer pour assurer l'équilibre et la continuité des variables cinématiques à l'interface entre les sous-domaines.

La finesse de discrétisation requise est volontairement nettement moins importante sur le sous-domaine de droite. On constate toutefois que pour respecter la taille de maille du sous-domaine de gauche, que l'on peut supposer imposée par la physique considérée, une interface compatible propage une contrainte inutile sur les mailles de l'autre sous-domaine, qui se répercute sur l'intégration en temps via la condition de stabilité. Au contraire, une interface incompatible assure le découplage complet espace/temps recherché.

Figure 1 : maillages incompatibles pour le découplage espace/temps

Il est notable que la question de l'adéquation de l'approche mise en œuvre avec un formalisme parallèle classique, reposant sur la distribution de l'effort de résolution sur les sous-domaines sur les unités de calcul disponibles, n'est pas abordée dans le cadre de la thèse. Au contraire, le travail est concentré sur l'accélération de la résolution séquentielle par l'utilisation sur les sous-domaines en petites déformations de méthodes de réduction, remplaçant classiquement les degrés de libertés éléments finis en nombre excédentaire par des participations modales en nombre bien plus restreint.

Sans entrer dans le détail, les équations (1) à (4) introduisent le système algorithmique à considérer pour mettre en œuvre la stratégie multi-domaines multi-échelles en temps initiale, reposant sur une séparation du problème global en deux classes :

Problèmes libres, indexés 'free' (i.e. équilibre des sous-domaines comme s'ils étaient seuls) :

$$\mathbf{M}_i \ddot{\mathbf{U}}_{\text{free}}(t) = \mathbf{F}_{\text{int}_i}(t) - \mathbf{F}_{\text{ext}_i}(t) = \mathbf{F}_i(t) \text{ pour } i \text{ de } 1 \text{ au nombre de sous-domaines} \quad (1)$$

où \mathbf{M}_i est la matrice de masse (diagonale) du sous-domaine i ,

$\mathbf{F}_{\text{int}_i}$ est le vecteur des forces internes sur le sous-domaine i , supposé connu à l'instant t grâce au schéma d'intégration explicite,

$\mathbf{F}_{\text{ext}_i}$ est le vecteur des forces externes imposées sur le sous-domaine i .

Problème lié, indexé 'link' (i.e. problème donnant les efforts d'interface et les corrections de l'accélération sur les frontières entre les sous-domaines) :

$$\begin{bmatrix} \mathbf{M}_1 & & & {}^t\tilde{\mathbf{C}}_1(t) \\ & \ddots & & \vdots \\ & & \mathbf{M}_n & {}^t\tilde{\mathbf{C}}_n(t) \\ \tilde{\mathbf{C}}_1(t) & \dots & \tilde{\mathbf{C}}_n(t) & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \ddot{\mathbf{U}}_{\text{link}}(t) \\ \vdots \\ \ddot{\mathbf{U}}_{\text{link}}(t) \\ \boldsymbol{\Lambda}(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \tilde{\mathbf{B}}(t, \dot{\mathbf{U}}_{\text{free}}, \dots, \dot{\mathbf{U}}_{\text{free}}) \end{bmatrix} \quad (2)$$

L'équation (2) traduit une prise en compte duale (i.e. via le vecteur $\boldsymbol{\Lambda}$ des inconnues supplémentaires ou multiplicateurs de Lagrange) de l'équation de continuité cinématique entre les sous-domaines, ce qui rapproche les méthodes proposées de la méthode FETI bien connue dans la communauté du calcul en mécanique [Fahrat et Roux, 1994]. La dépendance en temps des matrices $\tilde{\mathbf{C}}_i$ et du second membre $\tilde{\mathbf{B}}$ vient du fait que la condition de continuité porte sur les vitesses (cf. [Gravouil, 2000] pour une discussion sur le choix de la variable cinématique optimale) et que le schéma d'intégration en temps doit être utilisé pour déduire la condition sur les accélérations à injecter dans le système (2) :

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_1 \dot{\mathbf{U}}_1(t) + \dots + \mathbf{C}_n \dot{\mathbf{U}}_n(t) = 0 &\Leftrightarrow \alpha_i(t) \mathbf{C}_i (\ddot{\mathbf{U}}_{\text{free}} + \ddot{\mathbf{U}}_{\text{link}})(t) + \dots + \alpha_n(t) \mathbf{C}_n (\ddot{\mathbf{U}}_{\text{free}} + \ddot{\mathbf{U}}_{\text{link}})(t) = -\mathbf{B}_1(t) - \dots - \mathbf{B}_n(t) \\ &\Leftrightarrow \tilde{\mathbf{C}}_1(t) \ddot{\mathbf{U}}_{\text{link}}(t) + \dots + \tilde{\mathbf{C}}_n(t) \ddot{\mathbf{U}}_{\text{link}}(t) = \tilde{\mathbf{B}}(t, \dot{\mathbf{U}}_{\text{free}}, \dots, \dot{\mathbf{U}}_{\text{free}}) \end{aligned} \quad (3)$$

où le coefficient $\alpha_i(t)$ et le vecteur $\mathbf{B}_i(t)$ sont donnés par le schéma de manière très générale, de telle sorte que : $\dot{\mathbf{U}}_i(t) = \mathbf{B}_i(t) + \alpha_i(t) \ddot{\mathbf{U}}_i(t)$, soit pour le cas particulier du schéma des différences centrées,

$$\dot{\mathbf{U}}_i(t) = \dot{\mathbf{U}}_i(t^-) + \frac{t-t^-}{2} [\ddot{\mathbf{U}}_i(t^-) + \ddot{\mathbf{U}}_i(t)], \quad t^- \text{ étant l'instant précédent dans l'échelle de temps discrète.}$$

Les matrices \mathbf{C}_i sont des matrices *booléennes* dans le cas d'interface compatibles entre les sous-domaines ou des matrices réelles très creuses exprimant les conditions de couplage dans le cas d'interfaces incompatibles entre les sous-domaines.

En présence d'échelles de temps différentes sur les sous-domaines, les problèmes libres sont résolus indépendamment, ce qui est l'origine des gains en performance, la majorité de l'effort de calcul étant concentrée sur la construction du vecteur des forces internes par l'évaluation et l'intégration des contraintes sur les éléments. Au contraire, le problème lié est traité à chaque instant de l'union de toutes les échelles de temps, les quantités libres manquantes étant interpolées entre les instants précédent et suivant de l'échelle locale pour certains sous-domaines.

La résolution du problème lié repose sur une condensation sur les multiplicateurs de Lagrange, faisant classiquement apparaître le complément de Schur :

$$\begin{bmatrix} \mathbf{M}_1 & & & {}^t\tilde{\mathbf{C}}_1 \\ & \ddots & & \vdots \\ & & \mathbf{M}_n & {}^t\tilde{\mathbf{C}}_n \\ \tilde{\mathbf{C}}_1 & \dots & \tilde{\mathbf{C}}_n & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \ddot{\mathbf{U}}_{\text{link}} \\ \vdots \\ \ddot{\mathbf{U}}_{\text{link}} \\ \boldsymbol{\Lambda} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \tilde{\mathbf{B}}(t, \dot{\mathbf{U}}_{\text{free}}, \dots, \dot{\mathbf{U}}_{\text{free}}) \end{bmatrix} \Leftrightarrow \begin{aligned} \ddot{\mathbf{U}}_{\text{link}} &= -\mathbf{M}_1^{-1} {}^t\tilde{\mathbf{C}}_1 \boldsymbol{\Lambda} \\ &\vdots \\ \ddot{\mathbf{U}}_{\text{link}} &= -\mathbf{M}_n^{-1} {}^t\tilde{\mathbf{C}}_n \boldsymbol{\Lambda} \end{aligned} \quad (4)$$

$$\left(\sum_{i=1}^n \tilde{\mathbf{C}}_i \mathbf{M}_i^{-1} {}^t\tilde{\mathbf{C}}_i \right) \boldsymbol{\Lambda} = \mathbf{H} \boldsymbol{\Lambda} = -\tilde{\mathbf{B}}$$

L'effort pour ce problème correspond ainsi à la résolution du système linéaire donnant les multiplicateurs de Lagrange via l'inversion de l'opérateur \mathbf{H} , dont la structure et le remplissage dépendent des couplages entre les équations exprimant la continuité cinématique aux interfaces. A nouveau, pour des maillages compatibles, cet opérateur est diagonal. Il est à noter que l'opérateur est variable dans le temps dans le cas général en dynamique avec intégration temporelle explicite, en raison de la variation du pas de temps sur les sous-domaines avec la déformation des éléments et l'évolution du comportement local.

A partir de cet état de l'art, la mise en œuvre de techniques de projection modale soulève deux axes de recherche suivis pendant le temps de la thèse et présentées sur la Table 1.

| Axe de recherche | Caractéristiques |
|--|---|
| <i>Construction d'un formalisme multi-domaines avec projection modale locale flexible et générique</i> | Il s'agit d'intégrer la projection du champ de déplacement sur une base de modes pour un ou plusieurs sous-domaines sans contraindre le formalisme multi-échelles en temps et sans dépendre de choix particuliers de la base de réduction. |
| <i>Prise en compte des mouvements de grandes amplitudes pour les sous-domaines libres de blocage.</i> | Il s'agit d'un point particulier de la dynamique rapide, où sont fréquemment considérés des impacts à forte énergie susceptibles de mettre en mouvement tout ou partie de la structure considérée. Il est alors nécessaire de considérer, pour des sous-domaines libres de blocages et en vibration locale, des mouvements de corps rigide de grande amplitude, introduisant une non-linéarité complexe dans l'opération de réduction. |

Table 1 : Axes de recherche pour le travail doctoral

On peut souligner que la gestion spécifique des modes de corps rigide sur les sous-domaines rapproche à nouveau les approches considérées de la méthode FETI, avec toutefois des distinctions fortes issues du contexte dynamique en grands déplacements.

2. Solutions algorithmiques proposées

Formalisme multi-domaines avec projection modale en petits déplacements

L'emploi de la projection modale implique que le sous-domaine concerné subit de petites déformations linéaires. L'hypothèse additionnelle de petits déplacements signifie alors que le mouvement de corps rigide éventuel est également de petite amplitude et peut être approché par une combinaison de 3 modes de translation et 3 modes de rotation linéarisée.

Le déplacement sur un sous-domaine en projection s'exprime alors de manière générique sous la forme :

$$\mathbf{U} = \Phi \alpha \quad (5)$$

où Φ est la base de projection dont les colonnes sont les modes,

α est le vecteur des participations modales.

Cette écriture n'introduit aucune contrainte sur le choix des modes. Une base de projection de qualité se présente fréquemment sous la forme d'une association entre des solutions d'un problème aux valeurs propres, dont les conditions aux limites sont données par les interactions avec les sous-domaines environnants, et de solutions statiques, visant justement à augmenter la précision de la projection au niveau de ces interfaces. On peut citer la combinaison la plus connue, dite de Craig & Bampton [Craig et Bampton, 1961], composée de modes de vibrations internes avec encastrement sur les interfaces et de modes statiques obtenus comme les réponses du système à une série de déplacements unitaires imposés sur chaque degré de liberté sur les interfaces, les autres étant bloqués.

Pour un sous-domaine donné, la projection de l'équilibre dynamique en utilisant la décomposition (5) et en conservant la séparation free/link s'écrit :

$$\begin{aligned} {}^t\Phi \mathbf{M}_i \Phi_{free}^t \ddot{\alpha}_{free}(t) &= {}^t\Phi \mathbf{K}_i \Phi \alpha_i(t) - {}^t\Phi \mathbf{F}_{ext_i}(t) & \Leftrightarrow & \hat{\mathbf{M}}_i \ddot{\alpha}_{free}(t) = \hat{\mathbf{K}}_i \alpha_i(t) - {}^t\Phi \mathbf{F}_{ext_i}(t) \\ {}^t\Phi \mathbf{M}_i \Phi_{link}^t \ddot{\alpha}_{link}(t) + {}^t\Phi \tilde{\mathbf{C}}_i \Lambda &= 0 & & \hat{\mathbf{M}}_i \ddot{\alpha}_{link}(t) + \hat{\mathbf{C}}_i \Lambda = 0 \end{aligned} \quad (6)$$

Compte tenu de la linéarité supposée du problème sur le sous-domaine, les forces internes sont exprimées à l'aide de la matrice de rigidité \mathbf{K} . En faisant apparaître les opérateurs projetés, le système portant sur les participations modales conserve une structure identique à celle du problème initial.

Remarques :

1. Dans le cas général intégrant dans la base des modes statiques, la matrice de masse projetée $\hat{\mathbf{M}}_i$ n'est pas diagonale. Pour retrouver un formalisme totalement compatible avec les exigences classiques de l'intégration explicite en temps, les modes sont réorthogonalisés au sens de la masse, via le procédé de Schmidt par exemple. Cette réorthogonalisation reposant uniquement sur des combinaisons des modes de la base, elle ne modifie pas l'espace de projection.

2. Dans la majorité des cas, la projection modale conduit à un filtrage des hautes fréquences sur le sous-domaine concerné (même si les modes statiques éventuels peuvent conserver des composantes fréquentielles plus importantes que les modes de vibration intérieurs). Le pas de stabilité local après projection est donc souvent plus élevé que le pas initial, ce qui donne une importance supplémentaire à la gestion des échelles de temps multiples.

On peut ensuite insérer le problème projeté sur un sous-domaine dans le problème lié, en supposant sans perte de généralité que le sous-domaine en question est le sous-domaine n de la décomposition de domaine :

$$\begin{bmatrix} \mathbf{M}_1 & & & {}^t\hat{\mathbf{C}}_1(t) \\ & \ddots & & \vdots \\ & & \hat{\mathbf{M}}_n & {}^t\hat{\mathbf{C}}_n(t) \\ \hat{\mathbf{C}}_1(t) & \cdots & \hat{\mathbf{C}}_n(t) & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \ddot{\mathbf{U}}_{\text{link}}(t) \\ \vdots \\ \ddot{\mathbf{a}}_{\text{link}}(t) \\ \boldsymbol{\Lambda}(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \tilde{\mathbf{B}}(t, \dot{\mathbf{U}}_{\text{free}}, \dots, \Phi \dot{\boldsymbol{\alpha}}_{\text{free}}) \end{bmatrix} \quad (7)$$

Les équations de continuité cinématique aux interfaces sont toujours écrites dans l'espace de discrétisation éléments finis, avec une recombinaison de la vitesse pour le sous-domaine en projection conduisant à l'apparition de la matrice projetée $\hat{\mathbf{C}}_n$ dans la dernière ligne du système.

On préserve comme souhaité la structure du problème multi-domaines initial et le processus de résolution (condensation de Schur et gestion des échelles de temps multiples) n'est pas altéré. La principale conséquence de la projection modale locale est un remplissage accru de l'opérateur condensé \mathbf{H} , en raison des couplages entre les équations de continuité cinématique qu'introduit la projection modale. Le problème aux interfaces étant de taille réduite par rapport au problème initial, cela ne compense aucunement les gains apportés sur la résolution locale par la réduction modale [Faucher et Combescure, 2003].

Projection modale en présence de modes de corps rigide de grande amplitude

Il s'agit d'une problématique classique en robotique ou en dynamique des systèmes articulés (voir notamment [Cardona et Géradin, 1992]), mais l'intégration temporelle est alors systématiquement implicite. L'originalité du travail mis en œuvre est de produire un formalisme respectant les contraintes d'efficacité d'une intégration explicite.

Les mouvements de corps rigide de grande amplitude étant fortement non-linéaires, la première étape consiste logiquement à séparer le champ de déplacement continu \mathbf{u} en une contribution globale et une contribution locale \mathbf{w}_L exprimée dans un repère en mouvement (*Floating Frame of Reference* [Likins, 1967][Shabana, 1989], cf. Figure 2 pour les notations) :

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_O + (\mathbf{R} - \mathbf{R}_i) \mathbf{x} + \mathbf{R} \mathbf{w}_L \quad (8)$$

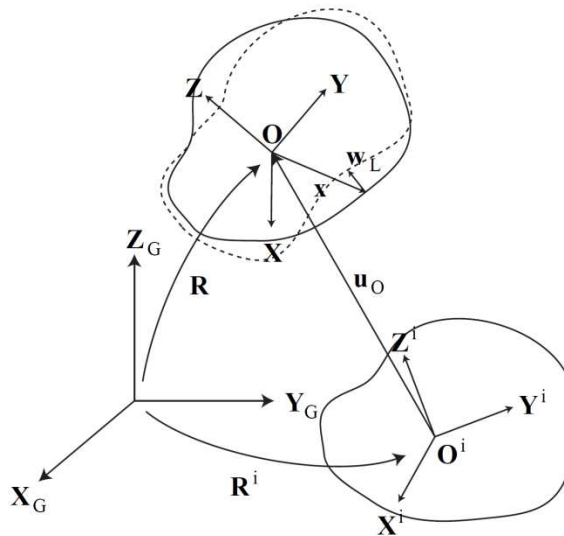


Figure 2 : *Floating Frame of Reference*

La difficulté principale pour une intégration temporelle explicite sur la base de la décomposition (8) est issue de la dérivation temporelle de la matrice de rotation \mathbf{R} , donnée classiquement par [Argyris, 1982] :

$$\dot{\mathbf{R}} = \mathbf{R} \tilde{\boldsymbol{\Omega}} \quad (9)$$

où $\tilde{\mathbf{S}}$ est une matrice anti-symétrique traduisant la rotation autour d'un vecteur \mathbf{S} appelé *vecteur instantanée de rotation*, ou *spin*.

On peut alors écrire la vitesse et l'accélération avec la décomposition (8) :

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{u}} &= \dot{\mathbf{u}}_O + \mathbf{R}\tilde{\mathbf{S}}(\mathbf{x} + \mathbf{w}_L) + \mathbf{R}\dot{\mathbf{w}}_L \\ \ddot{\mathbf{u}} &= \ddot{\mathbf{u}}_O + \mathbf{R}(\tilde{\mathbf{S}}^2 + \dot{\tilde{\mathbf{S}}})(\mathbf{x} + \mathbf{w}_L) + 2\mathbf{R}\tilde{\mathbf{S}}\dot{\mathbf{w}}_L + \mathbf{R}\ddot{\mathbf{w}}_L\end{aligned}\quad (10)$$

Les termes non-linéaires impliquant des vitesses dans l'expression de l'accélération, issus des deux dérivations successives de la matrice de rotation (termes d'entraînement) et du couplage entre la vitesse de rotation et la vitesse de vibration locale (termes de Coriolis) rendent impossible la résolution explicite d'un problème dynamique utilisant ce paramétrage et intégré dans le temps avec le schéma des différences centrées. En effet, ce dernier n'est explicite que pour les variables de type déplacement, alors que les vitesses sont estimées de manière implicite, ce qui confère au schéma ses propriétés de précision et de stabilité (voir la section B-1.2).

Il est donc nécessaire de proposer un paramétrage alternatif du mouvement d'ensemble, obtenu en prenant comme inconnue, en remplacement des termes d'une matrice de rotation, les déplacements de 4 points (O, A, B, C) définissant un repère orthonormé attaché à la structure [Faucher et Combescure (1), 2004].

En écrivant $\mathbf{x} = (x, y, z)$ et en utilisant l'hypothèse des petits déplacements dans le repère local (cf. [Faucher, 2003]), on peut écrire le champ de déplacement et ses dérivées avec le nouveau paramétrage :

$$\begin{aligned}\mathbf{u} &= x\mathbf{u}_A + y\mathbf{u}_B + z\mathbf{u}_C + (1-x-y-z)\mathbf{u}_O + \mathbf{P}\mathbf{w}_L \\ \dot{\mathbf{u}} &= x\dot{\mathbf{u}}_A + y\dot{\mathbf{u}}_B + z\dot{\mathbf{u}}_C + (1-x-y-z)\dot{\mathbf{u}}_O + \mathbf{P}\dot{\mathbf{w}}_L \\ \ddot{\mathbf{u}} &= x\ddot{\mathbf{u}}_A + y\ddot{\mathbf{u}}_B + z\ddot{\mathbf{u}}_C + (1-x-y-z)\ddot{\mathbf{u}}_O + \mathbf{P}\ddot{\mathbf{w}}_L + 2\dot{\mathbf{P}}\dot{\mathbf{w}}_L \\ \mathbf{P} &= [\mathbf{u}_A - \mathbf{u}_O, \mathbf{u}_B - \mathbf{u}_O, \mathbf{u}_C - \mathbf{u}_O]\end{aligned}\quad (11)$$

Ce paramétrage lève la non-linéarité dans l'accélération due aux termes d'entraînement. Toutefois, le déplacement des points (O, A, B, C) doit être contraint pour que le repère reste orthonormé (et ainsi la matrice \mathbf{P} reste une matrice de rotation), ce qui est réalisé en utilisant des liaisons cinématiques assurant la conservation des distances respectives entre les points, dont le traitement explicite relativement complexe via des multiplicateurs de Lagrange spécifiques est donné dans [Robbe et al., 1994] et s'exprime formellement :

$$\begin{aligned}\mathbf{C}_R(\mathbf{t})\ddot{\mathbf{u}}_E(\mathbf{t}) &= \mathbf{S}_R(\mathbf{t}) \\ \mathbf{u}_E &= {}^t[\mathbf{u}_A \quad \mathbf{u}_B \quad \mathbf{u}_C \quad \mathbf{u}_O]\end{aligned}\quad (12)$$

Le traitement du terme de Coriolis reste problématique, mais il n'est significatif que pour des grandes vitesses de rotation, si bien qu'il est négligé dans un premier temps.

En ajoutant la discrétisation par éléments finis du champ de déplacement vibratoire \mathbf{w}_L et sa projection sur une base de réduction construite dans le repère local, on obtient une représentation réduite du champ de déplacement total et un système linéaire discret à résoudre à chaque pas de temps sur une structure ainsi paramétrée de la forme :

$$\begin{bmatrix} \hat{\mathbf{M}}[\mathbf{P}(\mathbf{t})] & {}^t\mathbf{C}_R(\mathbf{t}) \\ \mathbf{C}_R(\mathbf{t}) & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \ddot{\hat{\mathbf{U}}}(\mathbf{t}) \\ \Lambda_R \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{F}}_{\text{ext}}[{}^t, \mathbf{P}(\mathbf{t})] - \hat{\mathbf{F}}_{\text{int}}[\mathbf{P}(\mathbf{t}), \alpha(\mathbf{t})] \\ \mathbf{S}_R^n \end{bmatrix} \Leftrightarrow \bar{\mathbf{M}}_P(\mathbf{t}) \begin{bmatrix} \ddot{\hat{\mathbf{U}}}(\mathbf{t}) \\ \Lambda_R \end{bmatrix} = \bar{\mathbf{F}}_P(\mathbf{t})\quad (13)$$

où $\mathbf{U}(\mathbf{t}) = \Phi_E \mathbf{u}_E(\mathbf{t}) + \{\mathbf{P}(\mathbf{t})\} \Phi \alpha(\mathbf{t}) = \Phi_P(\mathbf{t}) \hat{\mathbf{U}}(\mathbf{t})$ est la projection complète du déplacement, $\{\mathbf{P}(\mathbf{t})\}$ faisant passer les colonnes de Φ du repère locale au repère global,

$\hat{\mathbf{U}} = {}^t[\mathbf{u}_E \quad \alpha]$ est le vecteur de toutes les inconnues cinématiques après projection,

Λ_R est le vecteur des 6 multiplicateurs associés aux liaisons assurant la conservation des distances relatives des points de base du repère local,

$$\hat{\mathbf{M}}[\mathbf{P}(\mathbf{t})] = {}^t\Phi_P \mathbf{M} \Phi_P, \quad \hat{\mathbf{F}}_{\text{ext}}[{}^t, \mathbf{P}(\mathbf{t})] = {}^t\Phi_P \mathbf{F}_{\text{ext}}(\mathbf{t}), \quad \hat{\mathbf{F}}_{\text{int}}[\mathbf{P}(\mathbf{t}), \alpha(\mathbf{t})] = {}^t\Phi_P \begin{bmatrix} 0 \\ \mathbf{K}\{\mathbf{P}(\mathbf{t})\} \Phi \alpha(\mathbf{t}) \end{bmatrix}$$

L'expression des forces externes et internes dépend de la matrice de passage \mathbf{P} connue de manière explicite, ce qui ne présente pas de difficulté pour la résolution. On montre également que la stabilité de l'intégration temporelle du système projeté est donnée par les caractéristiques du système vibratoire local.

Il reste alors un point fondamental à prendre en compte au moment de considérer une telle projection sur un sous-domaine connecté au reste du modèle selon le formalisme présenté au paragraphe précédent, à savoir que la matrice du système $\bar{\mathbf{M}}_p^n$ est variable dans le temps et ne peut pas être rendue diagonale.

On peut alors introduire l'écriture projetée (13) dans le système multi-domaines, en supposant à nouveau sans perte de généralité que le sous-domaine avec réduction a l'indice n dans la décomposition de domaine :

$$\mathbf{M}_1 \ddot{\mathbf{U}}_{1_{\text{free}}}(t) = \mathbf{F}_1(t) ; \bar{\mathbf{M}}_{P_n}(t) \begin{bmatrix} \ddot{\mathbf{U}}_{n_{\text{free}}}(t) \\ \boldsymbol{\Lambda}_{R_{n_{\text{free}}}} \end{bmatrix} = \bar{\mathbf{F}}_{P_n}(t)$$

$$\begin{bmatrix} \mathbf{M}_1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & \bar{\mathbf{M}}_{P_n} & & & \\ \tilde{\mathbf{C}}_1(t) & \dots & \bar{\mathbf{C}}_{P_n}(t) & & 0 & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \ddot{\mathbf{U}}_{1_{\text{link}}}(t) \\ \vdots \\ \ddot{\mathbf{U}}_{n_{\text{link}}}(t) \\ \boldsymbol{\Lambda}_{R_{n_{\text{link}}}} \\ \boldsymbol{\Lambda}(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \tilde{\mathbf{B}}(t, \dot{\mathbf{U}}_{1_{\text{free}}}, \dots, \boldsymbol{\Phi} \dot{\boldsymbol{\alpha}}_{1_{\text{free}}}) \end{bmatrix} ; \bar{\mathbf{C}}_{P_n}(t) = \boldsymbol{\Phi}_{P_n}(t) \tilde{\mathbf{C}}(t)$$
(14)

Comme précédent, on conserve la structure globale du système, ce qui le rend compatible sans restriction avec le formalisme à plusieurs échelles de temps. Pour conserver l'avantage de la réduction du nombre d'inconnues après projection en présence de modes de corps rigide de grande amplitude, un effort significatif porte sur la résolution du problème condensé, intégrant les particularités de la matrice de masse généralisée :

$$\mathbf{H}[t, \mathbf{P}_n(t)] = \sum_{i=1}^{n-1} \tilde{\mathbf{C}}_i \mathbf{M}_i^{-1} t \tilde{\mathbf{C}}_i + \bar{\mathbf{C}}_{P_n} \bar{\mathbf{M}}_{P_n}^{-1} t \bar{\mathbf{C}}_{P_n}$$
(15)

La contribution du sous-domaine avec projection produit un bloc plein dans l'opérateur \mathbf{H} , donc l'évaluation est extrêmement coûteuse en raison de sa dépendance à la matrice de passage \mathbf{P} et au caractère non-diagonal de la matrice de masse généralisée. De fait, un solveur dédié est conçu et mis en œuvre pour le calcul des multiplicateurs assurant la continuité cinématique entre les sous-domaines, dont les caractéristiques sont données par la Table 2 [Faucher et Combescure (2), 2004].

| Caractéristiques du solveur | Propriétés et commentaires |
|--|--|
| <i>Algorithme de Gradient Conjugué</i> | Conforme à la nature symétrique positive du système condensé. Evite l'assemblage de l'opérateur \mathbf{H} , remplacé par des évaluations successives moins coûteuses du produit $\mathbf{H}\boldsymbol{\Lambda}^k$ ($\boldsymbol{\Lambda}^k$ étant itéré en cours de résolution). |
| <i>Préconditionneur spécifique = opérateur \mathbf{H} obtenu sans projection modale</i> | Principe : si l'espace de réduction est correct, les efforts d'interface avec les autres sous-domaines sont voisins avec et sans projection. Convergence d'autant plus rapide que la qualité de la base de réduction augmente. Bons résultats obtenus avec une association de modes de type Craig & Bampton. |

Table 2 : Solveur spécifique pour le problème condensé avec projection en présence de modes rigides de grande amplitude

Remarque :

La question du traitement des termes de Coriolis n'est pas tranchée dans ce travail doctoral. Les négliger pour des situations où la structure est initialement au repos est légitime comme en témoignent les exemples fournis dans [Faucher, 2003] (cf. paragraphe suivant).

Ce n'est pas pertinent pour des structures animées initialement d'un mouvement de rotation à grande vitesse, comme c'est le cas lors d'un impact sur une turbomachine en fonctionnement. Il est proposé dans la thèse d'*expliciter* les forces associées à la discrétisation du terme de couplage entre les vitesses de

vibration et de rotation en prenant les valeurs au demi-pas de temps au lieu de considérer les valeurs implicites données normalement par le schéma d'intégration (voir à nouveau la section B-1.2). Il est remarqué que cela doit avoir une conséquence à quantifier sur la stabilité du schéma.

Cette hypothèse est confirmée plus tard dans [Herran, 2008], qui propose une évaluation rigoureuse du pas de temps critique en présence du traitement explicite des forces de Coriolis dans le cadre des transitoires accidentels pour les turbomachines. Il est alors prouvé que le pas de temps diminue alors avec l'augmentation de la vitesse de rotation d'ensemble et en pratique, pour des vitesses classiques dans le contexte industriel considéré, on aboutit à une pénalisation excessive de la performance de la résolution, si bien que le choix est fait de recourir finalement à une résolution implicite de l'équilibre avec une prise en compte exacte des forces de couplage en vitesse. Ce choix remet logiquement en cause la formulation du système multi-domaines proposé et demanderait des analyses supplémentaires non-réalisées à ce jour.

3. Illustration

L'illustration principale repose sur un impact sur un modèle idéalisé d'un turbopropulseur attaché à une aile d'avion. Le modèle et la décomposition en 6 sous-domaines sont donnés sur la Figure 3. Les deux modes de projection sont mis en œuvre, l'approche classique pour l'aile encastrée à sa base et l'approche avec mouvements d'ensemble d'amplitude finie pour le propulseur (dite *réduction multi-échelles* en espace), en dehors de la zone d'impact (localisée dans le sous-domaine 6). On suppose le propulseur à l'arrêt au moment de l'impact (ce qui nous place hors du contexte complexe des structures en rotation à grande vitesse, cf. paragraphe précédent).

La Figure 5 donne pour 100 ms de simulation le déplacement dans les 3 directions de l'espace à l'extrémité de l'aile, ainsi que les contraintes dans le modèle de propulseur (sur l'élément E_1 identifié sur la Figure 4), en comparant à chaque fois les valeurs obtenues avec la réduction aux valeurs de référence issue de la version standard d'EPX.

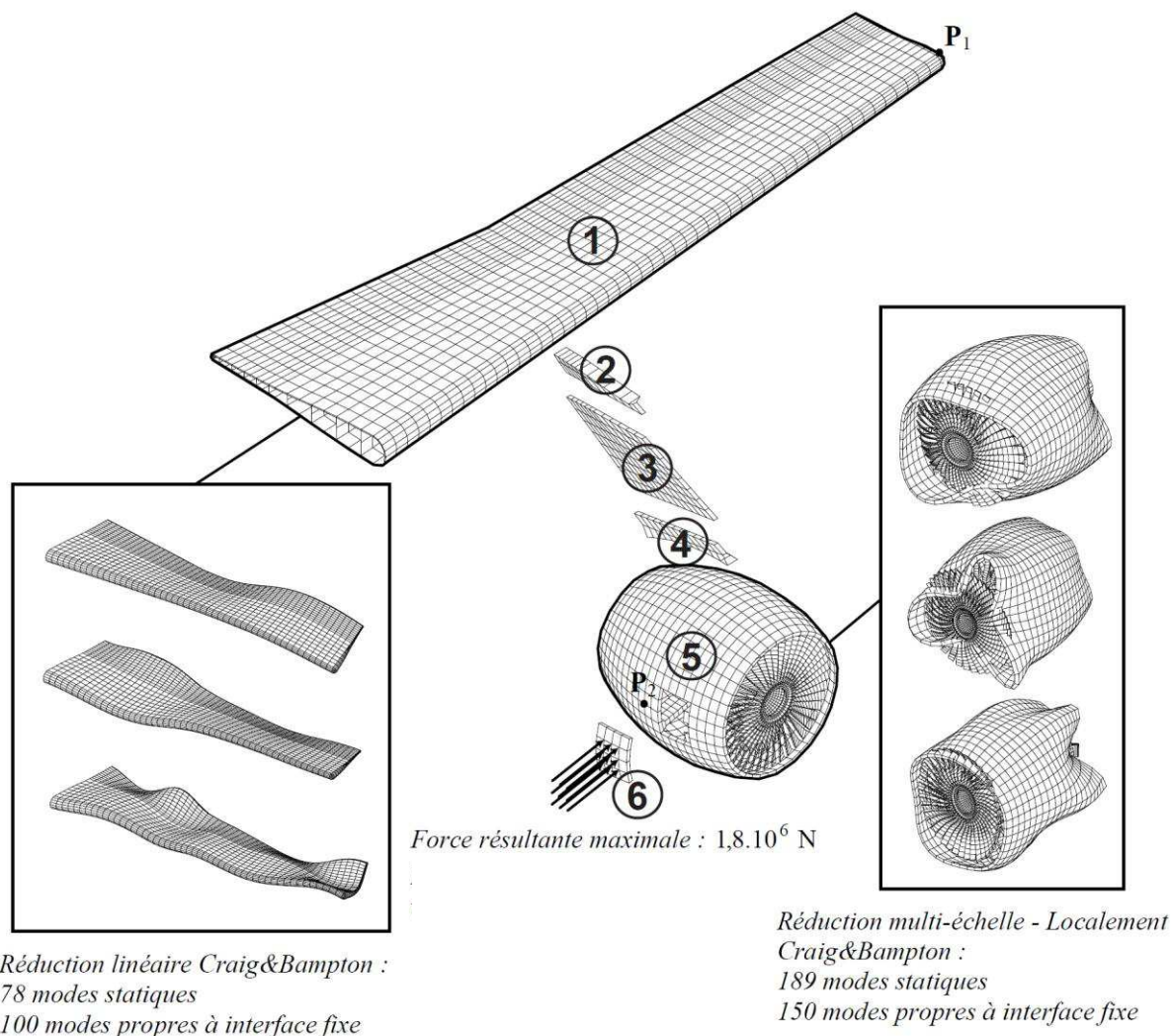


Figure 3 : Modèle de calcul avec décomposition de domaine et réduction modale selon les deux approches proposées

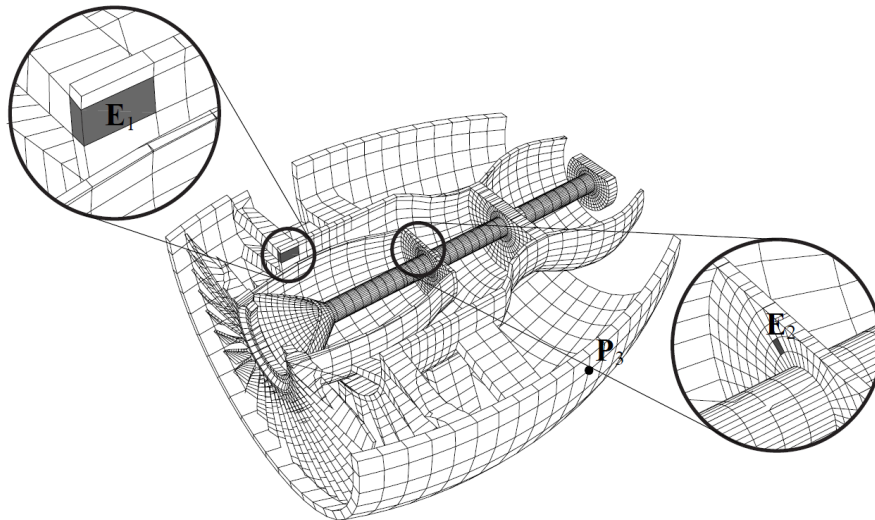
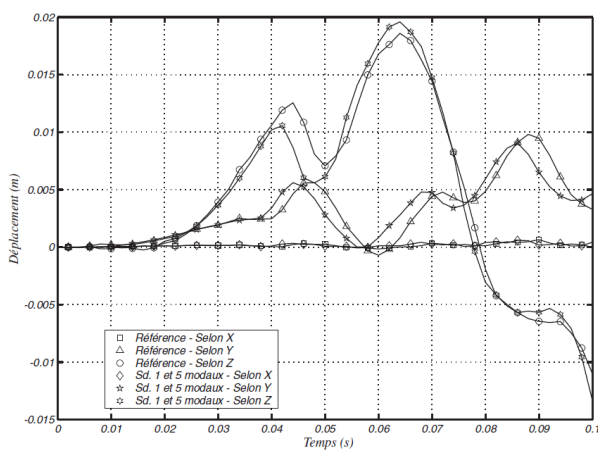
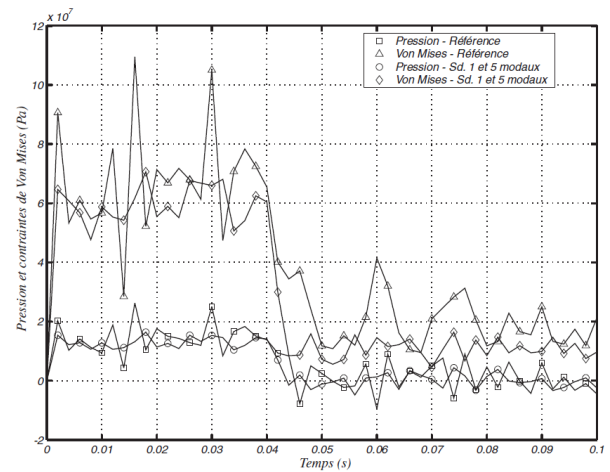
Figure 4 : Vue en coupe du propulseur et localisation des points de mesure (en particulier l'élément E_1)(a) Déplacement à l'extrémité de l'aile (point P_1)(b) Pression et contrainte de Von Mises dans l'élément E_1

Figure 5 : Déplacement à l'extrémité de l'aile et contraintes dans le propulseur pendant 100 ms

L'accord entre la solution de référence et la solution avec projection est tout à fait satisfaisant. La réduction modale permet de diminuer le temps de calcul en séquentiel d'un facteur 7, ce qui répond aux objectifs initiaux du travail mis en œuvre. Cela permet à l'époque de poursuivre la simulation dans un temps raisonnable pour capturer le premier mode de flexion de l'aile (après 1 s de temps physique), comme le montre la Figure 6.

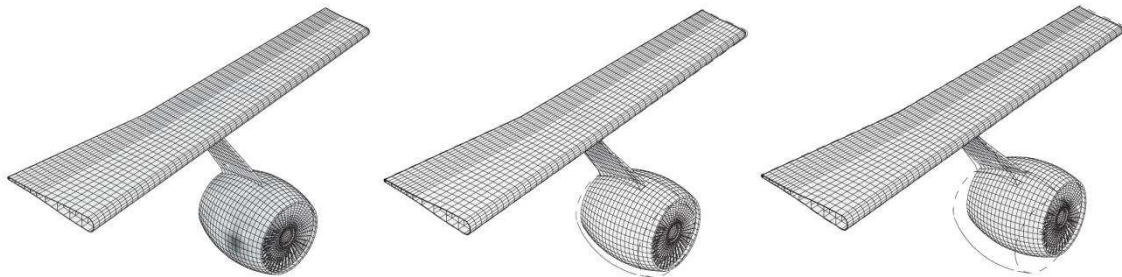




Figure 6 : Simulation du premier mode d'ébranlement de l'aile

4. Principaux acquis

On reporte sur la Table 3 une synthèse rapide des acquis apportés par l'expérience doctorale pour la mise en œuvre d'une activité de recherche pertinente dans le domaine de la dynamique rapide, ce qui fait l'objet de la suite du présent mémoire.

| Domaine technique | Acquis et commentaires |
|---|--|
| <i>Formalisme dynamique avec intégration temporelle explicite et contraintes cinématiques</i> | <p>Le point principal est la maîtrise de l'approche duale pour l'évaluation des forces de réaction aux contraintes (ici les efforts d'interface entre les sous-domaines et les forces assurant la conservation du repère local en projection avec grands mouvements d'ensemble).</p> <p>Cette approche présente les avantages d'une grande flexibilité (compatibilité avec une approche à plusieurs échelles de temps par exemple) et d'une grande précision (les contraintes sont gérées exactement) au prix d'une complexification de la résolution en raison du traitement nécessaire d'un problème spécifique pour le calcul des multiplicateurs de Lagrange.</p> <p>Par ailleurs, la manipulation en profondeur des équations de la dynamique pour y introduire les techniques de réduction de manière satisfaisante procure une expérience et un recul utiles pour envisager et mettre en œuvre des stratégies innovantes dans ce domaine.</p> |
| <i>Décomposition de domaine</i> | <p>Le travail réalisé donne une vision globale sur les stratégies courantes dans la communauté du calcul en mécanique, en distinguant en particulier les techniques avec couplages de schémas d'intégration en temps mises au point par Gravouil et Combescure et développées depuis, et la méthode FETI, qui représente une référence par rapport à laquelle il est toujours judicieux de positionner les travaux sur ce thème.</p> |
| <i>Stratégie de résolution et algorithmes efficaces pour les systèmes couplés complexes</i> | <p>C'est un des acquis importants résultant de l'optimisation de la résolution du système avec projection modale en présence de modes rigides d'amplitude finie.</p> <p>Elle a exigé la définition et l'analyse minutieuse d'un nouveau solveur itératif pour le calcul des efforts de couplage avec les autres sous-domaines, avec la mise en œuvre d'un préconditionneur spécifique. Il en résulte une expérience significative pour la résolution performante de systèmes linéaires dont les composantes sont fortement évolutives dans le temps.</p> |

Table 3 : Acquis du travail doctoral pour l'organisation d'une activité de recherche dans le domaine de la dynamique rapide

5. Bibliographie réduite et publications spécifiques (surlignées)

[Argyris, 1982]

AJ. Argyris, An excursion into large rotations, *Comp. Meth. in Applied Mech. and Engrg.*, vol. 32:85-155, 1982.

[Cardona et Géraudin, 1992]

A. Cardona, M. Géraudin, A superelement formulation for mechanism analysis, *Comp. Meth. in Appl. Mech. and Engrg.*, vol. 100:1-29, 1992.

[Craig et Bampton, 1961]

R. Craig, M. Bampton, Coupling of substructures for dynamic analysis, *AIAA Journal*, vol. 4: 265-271, 332-345, 1961-1962.

[Fahrat et Roux, 1994]

C. Fahrat, F. X. Roux, Implicit parallel processing in structural mechanics, *Computational Mechanics Advances*, vol. 2(1):1-124, North-Holland, 1994.

[Faucher, 2003]

V. Faucher, Méthodes de réduction en dynamique explicite multi-échelles pour l'analyse des structures complexes sous impact, Thèse de doctorat de l'Ecole Normale Supérieure de Cachan, 2003.

[Faucher et Combescure, 2003]

V. Faucher, A. Combescure, A time and space mortar method for coupling linear modal subdomains and non-linear subdomains in explicit structural dynamics, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 192 (5-6): 509-533, 2003.

[Faucher et Combescure (1), 2004]

V. Faucher, A. Combescure, Local modal reduction in explicit dynamics with domain decomposition. Part 2: Specific interface treatment when modal subdomains are involved, *Int. J. for Num. Meth. in Engrg.*, vol 61: 69-95, 2004.

[Faucher et Combescure (2), 2004]

V. Faucher, A. Combescure, Local modal reduction in explicit dynamics with domain decomposition. Part 1: Extension to subdomains undergoing finite rigid rotations, *Int. J. for Num. Meth. in Engrg.* Vol 60: 2531-2560, 2004.

[Gravouil, 2000]

A. Gravouil, Méthode multi-échelles en temps et en espace avec décomposition de domaines pour la dynamique non-linéaire des structures, Thèse de doctorat de l'Ecole Normale Supérieure de Cachan, 2000.

[Gravouil et Combescure, 2001]

A. Gravouil, A. Combescure, Multi-time-step explicit-implicit method for non-linear structural dynamics, *Int. J. for Num. Meth. in Engrg.*, vol. 50:199-225, 2001.

[Herran, 2008]

M. Herran, Simulation de la perte généralisée de pales dans un turbomoteur, Thèse de doctorat de l'INSA Lyon, 2008.

[Herry et al., 2002]

B. Herry, L. Di Valentin, A. Combescure, An approach to the connection between subdomains with nonmatching meshes for transient mechanical analysis, *Int. J. for Num. Meth. in Engrg.*, vol. 55:973-1003, 2002.

[Likins, 1967]

P. W. Likins, Modal method for analysis of free rotations of spacecraft, *AIAA Journal*, vol. 5(7):1304-1308, 1967.

[Robbe et al., 1994]

M. F. Robbe, M. Lepareux, H. Bung, Programme PLEXUS : notice théorique, rapport CEA 94.490, 1994.

[Shabana, 1989]

A. Shabana, *Dynamics of Multibody Systems*, John Wiley & Sons, New York, 1989.

B. ACTIVITES SCIENTIFIQUES POST-DOCTORALES

1. PREAMBULE : DYNAMIQUE RAPIDE EN INTERACTION FLUIDE-STRUCTURE

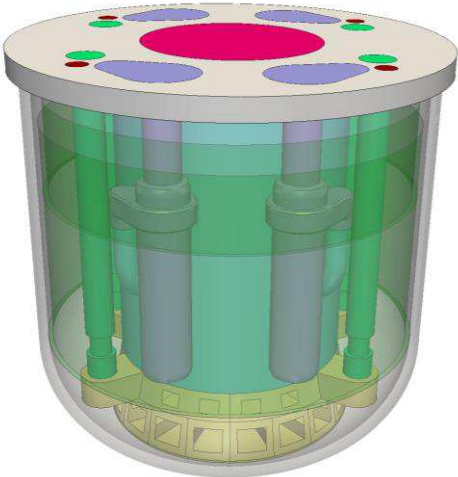
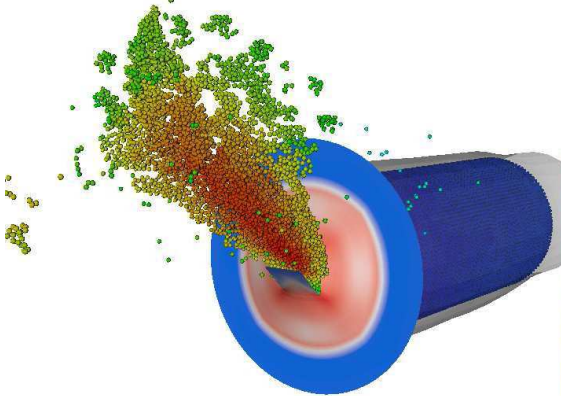
Il s'agit dans ce préambule de préciser les équations principales qui servent de support aux travaux présentés par la suite. Elles présentent des similitudes et des différences avec les systèmes considérés au chapitre précédent, qu'il convient de bien préciser pour mettre en évidence le cheminement scientifique et éviter les confusions, en particulier lorsque des stratégies parallèles reposant sur un formalisme multi-domaines sont considérées. Cette section est conclue sur une présentation des enjeux et thèmes de recherche pilotant les actions post-doctorales.

A nouveau, le code de simulation EPX est le réceptacle des méthodes et développements, pour assurer d'une part leur pérennité et d'autre part leur diffusion vers les mondes académique et industriel.

1.1 SYSTEMES PHYSIQUES CONSIDERES ET EQUATIONS LOCALES

On se place comme précédemment dans le cadre de l'analyse des conséquences mécaniques de transitoires brutaux accidentels ou issus de malveillances. Le périmètre technique est à présent plus étendu et intègre la représentation des fluides, seuls ou en interaction avec les structures environnantes. La Table 4 illustre quelques situations d'intérêt, en précisant les besoins méthodologiques pour pouvoir les représenter avec précision.

Il est important de préciser que les simulations proposées sont la plupart du temps utilisées dans un référentiel de sûreté industrielle, notamment dans le domaine nucléaire, ce qui s'accompagne de contraintes spécifiques concernant la maîtrise de la qualité des solutions proposées.

| Accident de Dimensionnement du Confinement pour un réacteur de 4 ^{ème} génération. | Impact sur un réservoir avec fuites de liquide |
|--|---|
|  <p data-bbox="161 1525 796 1576">Détente dans une cuve avec structures internes d'une bulle de gaz comprimé dans un liquide avec surface libre</p> |  |
| <p data-bbox="150 1601 443 1630"><i>Eléments méthodologiques</i></p> | |
| <p data-bbox="150 1653 796 1711">Interaction fluide-structure : approche ALE (voir ci-dessous), structures immergées.</p> <p data-bbox="150 1727 679 1756">Ecoulement multi-fluides avec suivi d'interface(s).</p> | <p data-bbox="833 1653 1422 1682">Endommagement et déchirure d'une coque métallique.</p> <p data-bbox="833 1697 1182 1727">Interaction avec le fluide interne.</p> <p data-bbox="833 1742 1110 1771">Approches sans maillage.</p> |

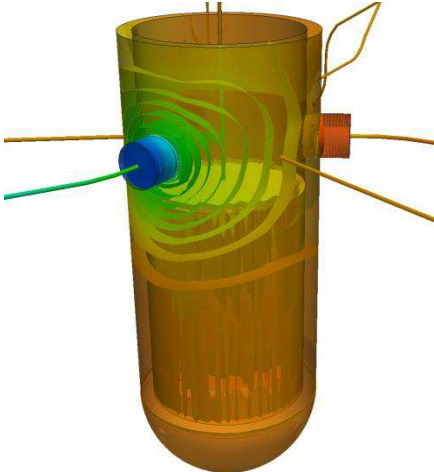
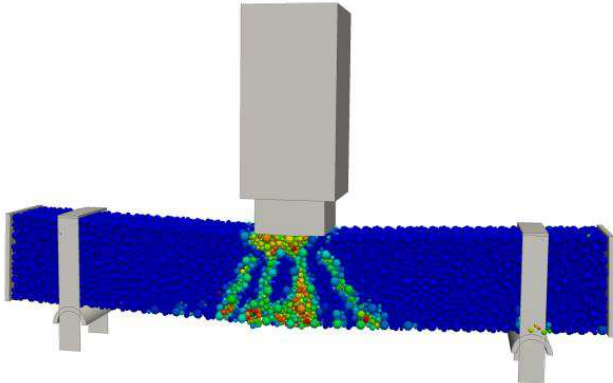
| Conséquences mécaniques de l'Accident par Perte de Réfrigérant Primaire | Impact sur une structure en béton armé |
|--|--|
|  |  |
| <i>Eléments méthodologiques</i> | |
| <p>Modèle couplé 1D/3D à l'échelle d'un réacteur.</p> <p>Interaction fluide-structure et fluide multi-phasique.</p> <p>Prise en compte de l'influence de détails structurels localisés sur la propagation des ondes et l'écoulement.</p> | <p>Eléments discrets pour la gestion de la fragmentation, de l'ouverture et de la refermeture de vides.</p> <p>Interaction entre éléments discrets et éléments finis de poutre pour le béton armé.</p> |

Table 4 : Transitoires brutaux représentatifs des méthodes numériques proposées

Quelques hypothèses sont ajoutées pour définir précisément la portée des équations d'évolution de ces systèmes, données ci-dessous.

Pour les structures

Les vitesses d'impact considérées (de l'ordre de quelques centaines de m/s en général) sont loin du domaine dit des *hypervitesses*, pour lesquelles le comportement des solides rejoint celui des fluides et où une équation d'énergie doit être considérée en plus de l'équilibre dynamique, avec une relation de comportement adaptée en conséquence (voir par exemple [Przemieniecki, 2000][Franquet, 2006]). Cela signifie en particulier dans le cadre de l'analyse des conséquences des malveillances que l'initiateur est vu comme un chargement équivalent, sans représentation fine du comportement d'un dispositif relevant du militaire.

A l'opposé en termes de vitesses et de temps caractéristiques (les temps de simulation vont couramment de 10 à 250 ms), les phénomènes considérés interviennent à des échelles ne laissant pas la conduction thermique s'établir dans les matériaux, en particulier métalliques. Certaines relations de comportement peuvent toutefois utiliser la température comme variable interne.

Pour les fluides

On considère des écoulements compressibles, avec des nombres de Mach variant classiquement entre 0.5 et 3-4. Dans le cas d'écoulements liquide-gaz, on peut rencontrer des nombres de Mach plus faibles dans le liquide, avec des soucis connus de perte de précision sur le champ de pression. Ces difficultés ne sont pas prépondérantes pour les simulations proposées dans le présent mémoire, en particulier en vertu de l'approche mise en œuvre pour l'interaction fluide-structure (voir ci-dessous).

A nouveau, pour la durée caractéristique des simulations d'intérêt, les phénomènes visqueux ne présentent pas une influence significative : les couches limites ne modifient que peu l'écoulement et la turbulence est négligée. On résout ainsi les équations d'Euler compressibles pour les fluides concernés : le tenseur des contraintes est sphérique et le glissement est parfait au niveau des parois.

Les structures ou les fluides discrétisés par des particules SPH (pour *Smooth Particles Hydrodynamics*, voir notamment [Gingold et Monaghan, 1983]) sont suivies en représentation Lagrangienne (i.e. les nœuds du maillage ou les particules sont déplacées à partir du champ de vitesse physique).

Au contraire, les fluides discrétisés par des approches continues (volumes finis ou mixtes éléments finis/volumes finis) sont suivis en représentation eulérienne (i.e. la grille est fixe) ou ALE, pour *Arbitrary Lagrange Euler* [Donea

et al., 2004] (i. e. les nœuds de la grille sont déplacés à partir d'un champ de vitesse découplé de la vitesse physique et donné par des conditions particulières définies par le modélisateur).

Au niveau des notations, contrairement au chapitre A, on nomme à présent \mathbf{q} le déplacement pour les entités lagrangienne, \mathbf{u} la vitesse physique pour les entités eulériennes ou ALE et \mathbf{w} la vitesse de la grille en ALE. Ces notations valent pour toute la suite du document.

Pour formaliser les interactions entre éléments de structure et entre fluide et structure (voir le paragraphe B-1.2 pour une description des interactions prises en compte), en intégrant également les conditions aux limites portant sur toutes les entités d'un modèle, on définit une écriture générique continue en espace et en temps prenant l'expression :

$$\mathbf{d}(\dot{\mathbf{q}}, \mathbf{u}, \mathbf{x}, t) = \mathbf{s}(\mathbf{x}, t) \quad (16)$$

Les contraintes cinématiques ainsi écrites portent classiquement sur les vitesses.

Sur la base de l'ensemble des considérations ci-dessus, la Table 5 donne les équations locales prises en considération dans la suite du document. On fait le choix d'écrire l'équation de conservation de la quantité de mouvement pour les entités eulériennes ou ALE sous sa forme non-conservative, pour exhiber la similitude de sa structure avec l'équation d'équilibre dynamique pour les structures. Pour ne pas alourdir les écritures, on omet la dépendance systématique en espace et en temps des variables.

| Entités lagrangiennes (structures, particules SPH) | Entités eulériennes ou ALE (fluides) |
|---|--|
| <i>Equilibre dynamique ou conservation de la quantité de mouvement</i> | |
| $\rho \ddot{\mathbf{q}} + \nabla \cdot \{\boldsymbol{\sigma}[\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{q})]\} = \mathbf{f}_{\text{vol}}^{\text{str}}$ (17-a) | $\rho \dot{\mathbf{u}} + \nabla \mathbf{P} + \rho \mathbf{u} \cdot \nabla (\mathbf{u} - \mathbf{w}) = \mathbf{f}_{\text{vol}}^{\text{flu}}$ (17-b) |
| | <i>Conservation de la masse</i> |
| | $\dot{\rho} + \rho \nabla \cdot \mathbf{u} + (\mathbf{u} - \mathbf{w}) \cdot \nabla \rho = 0$ (17-c) |
| | <i>Conservation de l'énergie totale (en fonction des équations d'état considérées)</i> |
| | $\dot{E} + \mathbf{P} \nabla \cdot \mathbf{u} + \mathbf{E} \cdot \nabla (\mathbf{u} - \mathbf{w}) = 0$ (17-d) |
| <i>Contraintes cinématiques</i> | |
| $\mathbf{d}(\dot{\mathbf{q}}, \mathbf{u}) = \mathbf{s}$ (17-e) | |
| ρ Masse volumique locale pour structures et fluides | E Energie totale dans le fluide |
| $\boldsymbol{\sigma}$ Tenseur des contraintes de Cauchy | $\mathbf{f}_{\text{vol}}^{\text{str}}$ Forces de volumes pour les structures |
| $\boldsymbol{\varepsilon}$ Tenseur des déformations d'Almansi-Euler | $\mathbf{f}_{\text{vol}}^{\text{flu}}$ Forces de volumes pour les fluides |
| P Pression dans le fluide | |

Table 5 : Equations locales pour structures et fluides

Aucune limitation n'étant appliquée sur l'amplitude du déplacement \mathbf{q} , on considère une mesure des déformations courantes pour les structures, invariante dans les rotations d'amplitude finie, à savoir la mesure d'Almansi-Euler, supposant que la configuration de référence est la configuration courante (les contraintes étant alors des contraintes de Cauchy) :

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{q}) = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{q} + {}^t \nabla \mathbf{q} - {}^t \nabla \mathbf{q} \nabla \mathbf{q}) \quad (18)$$

Le système est fermé par la donnée d'une part de la relation de comportement reliant les contraintes à la mesure des déformations pour les structures et d'autre part, de la loi d'état reliant la pression aux autres variables thermodynamiques (densité et énergie totale) pour les fluides. Ces relations sont non-linéaires dans le cas général. L'insertion des forces de réaction aux contraintes cinématiques dans les équations d'équilibre est explicitée au paragraphe suivant.

La Table 6 résume les non-linéarités figurant dans les équations ci-dessus.

| Type de non-linéarité | Description |
|--|--|
| Non-linéarités géométriques | Grands déplacements et grandes rotations pour les structures Convection dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement pour les fluides |
| Non-linéarités matérielles | Relations de comportement intégrant plasticité et endommagement pour les structures Lois d'état thermodynamiquement complexes (multi-fluides, multi-phasiques...) pour les fluides |
| Contraintes cinématiques non-linéaires | Contact unilatéral pour les structures Contraintes d'interaction fluide-structure dépendant de la géométrie et des mouvements relatifs entre les structures et la grille fluide (voir à nouveau le paragraphe B-1.2 pour une expression discrète détaillée des contraintes) |

Table 6 : Résumé des non-linéarités considérées

1.2 DISCRETISATION EN ESPACE ET EN TEMPS

1.2.1 Discrétisation en temps pour les entités lagrangiennes

Pour les entités lagrangiennes, le temps est discrétisé à l'aide du schéma des différences centrées, de la famille des schémas de Newmark [Newmark, 1959], se présentant sous la forme, entre l'instant t^n , où toutes les quantités du problème sont supposées connues, et l'instant t^{n+1} , où le problème est résolu :

$$\begin{aligned}
 \dot{\mathbf{q}}^{n+1/2} &= \dot{\mathbf{q}}^n + \frac{\Delta t}{2} \ddot{\mathbf{q}}^n \\
 \mathbf{q}^{n+1} &= \mathbf{q}^n + \Delta t \dot{\mathbf{q}}^{n+1/2} \\
 \dot{\mathbf{q}}^{n+1} &= \dot{\mathbf{q}}^{n+1/2} + \frac{\Delta t}{2} \ddot{\mathbf{q}}^{n+1}
 \end{aligned} \tag{19}$$

Le déplacement et la configuration du système sont effectivement prédits de manière explicite, d'où le qualificatif couramment affecté à ce schéma. Il n'en est pas de même pour les vitesses, qui ne sont connues explicitement qu'au demi-pas de temps.

En raison de la prédiction explicite du déplacement, une condition additionnelle de stabilité est associée au schéma pour contrôler l'accumulation des erreurs de troncature, détaillée dans [Hugues, 1983]. C'est le décalage des grilles pour la vitesse et le déplacement qui permet qu'une telle condition existe, sous la forme d'un pas de temps maximal, ou *pas de temps critique*, non nul. En appliquant la même analyse de stabilité à un schéma totalement explicite, prédisant déplacement et vitesse à l'instant t^{n+1} en fonction du passé, on obtient un pas de temps critique nul, soit un schéma inconditionnellement instable.

La même approche permet également de quantifier l'effet sur la stabilité de l'intégration de l'estimation de quantités dépendant de la vitesse, comme des termes d'amortissement ou de couplage de Coriolis, à partir de la vitesse au demi-pas de temps au lieu de la vitesse adéquate au pas de temps complet. On vérifie alors que des termes d'amortissement dissipatifs, qui stabilisent le schéma lorsqu'ils sont considérés exactement, peuvent faire baisser le pas de temps critique lorsqu'ils sont *explicités* et que des termes de couplages produisant des forces orthogonales à la vitesse (comme ceux de Coriolis), par conséquent normalement sans effet sur l'énergie du système et donc sa stabilité, influent également sur le pas de temps critique, parfois de manière drastique (cf. remarque au paragraphe A-2).

En pratique, la condition de stabilité du schéma des différences centrées s'exprime à partir de la pulsation maximale ω_{\max} du système mécanique considéré et stipule que :

$$\{ \Delta t < \Delta t_{\text{crit}} \Rightarrow \text{stabilité} \} \text{ avec } \Delta t_{\text{crit}} = \frac{2}{\omega_{\max}} \tag{20}$$

On ne cherche que rarement à obtenir cette pulsation maximale, en lui préférant un majorant obtenu par une analyse locale (sur chaque cellule du maillage s'il existe, ou par des considérations de voisinage pour les approches avec particules). Ceci conduit à la condition bien connue de Courant-Friedrich-Levy, abrégée condition de Courant ou CFL, prenant la forme [Belytschko et Hugues, 1986] :

$$\Delta t_{\text{crit}} \geq \min_{\text{cellules ou particules}} \left(\frac{L}{c} \right) \Leftrightarrow \left\{ \Delta t < \min_{\text{cellules ou particules}} \left(\frac{L}{c} \right) \Rightarrow \text{stabilité} \right\} \quad (21)$$

où L est une longueur caractéristique attachée à la discrétisation spatiale (voir ci-dessous), par exemple la plus petite dimension d'une cellule,

c est la vitesse du son locale, dépendant des caractéristiques matérielles.

Intuitivement, pour une discrétisation à base de cellules, cette condition exprime qu'une onde ne peut pas traverser entièrement une cellule en un seul pas de temps sans conduire à une instabilité dans la propagation de l'information.

1.2.2 Discrétisation en temps pour les entités eulériennes ou ALE

Pour ces entités, seules des dérivées en temps d'ordre 1 doivent être approchées, la variable de départ étant la vitesse. On utilise alors un schéma explicite simple de type *Forward Euler* [Butcher, 2003] :

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^n + \Delta t \dot{\mathbf{u}}^n \quad (22)$$

Ce schéma présente une condition de stabilité très similaire à celle du schéma des différences centrées et la condition CFL est à nouveau une condition suffisante pour la stabilité de l'intégration.

1.2.3 Remarque sur la sévérité de la condition de stabilité des schémas explicites

Il est de coutume de définir le domaine technique dit de la *dynamique rapide explicite* comme celui où les conditions aux limites ou initiales du système imposent une finesse de discrétisation temporelle de l'ordre de grandeur de celle imposée par la condition portant sur le schéma.

En reprenant l'interprétation physique de la condition CFL, cela distingue les problèmes où les phénomènes propagatifs sont prépondérants, comme les impacts ou les chocs, puisque la stabilité implique alors la précision dans la représentation de la propagation des ondes.

Au contraire, pour des phénomènes plus *lents*, de la vibration courante au quasi-statique, une intégration implicite, ne présentant pas de condition de stabilité mais conduisant à une résolution plus complexe à chaque pas, est logiquement préférable.

1.2.4 Discrétisation en espace et système matriciel à considérer à chaque pas de temps

Pour les entités lagrangiennes, la discrétisation spatiale est réalisée à l'aide d'éléments finis, de particules SPH ou d'éléments discrets.

Pour les entités eulériennes, les équations de conservation de la masse et de l'énergie sont toujours traitées par une approche de type volumes finis. Au contraire, deux stratégies sont possibles dans EPX pour l'équation de conservation de la quantité de mouvement, suivant que l'on considère sa forme conservative ou non-conservative. Etant donné la similitude entre la forme non-conservative et l'équation d'équilibre lagrangienne et l'accent porté dans la suite au traitement des contraintes cinématiques, on privilégie la discrétisation par éléments finis pour disposer d'un formalisme unifié. Il est hors de propos du présent mémoire de discuter les avantages et les inconvénients de chacune des approches, sachant que nombre des principes exposés dans la suite s'appliquent indifféremment à elles deux.

On obtient alors un système discret de la forme à considérer au pas de temps t^{n+1} de l'échelle discrète :

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \mathbf{M}_S & \\ & \mathbf{M}_F^{n+1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \ddot{\mathbf{Q}}^{n+1} \\ \dot{\mathbf{U}}^{n+1} \end{bmatrix} + \mathbf{F}_{\text{link}}^{n+1} &= \begin{bmatrix} \mathbf{F}_{\text{vol}}^{\text{str}} + \mathbf{F}_{\text{surf}}^{\text{str}} \\ \mathbf{F}_{\text{vol}}^{\text{flu}} + \mathbf{F}_{\text{surf}}^{\text{flu}} \end{bmatrix}^{n+1} - \begin{bmatrix} \mathbf{F}_{\text{int}}(\mathbf{Q}^{n+1}) \\ \mathbf{F}_{\text{int}}(\mathbf{U}^{n+1}) + \mathbf{F}_{\text{trans}}(\mathbf{U}^{n+1}, \mathbf{W}^{n+1}) \end{bmatrix} \\ \mathbf{D}^{n+1} \begin{bmatrix} \dot{\mathbf{Q}}^{n+3/2} \\ \mathbf{U}^{n+2} \end{bmatrix} &= \mathbf{S}^{n+1} \\ [\rho]^{n+1} &= [\rho]^n + \mathbf{F}_\rho(\mathbf{U}, \mathbf{W}) \\ [\mathbf{E}]^{n+1} &= [\mathbf{E}]^n + \mathbf{F}_E(\mathbf{U}, \mathbf{W}) \end{aligned} \quad (23)$$

\mathbf{Q} et \mathbf{U} sont les vecteurs des inconnues nodales. \mathbf{W} est le vecteur des vitesses de grilles nodales. Les matrices de masse \mathbf{M}_S et \mathbf{M}_F^{n+1} , dont l'expression est donnée ci-dessous, sont rendues diagonales par des méthodes de sommation classiques (voir par exemple [Argyris et Mjelnik, 1991]). La matrice \mathbf{M}_F^{n+1} est variable dans le temps en raison des flux de masse à travers les faces des cellules. Les forces internes \mathbf{F}_{int} résultent de l'intégration des contraintes élémentaires (ou entre particules) pour les structures et de l'intégration des forces de pression pour

les fluides. $\mathbf{F}_{\text{trans}}$ est le vecteur des forces de transport nodales explicites. Enfin, $\mathbf{F}_{\text{vol}}^{\text{xx}}$ et $\mathbf{F}_{\text{surf}}^{\text{xx}}$ sont issues de l'intégration des forces de volume et de surface (apparues lors de la mise sous forme faible des équations locales pour les approches variationnelles) pour les structures et les fluides.

Pour les éléments finis, le terme générique des opérateurs introduits dans le système (23) a pour expression :

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_{ij} &= \rho \int_V N_i(\mathbf{x}) N_j(\mathbf{x}) dV \\ \mathbf{F}_{\text{int}_i} &= \int_V {}^t \mathbf{B}_i(\mathbf{x}) \boldsymbol{\sigma}[\mathbf{q}(\mathbf{x})] dV \\ \mathbf{F}_{P_i} &= \int_V {}^t \mathbf{B}_i(\mathbf{x}) P[\rho, E] \mathbf{I} dV \\ \mathbf{F}_{\text{trans}_i} &= \rho \int_V [\mathbf{u}(\mathbf{x}) \cdot \nabla \mathbf{u}(\mathbf{x})] \cdot N_i \mathbf{e}_i dV \end{aligned} \quad (24)$$

où i est l'indice du degré de liberté de la discrétisation, N_i la fonction de forme associée, \mathbf{B}_i ses dérivées spatiales et \mathbf{e}_i la direction de l'espace correspondante.

Les contraintes cinématiques s'expriment sous forme discrète par l'intermédiaire d'une matrice \mathbf{D}^{n+1} agissant sur les degrés de libertés inconnus en vitesse, soit au demi-pas de temps suivant $t^{n+3/2}$ pour les entités lagrangiennes et au pas de temps de suivant t^{n+2} pour les entités eulériennes ou ALE. La matrice \mathbf{D}^{n+1} et le second membre \mathbf{S}^{n+1} sont, de manière générale, variables dans le temps. La question de l'évaluation des forces $\mathbf{F}_{\text{link}}^{n+1}$ exprimant les réactions du système aux contraintes est détaillée ci-dessous.

Enfin, le système est fermé par deux équations au format volume fini pour les entités eulériennes, exprimant la mise à jour de la masse volumique et de l'énergie totale dans les cellules en fonction des flux \mathbf{F}_p et \mathbf{F}_E calculés sur leurs faces. A nouveau, le choix d'une approche volume fini pour ces équations ne réduit en rien la généralité des méthodes exposées dans la suite, et un formalisme élément fini pourrait être utilisé à la place, avec des caractéristiques sur la qualité de la solution qui ne sont pas discutées dans ce mémoire.

1.2.5 Evaluation des forces de réactions aux contraintes cinématiques

Classification des contraintes

On considère 3 classes principales de contraintes cinématiques, hiérarchisées en fonction de la difficulté à les imposer en cours de calcul.

1. Contraintes permanentes à coefficients constants

Ce sont principalement des conditions aux limites de Dirichlet, des mouvements imposés ou des relations entre degrés de libertés, pour représenter des mécanismes par exemple (cf. Figure 7-a).

Les lignes correspondantes dans la matrice \mathbf{D}^{n+1} et le second membre \mathbf{S}^{n+1} ne varient pas dans le temps.

2. Contraintes permanentes à coefficients variables

On les rencontre principalement dans le cas de l'interaction fluide-structure avec maillages conformes entre fluide et structure (cf. Figure 7-b). Les contraintes de non-pénétration de la structure par le fluide sont écrites nœud à nœud dans la direction normale à la structure, qui évolue avec son mouvement. Le remplissage des lignes correspondantes de la matrice \mathbf{D}^{n+1} ne varie pas, mais la valeur des coefficients et le second membre changent.

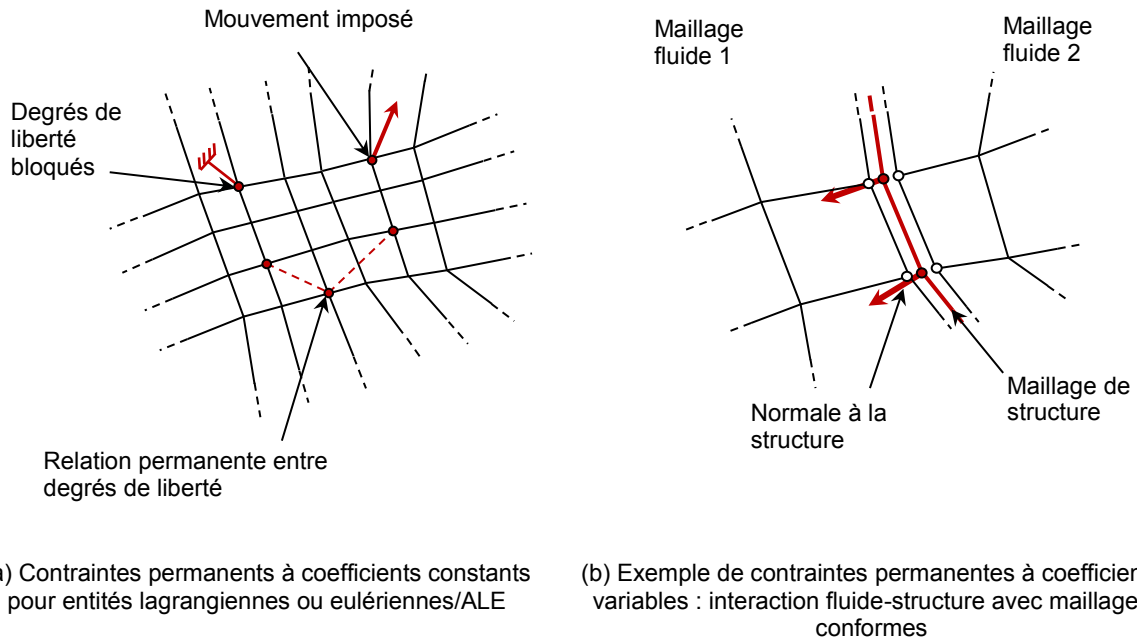


Figure 7 : Contraintes cinématiques permanentes

3. Contraintes non-permanentes

Il s'agit du cas général, dans lequel les lignes de la matrice \mathbf{D}^{n+1} , dont le nombre est inconnu, ainsi que le second membre \mathbf{S}^{n+1} , doivent être construits à chaque pas de temps. Cette situation se produit fréquemment pour des simulations avec fluide et structure en environnement industriel, où le contact entre éléments de structure doit être pris en compte et où les grands déplacements des structures rendent impossible l'utilisation de maillages conformes entre entités lagrangiennes et ALE. Ils sont remplacés par des techniques de type *frontières immergées* (voir par exemple [Casadei et Leconte, 2011] pour le cas particulier d'EPX) pour lesquels les degrés de liberté en relation sont réactualisés en cours de calcul.

Des exemples de telles contraintes couramment rencontrées sont donnés sur la Figure 8. L'objet de ce paragraphe n'est pas d'en faire une liste exhaustive, mais au contraire d'en dégager les caractéristiques générales.

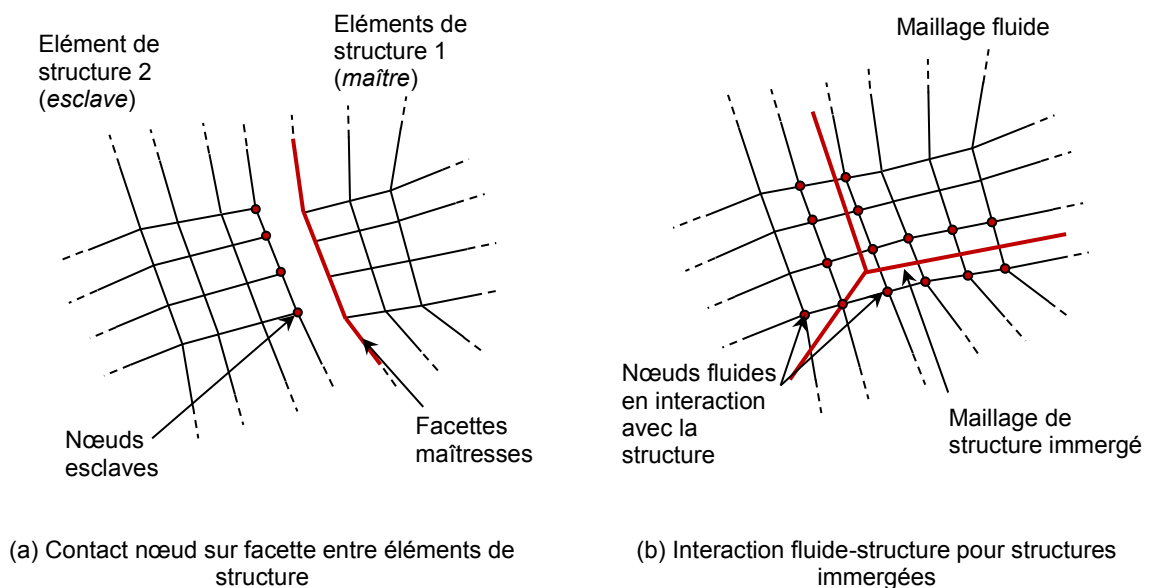


Figure 8 : Exemples de contraintes cinématiques non-permanentes

Calcul des forces de réaction

Préalablement au calcul des forces, il est nécessaire de faire porter les contraintes cinématiques, impliquant physiquement les vitesses pour la meilleure précision, sur les inconnues au moment de la résolution, à savoir les accélérations. Pour ce faire, on injecte le schéma d'intégration dans les contraintes :

$$\begin{aligned} \mathbf{D}^{n+1} \begin{bmatrix} \dot{\mathbf{Q}}^{n+3/2} \\ \mathbf{U}^{n+2} \end{bmatrix} = \mathbf{S}^{n+1} &\Leftrightarrow \mathbf{D}^{n+1} \begin{bmatrix} \dot{\mathbf{Q}}^{n+1/2} + \Delta t \ddot{\mathbf{Q}}^{n+1} \\ \mathbf{U}^{n+1} + \Delta t \dot{\mathbf{U}}^{n+1} \end{bmatrix} = \mathbf{S}^{n+1} \\ &\Leftrightarrow \Delta t \tilde{\mathbf{D}}^{n+1} \begin{bmatrix} \ddot{\mathbf{Q}}^{n+1} \\ \dot{\mathbf{U}}^{n+1} \end{bmatrix} = \mathbf{S}^{n+1} - \mathbf{D}^{n+1} \begin{bmatrix} \dot{\mathbf{Q}}^{n+1/2} \\ \mathbf{U}^{n+1} \end{bmatrix} \Leftrightarrow \tilde{\mathbf{D}}^{n+1} \begin{bmatrix} \ddot{\mathbf{Q}}^{n+1} \\ \dot{\mathbf{U}}^{n+1} \end{bmatrix} = \tilde{\mathbf{S}}^{n+1} \end{aligned} \quad (25-a)$$

Les équations d'équilibre à résoudre intégrant cette modification deviennent :

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \mathbf{M}_S \\ \mathbf{M}_F^{n+1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \ddot{\mathbf{Q}}^{n+1} \\ \dot{\mathbf{U}}^{n+1} \end{bmatrix} + \mathbf{F}_{\text{link}}^{n+1} &= \begin{bmatrix} \mathbf{F}_{\text{vol}}^{\text{str}} + \mathbf{F}_{\text{surf}}^{\text{str}} \\ \mathbf{F}_{\text{vol}}^{\text{flu}} + \mathbf{F}_{\text{surf}}^{\text{flu}} \end{bmatrix}^{n+1} - \begin{bmatrix} \mathbf{F}_{\text{int}}(\mathbf{Q}^{n+1}) \\ \mathbf{F}_{\text{int}}(\mathbf{U}^{n+1}) + \mathbf{F}_{\text{trans}}(\mathbf{U}^{n+1}, \mathbf{W}^{n+1}) \end{bmatrix} \\ \tilde{\mathbf{D}}^{n+1} \begin{bmatrix} \ddot{\mathbf{Q}}^{n+1} \\ \dot{\mathbf{U}}^{n+1} \end{bmatrix} &= \tilde{\mathbf{S}}^{n+1} \end{aligned} \quad (25-b)$$

Une manière élégante et classique de discriminer les méthodes de calcul des forces de réaction $\mathbf{F}_{\text{link}}^{n+1}$ est de considérer que les équations d'équilibre expriment la stationnarité d'une fonctionnelle \mathbf{J} de la forme :

$$\begin{aligned} \mathbf{J} = & {}^t \begin{bmatrix} \ddot{\mathbf{Q}}^{n+1} \\ \dot{\mathbf{U}}^{n+1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{M}_S \\ \mathbf{M}_F^{n+1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \ddot{\mathbf{Q}}^{n+1} \\ \dot{\mathbf{U}}^{n+1} \end{bmatrix} + \mathbf{R} \left(\tilde{\mathbf{D}}^{n+1} \begin{bmatrix} \ddot{\mathbf{Q}}^{n+1} \\ \dot{\mathbf{U}}^{n+1} \end{bmatrix} - \tilde{\mathbf{S}}^{n+1} \right) - \\ & {}^t \begin{bmatrix} \ddot{\mathbf{Q}}^{n+1} \\ \dot{\mathbf{U}}^{n+1} \end{bmatrix} \left\{ \begin{bmatrix} \mathbf{F}_{\text{vol}}^{\text{str}} + \mathbf{F}_{\text{surf}}^{\text{str}} \\ \mathbf{F}_{\text{vol}}^{\text{flu}} + \mathbf{F}_{\text{surf}}^{\text{flu}} \end{bmatrix}^{n+1} - \begin{bmatrix} \mathbf{F}_{\text{int}}(\mathbf{Q}^{n+1}) \\ \mathbf{F}_{\text{int}}(\mathbf{U}^{n+1}) + \mathbf{F}_{\text{trans}}(\mathbf{U}^{n+1}, \mathbf{W}^{n+1}) \end{bmatrix} \right\} \end{aligned} \quad (26)$$

Cette écriture permet d'obtenir l'expression suivante pour les forces $\mathbf{F}_{\text{link}}^{n+1}$:

$$\mathbf{F}_{\text{link}}^{n+1} = \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \begin{bmatrix} \ddot{\mathbf{Q}}^{n+1} \\ \dot{\mathbf{U}}^{n+1} \end{bmatrix}} \quad (27)$$

C'est dès lors le choix de la fonction \mathbf{R} agissant sur le résidu sur les contraintes qui détermine le mode de calcul de $\mathbf{F}_{\text{link}}^{n+1}$. Parmi les nombreuses références sur le sujet (voir notamment [Smith et Coit, 1997][Unger et al., 2007]), on s'intéresse à deux stratégies principales, rassemblées sur la Table 7.

| Approche par pénalisation | Approche duale (reposant sur des inconnues additionnelles ou Multiplicateurs de Lagrange) |
|--|---|
| <i>Fonction R</i> | |
| $\mathbf{R} = \left(\tilde{\mathbf{D}}^{n+1} \begin{bmatrix} \ddot{\mathbf{Q}}^{n+1} \\ \dot{\mathbf{U}}^{n+1} \end{bmatrix} - \tilde{\mathbf{S}}^{n+1} \right) \mathbf{P} \left(\tilde{\mathbf{D}}^{n+1} \begin{bmatrix} \ddot{\mathbf{Q}}^{n+1} \\ \dot{\mathbf{U}}^{n+1} \end{bmatrix} - \tilde{\mathbf{S}}^{n+1} \right) \quad (28-a)$ | $\mathbf{R} = \left(\tilde{\mathbf{D}}^{n+1} \begin{bmatrix} \ddot{\mathbf{Q}}^{n+1} \\ \dot{\mathbf{U}}^{n+1} \end{bmatrix} - \tilde{\mathbf{S}}^{n+1} \right) \boldsymbol{\Lambda} \quad (29-a)$ |
| <i>Expression des forces</i> | |
| $\mathbf{F}_{\text{link}}^{n+1} = {}^t \tilde{\mathbf{D}}^{n+1} \mathbf{P} \left(\tilde{\mathbf{D}}^{n+1} \begin{bmatrix} \ddot{\mathbf{Q}}^{n+1} \\ \dot{\mathbf{U}}^{n+1} \end{bmatrix} - \tilde{\mathbf{S}}^{n+1} \right) \quad (28-b)$ | $\mathbf{F}_{\text{link}}^{n+1} = {}^t \tilde{\mathbf{D}}^{n+1} \boldsymbol{\Lambda} \quad (29-b)$ |

| Commentaires | |
|--|--|
| <p>La matrice \mathbf{P} contient les coefficients de pénalisation, un par contrainte cinématique. Plus ces coefficients sont grands, mieux les contraintes sont vérifiées.</p> <p>De plus, cette approche consiste schématiquement à introduire des ressorts additionnels dans le système et augmenter la valeur des coefficients de pénalisation provoque une réduction du pas de temps critique pour la stabilité de l'intégration temporelle.</p> <p>En pratique, il est fréquent de remplacer l'expression (28-b) par une évaluation purement explicite des forces, à l'aide des vitesses connues au demi-pas de temps :</p> $\mathbf{F}_{\text{link explicit}}^{n+1} = {}^t\tilde{\mathbf{D}}^{n+1}\mathbf{P}\left(\mathbf{D}^{n+1}\begin{bmatrix} \dot{\mathbf{Q}}^{n+1/2} \\ \mathbf{U}^{n+1} \end{bmatrix} - \mathbf{S}^{n+1}\right) \quad (28-c)$ | <p>Le vecteur des multiplicateurs $\mathbf{\Lambda}$ (un multiplicateur par contrainte cinématique) est calculé de telle sorte que les contraintes soient vérifiées exactement et cette approche est sans effet sur la stabilité de l'intégration temporelle.</p> |

Table 7 : Stratégie de calcul des forces de réaction aux contraintes cinématiques

On peut trouver des comparaisons détaillées entre les approches dans [Hu, 1997][Chaudhary et Bathe, 1986]. La Table 8 résume les avantages et inconvénients de chacune d'elles.

| | Approche par pénalisation | Approche duale |
|---------------|---|---|
| Avantages | Forces de réaction explicites | Vérification exacte des contraintes Stabilité de l'intégration temporelle préservée. |
| Inconvénients | Choix arbitraire des coefficients de pénalisation influençant la vérification des contraintes et la solution. Contrainte additionnelle sur le pas de temps critique pour la stabilité de l'intégration temporelle. | Système linéaire élargi et non-diagonal à résoudre à chaque pas de temps (voir ci-dessous). |

Table 8 : Avantages et inconvénients des deux stratégies

Pour les approches par pénalisation, des travaux récents proposent des voies pour s'affranchir de la réduction du pas de temps critique, reposant sur des inerties positives et négatives [Hetherington et Askes, 2009]. Quoi qu'il en soit, si une expérience significative est disponible pour l'évaluation automatique des coefficients de pénalisation pour les contraintes cinématiques impliquant des structures, en particulier pour le contact (voir par exemple [Huněk, 1993]), de telles procédures sont difficiles à concevoir pour l'interaction fluide-structure, où des contraintes mal vérifiées produisent des effets immédiats sur les écoulements. Une méthode d'estimation automatique des coefficients peut être trouvée dans [Vincent et al., 2011], mais elle est très adhérente à la formulation particulière mise en œuvre pour le système fluide-structure et ne peut être aisément généralisée. Il en résulte un besoin pour de nombreuses simulations préliminaires destinées à la calibration des coefficients de pénalisation, suivies d'analyses de sensibilité indispensables pour choisir parmi les solutions fournies par différents jeux de coefficients.

De fait, dans un référentiel de sûreté où une dépendance minimale de la solution à des paramètres non-physiques est exigée (cf. paragraphe B-1.1), l'approche duale semble la seule acceptable. Le système à résoudre est finalement :

$$\begin{bmatrix} \mathbf{M}_S \\ \mathbf{M}_F^{n+1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \ddot{\mathbf{Q}}^{n+1} \\ \dot{\mathbf{U}}^{n+1} \end{bmatrix} + {}^t\tilde{\mathbf{D}}^{n+1}\mathbf{\Lambda} = \begin{bmatrix} \mathbf{F}_{\text{vol}}^{\text{str}} + \mathbf{F}_{\text{surf}}^{\text{str}} \\ \mathbf{F}_{\text{vol}}^{\text{flu}} + \mathbf{F}_{\text{surf}}^{\text{flu}} \end{bmatrix}^{n+1} - \begin{bmatrix} \mathbf{F}_{\text{int}}(\mathbf{Q}^{n+1}) \\ \mathbf{F}_{\text{int}}(\mathbf{U}^{n+1}) + \mathbf{F}_{\text{trans}}(\mathbf{U}^{n+1}, \mathbf{W}^{n+1}) \end{bmatrix} \quad (30)$$

$$\tilde{\mathbf{D}}^{n+1} \begin{bmatrix} \ddot{\mathbf{Q}}^{n+1} \\ \dot{\mathbf{U}}^{n+1} \end{bmatrix} = \tilde{\mathbf{S}}^{n+1}$$

Cette structure distingue EPX et les méthodes proposées dans ce mémoire des approches courantes en dynamique explicite, telles qu'on peut les trouver dans les codes les plus répandus comme LS-DYNA¹ ou RADIOSS², reposant classiquement sur des approches par pénalisation.

Pour conclure ce paragraphe, il convient de remarquer que les approches duales sont logiquement plus communes dans le contexte de la mécanique implicite, où l'effort de calcul repose à chaque instant sur la résolution d'un système linéaire global impliquant la matrice de rigidité du système [Brunßen et al., 2007]. Le problème non-linéaire en dynamique rapide considéré dans le présent document présente néanmoins des caractéristiques très différentes de celles rencontrées en mécanique implicite, en particulier en présence de nombreuses contraintes non-permanentes, si bien que peu de la connaissance et de la technologie disponible pour l'implicite peut être repris avec pertinence.

1.3 ENJEUX ET THEMES DE RECHERCHE

Sur la base de la description générique d'un problème de dynamique rapide non-linéaire en interaction fluide-structure fournie dans les paragraphes précédents, on peut à présent classer les actions de recherche menées et encadrées dans la période post-doctorale.

On distingue deux axes principaux décrits sur la Table 9.

| | |
|---------------------------------|---|
| Axe 1 (Chapitre B-2) | Définition, implémentation et industrialisation de nouvelles modélisations et de nouveaux couplages pour répondre aux besoins d'analyse des conséquences de situations accidentelles complexes. |
| Axe 2 (Chapitre B-3) | Passage à l'échelle des méthodes de résolution en dynamique rapide en présence de connexions cinématiques nombreuses et complexes, sans approximation arbitraire dans le processus de résolution. |

Table 9 : Axes de recherche principaux pour la période post-doctorale

Dans le système (23), l'axe 1 est d'une part consacré au calcul du second membre des équations d'équilibre, en particulier les forces internes, pour y intégrer la représentation de phénomènes complexes tels que l'endommagement, la déchirure, l'ouverture et la refermeture de vides pour les structures ou la prise en compte de lois d'état multi-fluides avec interfaces, le traitement des équations de conservation de la masse et de l'énergie totale étant alors également concerné.

D'autre part, il comprend la définition de méthodes innovantes à l'échelle industrielle pour la prise en compte de l'interaction fluide-structure dans des configurations géométriques complexes, soit parce que certains détails structurels sont trop petits pour être représentés, soit parce que le domaine fluide est fortement modifié en raison de la rupture d'une structure enveloppe.

L'enjeu associé à cet axe est de **répondre avec précision à des problématiques spécifiques de modélisation issues de l'industrie.**

La Table 10 donne un aperçu des actions correspondantes, détaillées au chapitre B-2, en mettant en évidence l'encadrement de travaux doctoraux et l'insertion de la recherche dans un contexte collaboratif multi-partenaires le cas échéant.

| Intitulé de l'action | Cadre collaboratif et encadrement |
|--|---|
| <i>Représentation robuste de l'endommagement et de la fissuration des systèmes mécaniques sous chargement extrêmes</i> | |
| Approche particulière pour les coques métalliques avec transition endommagement-déchirure | Thèse de F. Caleyron (volet 1) LaMCoS INSA Lyon/LaMSID |
| Extension de l'approche XFEM en dynamique rapide pour la propagation tridimensionnelle de fissures | Thèse de R. Pelée de Saint Maurice LaMCoS INSA Lyon/CEA |
| Eléments discrets pour la ruine des structures en béton armé sous impact | Thèse d'A. Masurel (<i>en cours</i>) L-3SR UJF Grenoble/LaMSID |

¹ <http://www.dynasupport.com/manuals>, Livermore Software Technology Corporation.

² <http://www.hyperworks.fr/Product.51.RADIOSS.aspx>, Altair.

| <i>Écoulements et systèmes complexes en interaction fluide-structure</i> | |
|--|---|
| Fuites de réservoir sous impact | Thèse de F. Caleyron (volet 2) LaMCoS INSA Lyon/LaMSID |
| Approche anti-diffusive pour les écoulements à interface | Action de recherche transverse au CEA entre le service de mécanique et le service de thermo-hydraulique/mécanique des fluides |
| Simulation des conséquences mécaniques de l'APRP à l'échelle réacteur | Action de recherche EDF/CEA répondant à un besoin industriel d'élaboration d'un schéma de calcul et de sa valorisation par la publication, issu de l'ingénierie EDF |

Table 10 : Aperçu des actions de recherche pour l'axe 1

L'axe 2 est dédié à une problématique courante pour la simulation industrielle, à savoir la réduction du temps nécessaire à l'obtention des résultats pour des modèles complexes. On s'intéresse donc à la résolution parallèle et au passage à l'échelle des algorithmes proposés pour la dynamique rapide des fluides et des structures, en intégrant en particulier les spécificités liées à la gestion duale des contraintes cinématiques.

L'enjeu associé est de **proposer des stratégies de résolution génériques et robustes**, pour pouvoir être déployées vers les unités d'ingénierie sans restriction majeure du domaine d'application des méthodes, **flexibles**, pour s'adapter aux différentes architectures parallèles disponibles, **et extensibles** pour pouvoir mobiliser un grand nombre d'unités de calcul simultanément.

Comme précédemment, la Table 11 donne un aperçu des actions de recherche associées à cet axe, avant une description plus conséquente au chapitre B-3.

| Intitulé de l'action | Cadre collaboratif et encadrement |
|--|--|
| <i>Stratégie pour le parallélisme à mémoire distribuée</i> | |
| Identification des verrous en environnement industriel | Projet ANR RePDyn CEA/EDF/LaMSID/ONERA/LaMCoS INSA Lyon/INRIA LIG |
| Décomposition de domaine dynamique et solveur extensible pour les contraintes cinématiques inter-domaines | Projet ANR RePDyn CEA/EDF/LaMSID/ONERA/LaMCoS INSA Lyon/INRIA |
| <i>Parallélisme hybride dynamique et collaboratif</i> | |
| Parallélisme à mémoire partagée avec ordonnancement dynamique pour les transitoires rapides en interaction fluide-structure | Stage de Master 2 de D. Leone Contrat de recherche de F. Lementec Thèse de M. Sridi (<i>en cours</i>) INRIA LIG/CEA |
| Formalisme hybride et illustration sur les transitoires accidentels de référence pour les réacteurs nucléaires actuels et futurs | <i>Prace Preparatory Access</i> sur TGCC/Curie CEA/EDF/INRIA LIG |

Table 11 : Aperçu des actions de recherche pour l'axe 2

Il convient de préciser que, sauf mention contraire (pour l'approche XFEM en dynamique rapide, par manque de temps), la question de la mise en œuvre parallèle des méthodes définies dans l'axe 1 est toujours traitée, à partir de la version à mémoire distribuée d'EPX. L'adaptation, parfois complexe, des algorithmes pour la résolution parallèle du problème est notamment une action de support et d'encadrement centrale pour les thèses de F. Caleyron et A. Masurel. Les simulations de validation proposées mettent à profit cette action, qui profite également à la pérennité et au déploiement industriel des concepts innovants introduits.

Enfin, on reprend dans la suite du texte la convention utilisée dans la partie A du mémoire pour distinguer les contributions propres au travail de recherche décrit dans le présent mémoire dans les sections bibliographiques (i.e. surlignement en jaune pour les articles et communications, en vert pour les thèses de doctorat).

1.4 REFERENCES

[Argyris et Mjelnik, 1991]

J. Argyris, H.-P. Mjelnik, Dynamics of structures, Texts on Computational Mechanics, Volume V, North Holland, 1991.

[Belytschko et Hugues, 1986]

T. Belytschko, T. J. R. Hughes, Computational methods for transient analysis, North Holland, 1986.

[Brunßen et al., 2007]

S. Brunßen, S. Hüeber, B. Wohlmuth, Contact Dynamics with Lagrange Multipliers, Symposium on Computational Methods in Contact Mechanics, IUTAM Bookseries, vol. 3: 17-32, 2007.

[Butcher, 2003]

C. Butcher, Numerical Methods for Ordinary Differential Equations, New York, John Wiley & Sons, 2003.

[Casadei et Leconte, 2011]

F. Casadei, N. Leconte, Coupling finite elements and finite volumes by Lagrange multipliers for explicit dynamic fluid-structure interaction, Int. J. for Num. Meth. in Engrg., vol. 86(1): 1-17, 2011.

[Chaudhary et Bathe, 1986]

A. B. Chaudhary and K. J. Bathe, A solution method for static and dynamic analysis of three-dimensional contact problems with friction. Comput. Struct., vol. 24:855-873, 1986.

[Donea et al., 2004]

J. Donea, A. Huerta, J. Ph. Pontot, A. Rodriguez-Ferran, Arbitrary Lagrangian–Eulerian Methods in Encyclopedia of Computational Mechanics, John Wiley & Sons, 2004.

[Franquet, 2006]

E. Franquet, Modélisation Eulérienne des Ecoulements Multiphasiques en Présence d'Ondes de Choc, de Détonations et d'Interfaces Matérielles, Thèse de Doctorat, Université Aix-Marseille I, 2006.

[Gingold et Monaghan, 1983]

R. Gingold, J. Monaghan, Shock simulation by the particle method SPH. Journal of Computational Physics, vol. 52:374-389, 1983.

[Hetherington et Askes, 2009]

J. Hetherington, H. Askes, Penalty methods for time domain computational dynamics based on positive and negative inertia, Comput. Struct., vol. 87(23): 1474-1482, 2009.

[Hu, 1997]

N. Hu, A solution method for dynamic contact problems, Comput. Struct., vol. 63(6): 1053-1063, 1997.

[Hugues, 1983]

T. J. R. Hughes, Analysis of transient algorithms with particular reference to stability behaviour, Computational Methods for Transient Analysis, eds T. Belytschko and T. J. R. Hughes, 67-155, North Holland, 1983.

[Huněk, 1993]

I. Huněk, On a penalty formulation for contact-impact problems, Comput. Struct., vol. 48(2): 193-203, 1993.

[Newmark, 1959]

M. N. Newmark, A method of computation for structural dynamics, Proc. ASCE 85, EM3, 1959.

[Przemieniecki, 2000]

J. S. Przemieniecki, Mathematical Methods in Defense Analyses, American Institute of Aeronautics & Astronautics, 2000.

[Smith et Coit, 1997]

A. E. Smith, D. W. Coit, Constraint Handling Techniques - Penalty Functions, in Handbook of Evolutionary Computation, Chapter C5.2, Institute of Physics Publishing and Oxford University Press, Bristol U.K., 1997.

[Unger et al., 2007]

R. Unger, M. C. Haupt, P. Horst, Application of Lagrange multipliers for coupled problems in fluid and structural interactions, *Comput. Struct.*, vol. 85(11-14): 796-809, 2007.

[Vincent et al., 2011]

S. Vincent, Arthur Sarthou, J.-P. Caltagirone, F. Sonilhac, P. Février, C. Mignot, G. Pianet, Augmented Lagrangian and penalty methods for the simulation of two-phase flows interacting with moving solids. Application to hydroplaning flows interacting with real tire tread patterns, *J. of Comp.Phys.*, vol. 230(4): 956-983, 2011.

2. DEFINITION ET IMPLEMENTATION DE METHODES, DE MODELISATIONS ET DE COUPLAGES

2.1 REPRESENTATION ROBUSTE DE L'ENDOMMAGEMENT ET DE LA FISSURATION DES SYSTEMES MECANQUES SOUS CHARGEMENT EXTREME

Sous l'action de chargements brutaux à haute énergie couramment rencontrés en dynamique rapide, les structures subissent des dégradations importantes, dont la représentation met en défaut les approches continues classiques, notamment en raison de fortes évolutions dans la géométrie du système. C'est le cas par exemple lorsque des fissures se propagent sur de longues distances ou lorsque la structure subit une fragmentation importante, avec une prise en compte éventuellement prépondérante du contact entre les fragments.

Le présent sous-chapitre est ainsi consacré à la représentation des modes de ruine avancés, sur la base de techniques précises et proches de l'état de l'art au niveau local pour l'amorçage de la dégradation, associées à une représentation des phénomènes macroscopiques qui suivent la perte d'intégrité partielle ou totale de la structure.

2.1.1 Approche particulière pour les coques métalliques avec transition endommagement-déchirure

Ce travail de recherche figure dans la thèse de F. Caleyron [Caleyron, 2011], menée au LaMCoS de l'INSA Lyon sous la direction d'A. Combescure, avec un financement mixte CEA/EDF et un encadrement méthodologique et industriel assuré par l'auteur et S. Potapov (EDF). Cette thèse comporte un second volet dédié à l'interaction entre une coque ainsi endommagée et un fluide interne, détaillé au paragraphe B-2.2.1.

Le contexte industriel à l'origine de ces actions est le crash d'un avion suivi d'un incendie résultant de l'écoulement et de l'embrasement du carburant contenu dans ses ailes (cf. Figure 9, extraite, comme toutes les figures de ce paragraphe, de [Caleyron, 2011]). Il a été observé que cette seconde phase était à l'origine de chargements très sévères pour les structures environnantes concernées par le crash.

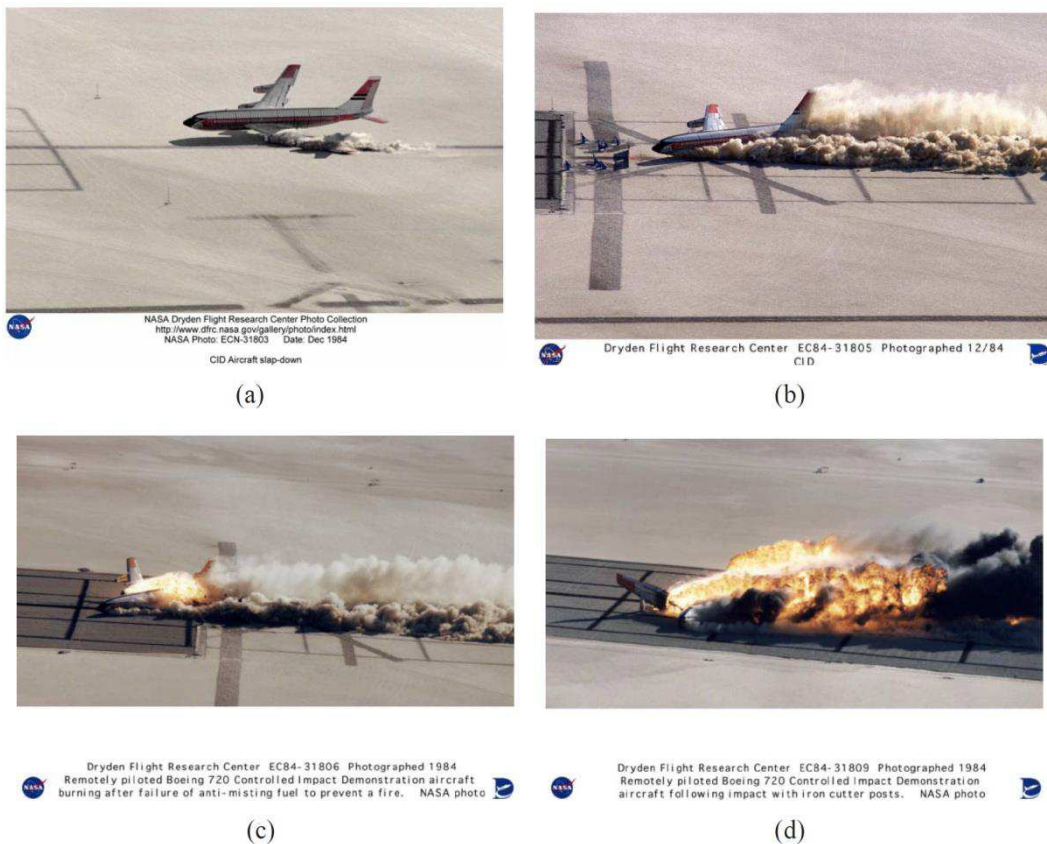


Figure 9 : Crash d'un avion et incendie

2.1.1.1 Formulation SPHC pour une coque : choix de l'approximation entre les particules

Le choix d'une approche particulière pour la représentation d'une coque métallique représentant l'enveloppe d'un réservoir de fluide est motivé par l'insertion nécessaire de discontinuités multiples lors de la déchirure de la structure sous impact. S'affranchir d'un maillage permet alors d'être toujours assuré de conserver la masse et la quantité de mouvement et d'éviter de fortes distorsions de certains éléments, pouvant conduire à une réduction excessive du pas de temps critique, voire à l'arrêt de la simulation. Pour une discussion sur ce sujet, se référer à la thèse de B. Maurel [Maurel, 2008], qui fait office de travail précurseur pour les concepts présentés dans ce paragraphe. On y trouve également deux éléments méthodologiques fondamentaux pour la conception d'une approche particulière fonctionnelle pour les coques.

1. Le problème connu d'instabilité en tension (*tensile instability* [Chen et al., 1999]) pour les solides est traité par l'utilisation d'une formulation en lagrangien total, évitant l'apparition d'ouvertures inopportunes dans le processus de réactualisation du voisinage des particules, acceptable uniquement pour les écoulements fluides où l'arrangement des particules varie fortement.
2. Le haut degré du système différentiel des équations de la mécanique du solide (voir le paragraphe 2.1.1.2), ainsi que la présence de modes de déformation à énergie nulle lorsque toutes les informations sont attachées aux particules seules (autre aspect associé à l'instabilité de tension), sont pris en compte via l'insertion des particules virtuelles, ou *stress points*, entre les particules physiques [Dyka et al., 1997] (voir la Figure 10).

Les déformations et les contraintes via l'intégration du comportement du matériau sont ainsi évaluées sur une grille décalée augmentant la précision et la stabilité de l'approche. Il convient de souligner que la gestion de la position des *stress points*, déduite de celle des particules physiques, est un point pratique délicat largement simplifié par la formulation en lagrangien total.

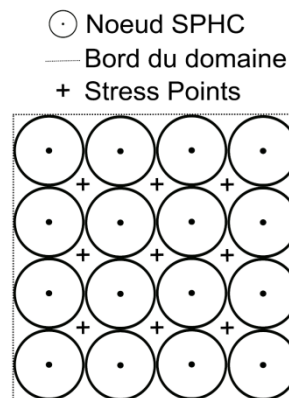


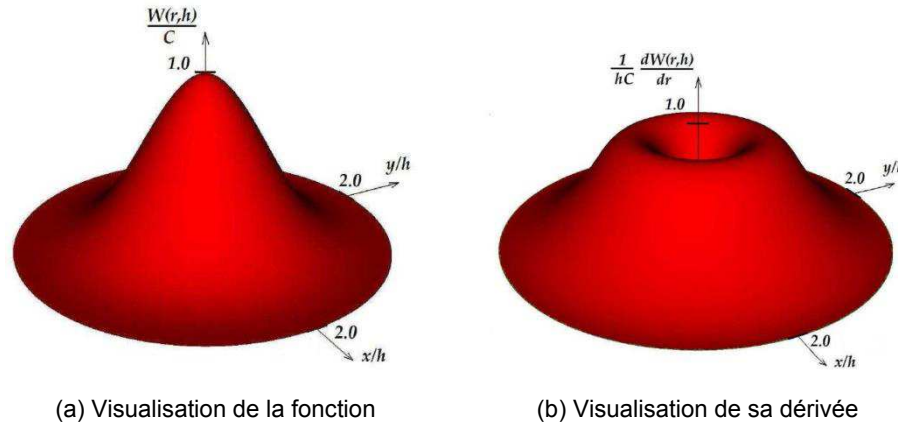
Figure 10 : Arrangement classique des particules SPHC et des *stress points*

Remarque :

La formulation en lagrangien total modifie légèrement l'expression des contraintes et des forces internes dans les systèmes (17-a) et (23). Les dérivées et les intégrations sont faites sur la configuration initiale et non sur la configuration finale, ce qui impose de transporter les contraintes de Cauchy via le gradient de la transformation, pour faire apparaître les contraintes de Piola-Kirchoff (voir ci-dessous).

Les caractéristiques du système matriciel à résoudre ne sont pas modifiées par ce changement ponctuel de formulation.

Par ailleurs, si l'approche conserve le nom SPH, les fonctions d'interpolation entre les particules ne sont pas directement dérivées de la fonction noyau classique pour cette approche (nommée *spline B3* [Gingold et Monaghan, 1983], cf. Figure 11).



$$w(r,h) = \begin{cases} \frac{3}{2} \left[\frac{2}{3} - \left(\frac{r}{h}\right)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{r}{h}\right)^3 \right] & \text{pour } r \leq h \\ \frac{1}{4} \left(2 - \frac{r}{h}\right)^3 & \text{pour } h \leq r \leq 2h \\ 0 & \text{pour } r \geq 2h \end{cases} \quad (31)$$

(c) Expression de la fonction

Figure 11 : Fonction *spline B3* à support compact de rayon $2h$

Au contraire, une approximation selon la méthode des moindres carrés mobiles (*moving least square* ou *MLS*) est mise en œuvre [Dilts, 1999], permettant de construire des fonctions de forme consistantes à un ordre donné, rejoignant aussi, avec plus de généralité, les approches de type *Reproducing Kernel Particle Methods* [Liu et al., 1995]. A partir d'un champ \mathbf{q} connu en un nombre discret n de points, on construit l'approximation suivante :

$$\hat{\mathbf{q}}(\mathbf{x}, \tilde{\mathbf{x}}) = {}^t \mathbf{P}(\mathbf{x}) \mathbf{a}(\tilde{\mathbf{x}}) \quad (32)$$

où \mathbf{P} est une base polynomiale du degré souhaité,

\mathbf{a} est un vecteur de poids, un par terme de la base polynomiale, dont la valeur varie avec l'espace (d'où le qualificatif de mobile).

Les poids optimaux sont obtenus par la minimisation de la distance entre l'approximation et le champ de référence au niveau des points d'évaluation de coordonnées \mathbf{x}_i :

$$J(\tilde{\mathbf{x}}) = \sum_{i=1}^n [{}^t \mathbf{P}(\mathbf{x}_i) \mathbf{a}(\tilde{\mathbf{x}}) - \mathbf{q}_i]^2 w_i(\tilde{\mathbf{x}}) \text{ avec } \mathbf{q}_i = \mathbf{q}(\mathbf{x}_i)$$

$$\frac{\partial J}{\partial \mathbf{a}}(\tilde{\mathbf{x}}) = 0 \Leftrightarrow \begin{cases} \mathbf{A}(\tilde{\mathbf{x}}) \mathbf{a}(\tilde{\mathbf{x}}) = \mathbf{B}(\tilde{\mathbf{x}}) \mathbf{q}_i \\ \mathbf{A}(\tilde{\mathbf{x}}) = \sum_{i=1}^n w_i(\tilde{\mathbf{x}}) \mathbf{P}(\mathbf{x}_i) {}^t \mathbf{P}(\mathbf{x}_i) \\ \mathbf{B}(\tilde{\mathbf{x}}) = [w_1(\tilde{\mathbf{x}}) \mathbf{P}(\mathbf{x}_1) \quad \dots \quad w_n(\tilde{\mathbf{x}}) \mathbf{P}(\mathbf{x}_n)] \end{cases} \quad (33)$$

On obtient les fonctions de forme associées à chaque particule :

$$\hat{\mathbf{q}}(\tilde{\mathbf{x}}) = \Phi(\tilde{\mathbf{x}}) [\mathbf{q}(\mathbf{x}_1) \quad \dots \quad \mathbf{q}(\mathbf{x}_n)]$$

$$\Phi(\tilde{\mathbf{x}}) = {}^t \mathbf{P}(\tilde{\mathbf{x}}) \mathbf{A}(\tilde{\mathbf{x}})^{-1} \mathbf{B}(\tilde{\mathbf{x}}) \quad (34)$$

La distance choisie dans [Caleyron, 2011] est une norme L^2 pondérée. Le choix de la *spline B3* pour cette fonction de pondération assure une continuité C^2 pour les fonctions de forme. La résolution du système donnant les poids \mathbf{a} est un élément clé de la méthode, dont il faut maîtriser l'existence de la solution (en ayant plus de points d'évaluation que de termes dans la base polynomiale), et le conditionnement. Pour des bases riches, le calcul des fonctions de forme peut devenir coûteux. L'utilisation d'une approche en lagrangien total où les

fonctions de forme sont calculées une seule fois sur la configuration initiale de référence en est alors d'autant plus avantageuse.

Pour conclure sur les techniques d'approximations, le choix des fonctions de forme *MLS* appelle deux commentaires importants.

1. Les fonctions *MLS* construisent une approximation d'un champ donné, et non une interpolation, comme c'est le cas lors de l'utilisation directe de la *spline B3* pour étendre les champs entre les particules.

$$\text{En particulier : } \Phi_i(\mathbf{x}_i) \neq 1 \text{ et } \Phi_i(\mathbf{x}_{j \neq i}) \neq 0 \quad (35)$$

Une approche particulière totalement libre de maillage supposant une résolution forte de l'équilibre dynamique par collocation (par opposition à une formulation variationnelle faible reposant sur une intégration), cela demande un soin particulier pour l'imposition des conditions aux limites essentielles.

2. Les fonctions de forme ainsi construites vérifient la partition de l'unité, à savoir :

$$\sum_{i=1}^n \Phi_i(\mathbf{x}) = 1 \quad (36)$$

2.1.1.2 Formulation SPHC pour une coque : cinématique, équilibre local et discrétisation

La cinématique de coque (ou plus exactement de plaque, avec une confusion classique entre les appellations supposant une courbure modérée de la structure à l'état initial) est issue de la théorie courante de Mindlin-Reissner, \mathbf{x}_m désignant pour un point donné les coordonnées d'un point de référence sur la fibre neutre et h la distance à la cette fibre neutre selon la normale :

$$\begin{aligned} \mathbf{x} &= \mathbf{x}_m(\mathbf{x}_{m_0}, t) + h\mathbf{n}(\mathbf{x}_{m_0}, t) \\ \mathbf{q} &= \mathbf{u}_m(\mathbf{x}_{m_0}, t) + h\Delta\mathbf{n}(\mathbf{x}_{m_0}, t) \\ \mathbf{q} &= \mathbf{x} - \mathbf{x}_0 ; \mathbf{q}_m = \mathbf{x}_m - \mathbf{x}_{m_0} ; \Delta\mathbf{n} = \mathbf{n} - \mathbf{n}_0 \end{aligned} \quad (37)$$

où l'indice 0 désigne la configuration initiale.

La rotation de la normale (ou pseudo-normale) par rapport à la fibre neutre permet la prise en compte dans la cinématique des déformations de cisaillement transverse dans l'épaisseur de la coque.

Des repères locaux sont utilisés pour écrire les équations sur la coque, représentés sur la Figure 12 et tels que :

$$\mathbf{x} = {}^t\mathbf{R}_L \begin{bmatrix} x_L \\ y_L \\ h \end{bmatrix} \quad (38)$$

où \mathbf{R}_L est la matrice de passage du repère global au repère local, dont la troisième direction coïncide avec la normale à la coque.

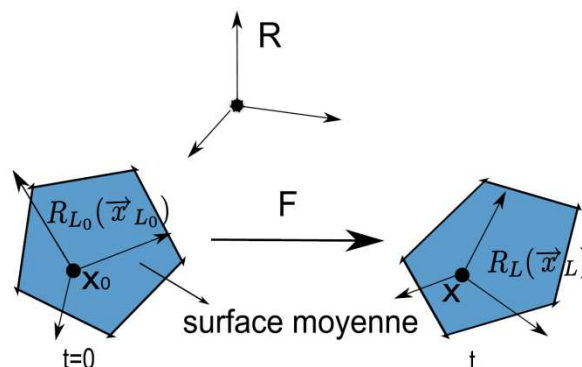


Figure 12 : Définition des repères locaux

On donne par l'intermédiaire de la Table 12 la mesure des déformations pour la coque ainsi modélisée :

| Gradient de la transformation | |
|--|--|
| $\mathbf{F} = \mathbf{F}_L \mathbf{R}_{L_0} = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \begin{bmatrix} x_{L_0} \\ y_{L_0} \\ h_0 \end{bmatrix}} \mathbf{R}_{L_0} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x_m}{\partial x_{L_0}} & \frac{\partial x_m}{\partial y_{L_0}} & n_x \\ \frac{\partial y_m}{\partial x_{L_0}} & \frac{\partial y_m}{\partial y_{L_0}} & n_y \\ \frac{\partial z_m}{\partial x_{L_0}} & \frac{\partial z_m}{\partial y_{L_0}} & n_z \end{bmatrix} \quad (39-a)$ | |
| Mesure des déformations | |
| Mesure de Green-Lagrange dans \mathbf{R}_{L_0} | Mesure d'Almansi-Euler dans \mathbf{R}_L |
| $\mathbf{E}_{L_0} = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial \mathbf{q}_{L_0}}{\partial \mathbf{x}_{L_0}} \right) + {}^t \left(\frac{\partial \mathbf{q}_{L_0}}{\partial \mathbf{x}_{L_0}} \right) + \left(\frac{\partial \mathbf{q}_{L_0}}{\partial \mathbf{x}_{L_0}} \right) \left(\frac{\partial \mathbf{q}_{L_0}}{\partial \mathbf{x}_{L_0}} \right) \right] \quad (39-b)$ $= \mathbf{E}_{L_0}^m + h \mathbf{E}_{L_0}^b$ <p>(termes d'ordre supérieur en h négligés dans le développement du tenseur)</p> | $\boldsymbol{\varepsilon}_L = \mathbf{R}_L ({}^t \mathbf{F}_L^{-1}) \mathbf{E}_{L_0} \mathbf{F}_L^{-1} ({}^t \mathbf{R}_L) \quad (39-c)$ |
| | <i>Déformations de membrane et de cisaillement transverse constantes dans l'épaisseur de la coque</i> |
| | $\boldsymbol{\varepsilon}_L^{\text{memb}} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\varepsilon}_{L_{xx}}^m \\ \boldsymbol{\varepsilon}_{L_{yy}}^m \\ \boldsymbol{\varepsilon}_{L_{xy}}^m \end{bmatrix}; \quad \boldsymbol{\varepsilon}_L^{\text{shear}} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\varepsilon}_{L_{xz}}^m \\ \boldsymbol{\varepsilon}_{L_{yz}}^m \\ 0 \end{bmatrix} \quad (39-d)$ |
| | <i>Déformations de flexion linéaires dans l'épaisseur</i> |
| | $\boldsymbol{\varepsilon}_L^{\text{bend}} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\varepsilon}_{L_{xx}}^b \\ \boldsymbol{\varepsilon}_{L_{yy}}^b \\ \boldsymbol{\varepsilon}_{L_{xy}}^b \end{bmatrix} \quad (39-e)$ |

Table 12 : Mesure des déformations pour la cinématique de coque

On déduit des déformations les contraintes et les équations du mouvement, données sur la Table 13.

| Contraintes de Cauchy dans le repère local sur la base du partitionnement des déformations | | |
|---|--|--|
| $\boldsymbol{\sigma}_L^{\text{memb}} = \mathbf{C}(\boldsymbol{\varepsilon}_L^{\text{memb}}); \quad \boldsymbol{\sigma}_L^{\text{bend}} = \mathbf{C}(\boldsymbol{\varepsilon}_L^{\text{bend}}); \quad \boldsymbol{\sigma}_L^{\text{shear}} = \mathbf{G}(\boldsymbol{\varepsilon}_L^{\text{shear}}) \quad (40-a)$ | | |
| Intégration dans l'épaisseur e de la coque | | |
| Efforts de membrane | Efforts de cisaillement transverse | Moments de flexion |
| $\mathbf{N}_{ij} = \int_{-e/2}^{e/2} \boldsymbol{\sigma}_{L_{ij}}^{\text{memb}} d\xi = e \boldsymbol{\sigma}_{L_{ij}}^{\text{memb}} \quad (40-b)$ | $\mathbf{T}_i = \int_{-e/2}^{e/2} \boldsymbol{\sigma}_{L_{iz}}^{\text{shear}} d\xi = e \boldsymbol{\sigma}_{L_{iz}}^{\text{shear}} \quad (40-c)$ | $\mathbf{B}_{L_{ij}} = \int_{-e/2}^{e/2} \xi \boldsymbol{\sigma}_{L_{ij}}^{\text{bend}} d\xi$ $= \frac{e^3}{12} \boldsymbol{\sigma}_{L_{ij}}^{\text{bend}} \quad (40-d)$ |

| Equations d'équilibre dans le repère local \mathbf{R}_L | |
|---|---|
| Membrane et cisaillement transverse | Flexion |
| $\text{div}_L(\boldsymbol{\Sigma}_L) = \rho \ddot{\mathbf{q}}_L$ $\boldsymbol{\Sigma}_L = \begin{bmatrix} \mathbf{N}_{xx} & \mathbf{N}_{xy} & \mathbf{T}_x \\ \mathbf{N}_{xy} & \mathbf{N}_{yy} & \mathbf{T}_y \\ \mathbf{T}_x & \mathbf{T}_y & 0 \end{bmatrix} \quad (40-e)$ <p>(l'indice L signifie une dérivation par rapport aux coordonnées locales)</p> | $\mathbf{L}_L \text{div}_L(\mathbf{B}_L) + \boldsymbol{\Pi} = I \ddot{\boldsymbol{\theta}}_L$ $\mathbf{L}_L = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}; \quad \boldsymbol{\Pi} = \begin{bmatrix} e \boldsymbol{\sigma}_{L_{xz}}^{\text{shear}} \\ -e \boldsymbol{\sigma}_{L_{yz}}^{\text{shear}} \\ 0 \end{bmatrix}; \quad I = \rho \frac{e^3}{12} \quad (40-e)$ |
| Equations d'équilibre dans le repère global | |
| Membrane et cisaillement transverse | Flexion |
| $\text{Div}(\mathbf{P}) = \rho_0 \ddot{\mathbf{q}}$ $\mathbf{P} = \mathbf{J}^t \mathbf{R}_L \boldsymbol{\Sigma}_L \mathbf{R}_L^t \mathbf{F}^{-1} \quad (40-f)$ $\mathbf{J} = \det(\mathbf{F})$ <p>(la notation Div signifie une dérivation par rapport aux coordonnées initiales)</p> | $\text{Div}(\boldsymbol{\Omega}) + \boldsymbol{\Pi}_0 = I_0 \ddot{\boldsymbol{\theta}}$ $\boldsymbol{\Omega} = \mathbf{J}^t \mathbf{R}_L \mathbf{L}_L \mathbf{B}_L \mathbf{R}_L^t \mathbf{F}^{-1} \quad (40-g)$ $\boldsymbol{\Pi}_0 = \mathbf{J}^t \mathbf{R}_L \boldsymbol{\Pi}$ |

Table 13 : Contrainte et équations du mouvement pour la cinématique de coque

Une seule couche de particule est utilisée pour représenter le plan moyen de la coque et chaque particule peut être vue comme un cylindre d'axe normal à la coque, de hauteur l'épaisseur e de la coque et de diamètre D fonction de la finesse de discrétisation souhaitée (voir Figure 13).

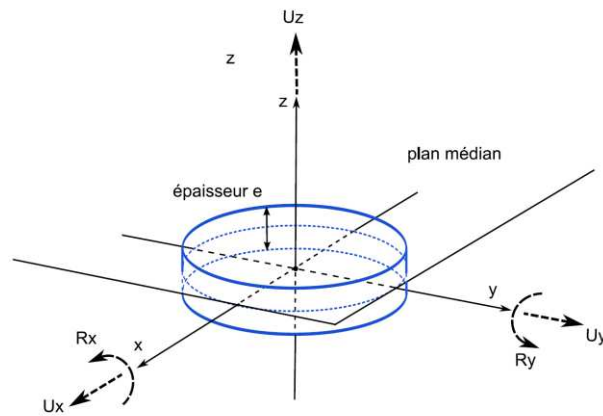


Figure 13 : Particule SPHC

Chaque particule a 5 degrés de libertés, 3 translations pour la position de la fibre neutre et 2 rotations pour la rotation de la normale. La rotation autour de cette normale (*drilling rotation*) est classiquement laissée libre. L'agencement entre les particules et les stress points est celui de la Figure 10.

Les fonctions de forme *MLS* sont construites dans le repère local à l'instant initial \mathbf{R}_{L_0} puis ramenées dans le repère global, de telle sorte que l'approximation du champ de déplacement et de son gradient est utilisée pour calculer les déformations et les contraintes au niveau de chaque *stress points* :

$$\hat{\mathbf{q}}(\tilde{\mathbf{x}}) = \sum_{i=1}^{N_p} \Phi_i(\tilde{\mathbf{x}}) \mathbf{q}_i \quad (41)$$

$$\nabla \hat{\mathbf{q}}(\tilde{\mathbf{x}}) = \sum_{i=1}^{N_p} \nabla \Phi_i(\tilde{\mathbf{x}}) \mathbf{q}_i$$

où N_p est le nombre de particules physiques dans le voisinage d'un *stress point* donné.

Les équations d'équilibre discrètes, colocalisées sur les particules physiques, sont alors :

$$\begin{aligned}\rho_0 \ddot{\mathbf{q}} &= \sum_{i=1}^{N_s} \mathbf{P}_i \nabla \Phi_i \\ I_0 \ddot{\boldsymbol{\theta}} &= \sum_{i=1}^{N_s} \mathbf{Q}_i \nabla \Phi_i + \boldsymbol{\pi}_0\end{aligned}\quad (42)$$

où N_s est le nombre de *stress points* dans le voisinage d'une particule physique donnée.

La discrétisation en temps repose sur le schéma explicite des différences centrées présenté précédemment, sans modification significative du processus de résolution.

La rotation des pseudo-normales dans le temps est donnée par :

$$\mathbf{n}_i^{n+1} = \mathbf{G}^{n+1} \mathbf{n}_i \quad (43)$$

La matrice de passage \mathbf{G} est construite incrémentalement depuis l'identité à l'instant initial :

$$\mathbf{G}^{n+1} = (\Delta \mathbf{G}) \mathbf{G}^n \quad (44)$$

où $\Delta \mathbf{G}$ est construite à la partir des rotations infinitésimales autour des axes du repère local $\hat{\boldsymbol{\theta}} \Delta t$.

A partir du système (42), le pas de temps critique dépend de l'épaisseur de la coque au niveau de chaque particule [Caleyron, 2011] et tend donc vers 0 quand cette épaisseur tend vers 0, ce qui pénalise fortement les calculs avec des coques très minces. Cette problématique, connue à l'identique pour une discrétisation par éléments finis [Hugues et al., 1978], est contournée par une modification de l'inertie de rotation, bénéficiant du fait que l'énergie associée à ces rotations est faible, laissant une latitude pour adapter leur inertie sans modifier le comportement du système mécanique. La formule utilisée pour l'inertie, faisant disparaître la dépendance du pas de temps critique à l'épaisseur de la coque, est alors :

$$I = \max \left(\rho \frac{e^3}{12}, \rho \frac{eD^2}{12} \right) \quad (45)$$

Des travaux figurent dans [Caleyron, 2011] sur le verrouillage en cisaillement transverse potentiel de la formulation proposée, sans aboutir à une solution curative totalement générique mais sans que ce phénomène ne devienne prépondérant dans les simulations réalisées.

2.1.1.3 Formulation SPHC pour une coque : viscosité et conditions aux limites

Pour améliorer la stabilité de la méthode, deux termes visqueux sont ajoutés, l'un pour les composantes de membrane et l'autre pour les composantes de cisaillement transverse, reprenant les concepts de [Gingold et Monaghan, 1983]. Une dissipation supplémentaire est appliquée aux vitesses de rotation, par l'intermédiaire d'un filtrage sur la pseudo-normale \mathbf{n} [Swegle et al., 1994][Wen et al., 1994].

Dans tous les cas, un soin particulier porte sur le choix des coefficients pour éviter une dissipation d'énergie excessive. On reporte sur la Table 14 l'expression des termes visqueux et les valeurs choisies pour les coefficients dans les applications (ε est un paramètre évitant les divisions par zéro, toujours petit).

| Termes de membrane | Termes de cisaillement transverse | Vitesses de rotation |
|--|--|--|
| <i>Expression du terme visqueux</i> | | |
| Pour un couple de particules (i,j) : $\pi_{ij} = \rho_{ij} \begin{cases} -\alpha c \mu_{ij} + \beta h^2 \mu_{ij}^2 & \text{si } \mu_{ij} < 0 \\ 0 & \text{si } \mu_{ij} \geq 0 \end{cases}$ $\rho_{ij} = \frac{\rho_i + \rho_j}{2} \quad (46-a)$ $\mu_{ij} = \frac{(\dot{\mathbf{q}}_i - \dot{\mathbf{q}}_j) \cdot (\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i)}{\ \mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i\ ^2 + \varepsilon}$ | Pour un couple de particules (i,j) : $\tau_{ij} = \rho_{ij} \begin{cases} -\gamma c \psi_{ij} & \text{si } \psi_{ij} < 0 \\ 0 & \text{si } \psi_{ij} \geq 0 \end{cases}$ $\psi_{ij} = \frac{(\dot{\mathbf{q}}_i - \dot{\mathbf{q}}_j) \cdot \mathbf{n}_{ij}}{\ \mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i\ + \varepsilon} \quad (46-b)$ $\mathbf{n}_{ij} = \frac{\mathbf{n}_i + \mathbf{n}_j}{2}$ | Filtrage de la normale : $\hat{\mathbf{n}}_i = \mathbf{n}_i + \eta \left(\frac{\sum_{j=1}^{N_s} m_j W_{ij} \mathbf{n}_j}{\sum_{j=1}^{N_s} m_j W_{ij}} - \mathbf{n}_i \right) \quad (46-c)$ $m_i = \rho_i V_i$ $W_{ij} = w(\ \mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\ , h)$ |

| Valeurs numériques retenues pour les coefficients | | |
|---|-----------------|--------------|
| $\alpha = 0.05 ; \beta = 0.1$ | $\gamma = 0.05$ | $\eta = 0.1$ |

Table 14 : Viscosité pour la stabilisation de l'approche SPHC

Pour imposer les conditions aux limites essentielles (principalement les blocages), il est nécessaire de contraindre plusieurs rangées de particules, et donc de construire le modèle discret en conséquence, pour contourner le fait que, dans la majorité des méthodes sans maillage, les fonctions de forme ne satisfont pas la condition de Kronecker (i.e. $\hat{\mathbf{q}}(\mathbf{x}_i) \neq \mathbf{q}_i$).

Pour les conditions aux limites naturelles, la difficulté rencontrée est propre aux approches fortes pour la résolution des équations d'équilibre (pour les approches faibles, ces conditions sont automatiquement vérifiées). L'amélioration de l'approximation des champs entre les particules à l'aide de fonctions *MLS* rend indispensable la définition de condition de bords libres spécifiques, alors que l'interpolation simple par la *spline B3* produirait sur le bord une condition approchée utilisable, en raison du voisinage incomplet [Caleyron, 2011]. Il s'agit d'un point crucial pour la stratégie proposée, dont la finalité est la représentation de la déchirure et donc l'apparition de bords libres en cours de calcul dont il faut assurer la stabilité du point de vue de la solution globale.

En l'absence de consensus sur le sujet, l'approche mise en œuvre, éprouvée sur de nombreux tests complexes, tient finalement en 4 points.

1. Les bords du domaine sont des particules physiques (et non des *stress points*) [Vignjevic et al., 2000] : il n'est ainsi pas nécessaire de calculer les contraintes sur les bords.
2. Les nœuds de bord sont identifiés en calculant l'approximation par la fonction SPH classique du champ unité :

$$\beta_i = \sum_{j=1}^{N_v} w(\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|, h) \mathcal{S}_j \quad (47)$$

Les nœuds de bord sont ceux pour lesquels cette approximation n'est pas consistante, soit $\beta_i < \beta_c$, la valeur critique étant donnée par une série d'expérimentations numériques (de l'ordre de 0.6 à partir des cas de [Caleyron, 2011]).

Cette détection fonctionne bien pour des bords présentant une régularité suffisante. Pour les bords issus d'un processus de déchirure, une approche plus robuste est construite (cf. paragraphe suivant).

3. Les nœuds de bord sont ensuite inclus dans leur propre voisinage, pour réduire la distorsion des fonctions *MLS* à proximité des bords.
4. Enfin, la condition appliquée est plus forte que la condition classique de nullité de l'effort des efforts normaux au bord, qui demande la connaissance de la normale. On impose directement la nullité du tenseur des efforts de membranes et de cisaillement transverse \mathbf{P} et du tenseur des moments de flexion $\mathbf{\Omega}$ [Maurel, 2008].

2.1.1.4 Transition endommagement-fissuration pour la représentation à l'aide de particules SPHC

On suppose que le modèle du matériau constitutif de la plaque est en mesure de prendre en compte de manière satisfaisante la plasticité (pour les métaux), l'endommagement, en contrôlant la dépendance à la discrétisation spatiale, et le couplage entre les deux.

La rupture apparaît alors comme le dépassement d'un seuil d'endommagement critique au niveau d'un *stress point* (où est intégré le comportement du matériau). Si on associe un Volume Élémentaire Représentatif (VER) à chaque *stress point*, une fissure est alors le lieu géométrique des VER associés aux *stress points* rompus (voir la Figure 14), ce qui rapproche la méthode proposée de celle dite des *cracking particles* [Belytschko et al., 2003][Rabczuk et al., 2007].

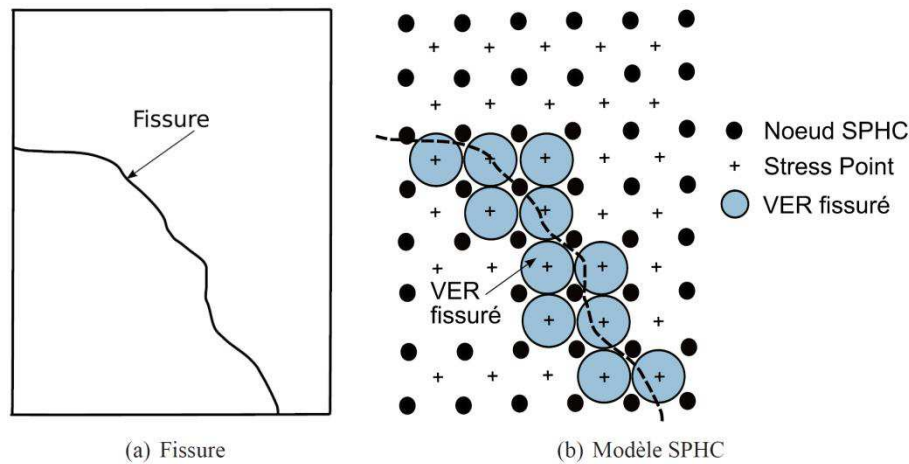
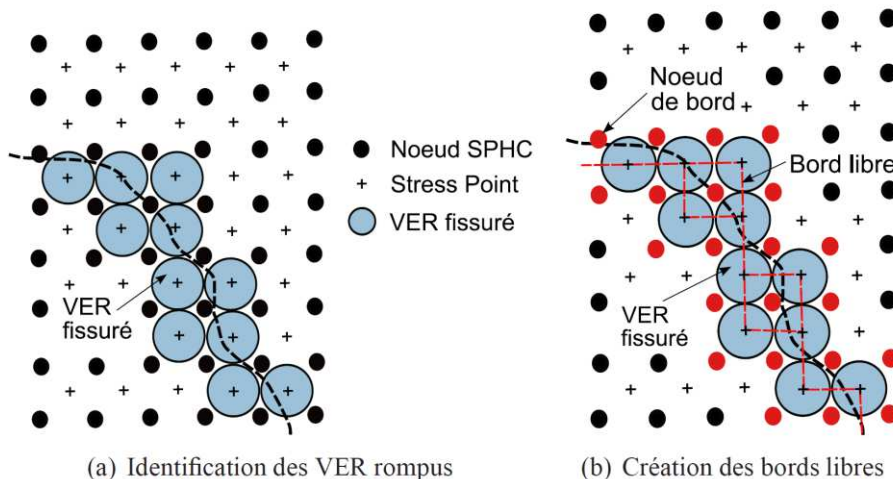


Figure 14 : Représentation d'une fissure par l'approche SPHC

Au contraire d'un traitement possible de la fissuration à l'aide d'un modèle d'endommagement consistant à mettre simplement à zéro la rigidité des entités rompues, conduisant fréquemment à des difficultés numériques pour la poursuite du calcul, il est choisi d'introduire des discontinuités fortes dans le modèle une fois le seuil d'endommagement localement dépassé.

Cela signifie en particulier que de nouveaux bords libres apparaissent au voisinage des VER des *stress points*, formant progressivement les lèvres d'une (ou plusieurs) macro-fissures (cf. Figure 15). La détection des bords libres par la méthode du paragraphe précédent s'avérant insuffisamment précise quand les *stress points* rompus sont simplement retirés du voisinage de particules physiques, l'approche suivante lui est préférée, établissant une contrainte courante sur la technique de maillage du modèle SPHC.

On suppose que les particules physiques sont au centre des cellules d'une partition de Voronoï de l'espace (espace bidimensionnel sur la surface de la coque). Les *stress points* se trouvent alors au centre des triangles de Delaunay associés. On identifie alors directement comme particule de bord tout sommet d'un triangle de Delaunay dont le *stress point* central est rompu. Cela revient à discrétiser la fissure par les cellules de Voronoï, ce qui conduit automatiquement à l'obtention de bords libres conformes au maillage. La stratégie est détaillée sur la Figure 15.



(a) Identification des VER rompus

(b) Création des bords libres

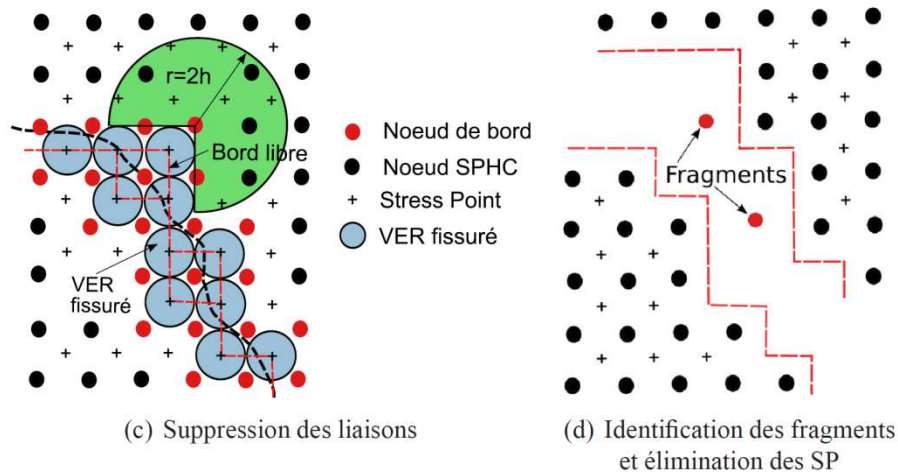


Figure 15 : Insertion de discontinuités fortes dans un modèle SPHC

Les liaisons entre particules de part et d'autre d'un VER rompu sont supprimées à l'aide d'une méthode de visibilité (i.e. on détruit un lien qui traverse un VER rompu) produisant des résultats robustes malgré sa simplicité [Caleyron, 2011] (voir Figure 16).

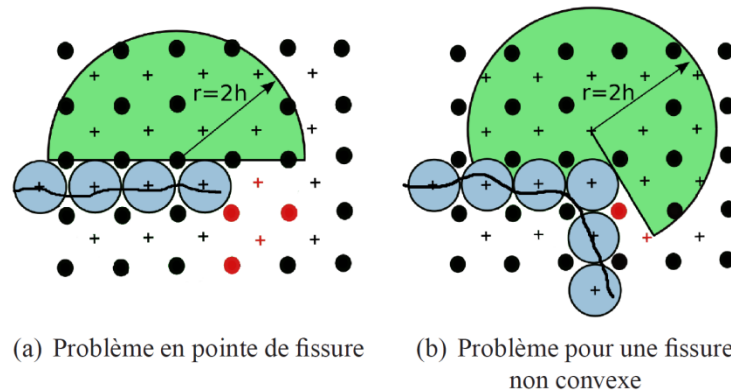


Figure 16 : Suppression par méthode de visibilité : cas pathologiques aux conséquences limitées pour l'approche SPHC

La topologie du système étant modifiée par l'introduction des discontinuités fortes, il est nécessaire de mettre à jour les fonctions de forme *MLS* après chaque nouvelle rupture d'un (ou plusieurs) *stress point(s)*. Dans le cas où le voisinage de certaines particules devient pauvre (en présence de fragmentation notamment), il ne peut plus y avoir assez de points d'évaluation pour maintenir le degré de la base polynomiale associée à l'approximation *MLS* (cf. paragraphe 2.1.1.1). Il est alors nécessaire de dégrader l'ordre des fonctions *MLS*, ce qui peut aussi être imposé par un agencement distordu des points d'évaluation rendant impossible la résolution du système (33) ou si la consistance des fonctions *MLS* obtenues est mauvaise. Des fonctions d'approximation d'ordres différents sont finalement amenées à être utilisées simultanément dans un même modèle, ce qui demande une vigilance particulière pour ne pas créer d'artefacts dans la solution et ne pose pas de problème dans le cas présent où on passe uniquement de l'ordre 1 à l'ordre 0 [Caleyron, 2011].

Enfin, pour prévenir l'apparition d'instabilités sur les bords libres d'une fissure après une succession de ruptures brutales, un filtrage supplémentaire sur les vitesses de rotation des particules de bord est appliqué selon la formule (46-c), avec un paramètre de l'ordre de 1%. Il en résulte une stabilité de la solution assurée au prix d'une faible dissipation d'énergie pour des temps de simulation longs.

2.1.1.5 Validation et illustration de la méthode SPHC pour la transition endommagement-fissuration

Les simulations de ce paragraphe, tout comme la majorité des concepts théoriques des paragraphes précédents, font l'objet de la publication [Caleyron et al. (1), 2013]. Les exemples sont nombreux et détaillés et il est hors du propos du présent mémoire de les reprendre en intégralité. Au contraire, on reporte sur la Table 15 les caractéristiques et des visualisations significatives des cas de calcul les plus représentatifs, en soulignant leur place dans la démonstration de la validité de la méthode proposée.

Branchements de fissure et convergence en maillage

Dispositif (éléments principaux)

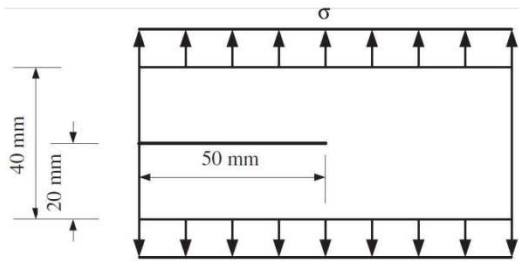


Figure 17 : Traction d'une plaque rectangulaire fissurée [Zi et al., 2007]

Matériau : béton élastique endommageable

Contrainte de traction : 1 MPa

Résultats de référence

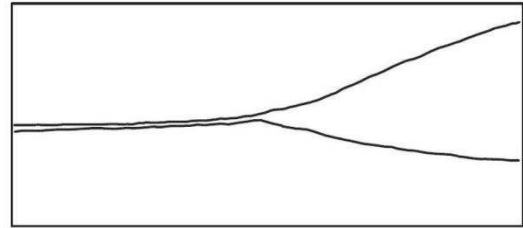
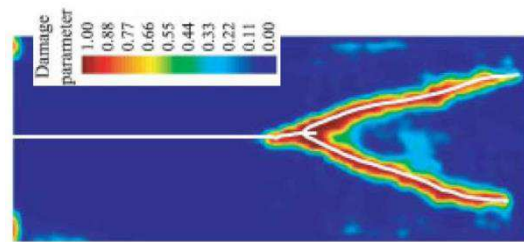


Figure 18 : Trajet de fissuration expérimental [Ramulu et Kobayashi, 1985]

Figure 19 : Trajet de fissuration simulé avec une approche spécifique par *phantom nodes* [Song et al., 2006]

Résultats SPHC (17200 particules physiques, 16915 stress points)

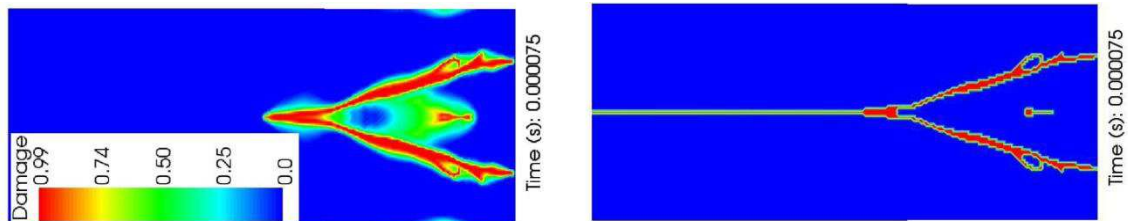


Figure 20 : Endommagement et fissuration avec l'approche SPHC (visualisation sur un maillage de Delaunay)

Commentaires et contribution à la validation de l'approche SPHC

Le profil de fissuration et le branchement sont bien retrouvés. La vitesse de propagation des fissures est conforme à celle des résultats de référence.

Une étude de sensibilité est menée sur les paramètres de la loi d'endommagement. Si les branches principales sont très stables, le petit artefact observé entre les deux branches avec SPHC est plus ou moins important, pouvant se transformer dans certains cas en une fissure supplémentaire (cf. [Caleyron et al. (1), 2013]).

Perforation d'une plaque par un projectile hémisphérique : phénomène de pétalisation

Dispositif (éléments principaux)

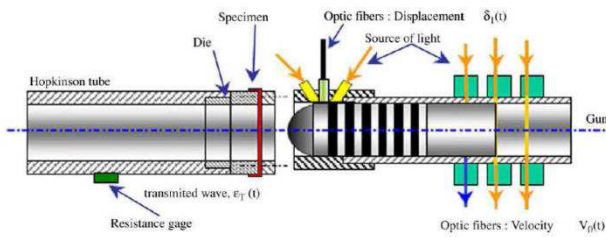


Figure 21 : Perforation d'une plaque à haute vitesse [Rusinek et al., 2009]

Matériaux : acier trempé (impacteur), acier doux (cible)

Vitesses d'impact : de 40 à 300 m/s

Situation de contact : diamètre impacteur : 22 mm, section utile cible : 30 mm, lubrification pour la pétalisation (frottement nul)

Résultats de référence

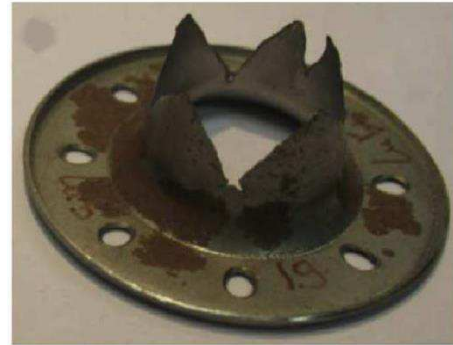


Figure 22 : Vue de la cible après pétalisation

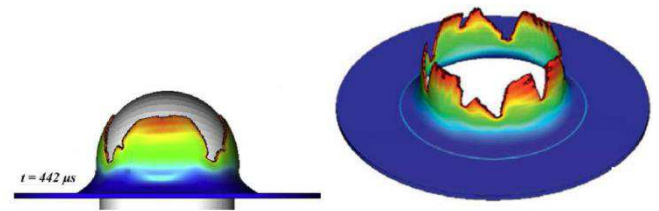


Figure 23 : Simulation éléments finis avec érosion sur critère en déformation plastique pour des vitesses d'impact de 50 m.s⁻¹ (à gauche) et 75 m.s⁻¹ (à droite) [Rusinek et al., 2009]

Résultats SPHC (12892 particules physique, 12841 stress points)

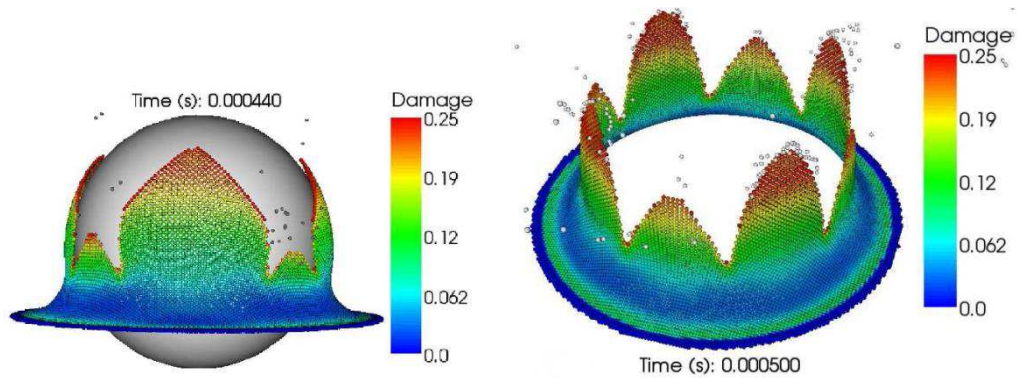


Figure 24 : Simulation de la pétalisation avec l'approche SPHC pour des vitesses d'impact de 50 m.s⁻¹ (à gauche) et 75 m.s⁻¹ (à droite)

Commentaires et contribution à la validation de l'approche SPHC

Comme précédemment, l'expérience et les résultats numériques de référence sont bien retrouvés et le phénomène de pétalisation est parfaitement reproduit. Il est notoire que ces simulations sont très sensibles aux paramètres matériaux, ce qui rend le recalage complexe en raison des paramètres manquants à estimer dans la loi élasto-plastique endommageable utilisée pour les calculs SPHC.

Les instants de rupture de la cible (i.e. première rupture d'un *stress point* pour SPHC) recalent bien l'expérience et les calculs antérieurs.

Fragmentation d'un cylindre métallique avec explosif interne : démonstration de la stabilité de la fragmentation

Dispositif (éléments principaux) et modèle de calcul

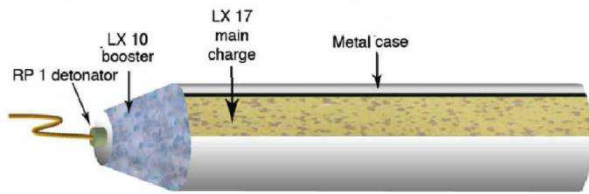


Figure 25 : Fragmentation d'un cylindre [Goto et al., 2008]

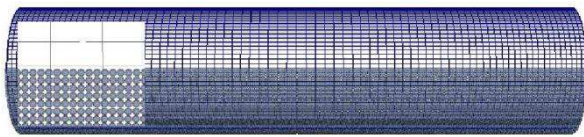


Figure 26 : Modèle numérique : éléments finis pour l'explosif, SPHC pour le cylindre

Matériau pour l'explosif : gaz JWL avec amorçage de la détente fonction de la distance à la charge

Matériau pour le cylindre : acier élasto-plastique endommageable

Contact entre le gaz EF et le cylindre SPHC.

Comparaison calcul/expérience pour la fragmentation

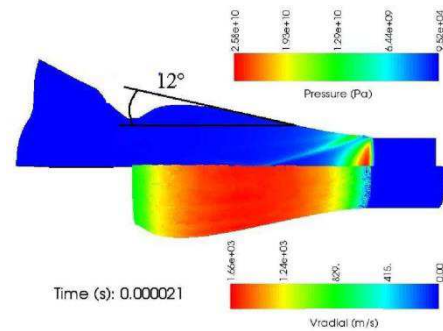


Figure 27 : Vitesse d'expansion radiale et pression dans l'explosif

Dans l'expérience, il est observé que le cylindre forme un cône d'angle environ 11° pendant son expansion.

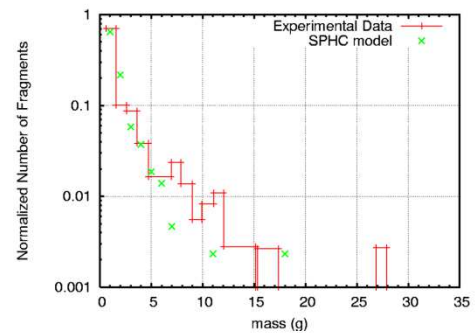


Figure 28 : Distribution des fragments par masse

Le calcul prédit la création d'un nombre fini de fragments (i.e. très inférieur au nombre de particules), dont la distribution suit correctement l'expérience.

Visualisation de la fragmentation (122 100 particules physiques et 121 800 stress points pour le cylindre)

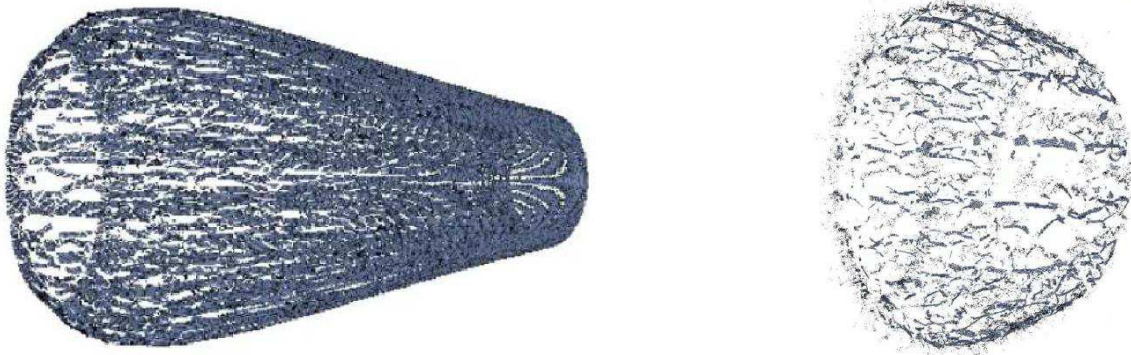


Figure 29 : Déformée du cylindre après 30 µs (à gauche) et 100 µs (à droite)

Commentaires et contribution à la validation de l'approche SPHC

Ce cas valide la capacité fondamentale du modèle SPHC à reproduire un processus de fragmentation généralisée, tout en préservant un comportement microscopique conforme à l'expérience (en évitant une rupture systématique de toutes les liaisons entre particules notamment).

Table 15 : Simulations de validation de l'approche SPHC pour l'endommagement, la fissuration et la fragmentation de coques

2.1.2 Extension de l'approche XFEM en dynamique rapide pour la propagation tridimensionnelle de fissures

Les travaux présentés dans ce paragraphe correspondent principalement à la thèse de R. Pelée de Saint Maurice [Pelée, 2014], dont sont extraites les figures, sauf mention contraire. Cette thèse s'est déroulée au LaMCoS de l'INSA Lyon sous la direction d'A. Combescure, avec un financement CEA. L'encadrement a été assuré par T. Elguedj au LaMCoS et par l'auteur au CEA, avec l'assistance précieuse de B. Prabel.

2.1.2.1 Travaux antérieurs pour l'approche XFEM en dynamique rapide et perspectives d'extension

L'approche XFEM [Belytschko, 1999][Belytschko et Moës, 2001] est une extension de la méthode des éléments finis (d'où son nom) visant à prendre en compte des discontinuités dans un système mécanique via des fonctions supplémentaires aux nœuds, sans recourir à leur maillage explicite, en utilisant les concepts liés à la partition de l'unité [Dolbow et al., 2000]. L'approximation du champ de déplacement s'écrit alors :

$$\mathbf{q}(\mathbf{x}) = \sum_{\text{nœuds du maillage}} N_i(\mathbf{x}) \mathbf{q}_i + \sum_{\text{nœuds enrichis du maillage}} N_i(\mathbf{x}) \varphi(\mathbf{x}) \mathbf{q}_i^e \quad (48)$$

où $\varphi(\mathbf{x})$ désigne une fonction d'enrichissement décrivant la discontinuité souhaitée,

\mathbf{q}_i^e sont des degrés de liberté associés à cet enrichissement, affectés sélectivement à des nœuds du maillage en fonction de la position géométrique des discontinuités.

Dans le cadre particulier de la mécanique de la rupture, on peut alors utiliser la fonction d'enrichissement pour représenter la discontinuité introduite par une fissure. Les aspects techniques principaux à considérer sont alors donnés par la Table 16, en présence d'une fissure dont la position géométrique évolue au cours du temps.

| Point technique | Commentaires |
|---|---|
| <i>Localisation géométrique de la fissure et contrôle de son évolution temporelle</i> | <p>Parmi les approches possibles, deux sont privilégiées dans le domaine de la mécanique :</p> <ul style="list-style-type: none"> ❖ l'utilisation d'une représentation implicite par l'intermédiaire de fonctions de niveau (<i>level set functions</i>), la fissure étant alors obtenue par l'intersection d'isosurfaces (voir notamment [Gravouil et al., 2002]), ❖ la représentation explicite de la fissure à l'aide d'un maillage auxiliaire, sans lien topologique avec le maillage de la structure [Prabel et al., 2006]. <p>Cette dernière voie suppose d'être capable de construire et de faire évoluer ce maillage, pour des fissures éventuellement fortement évolutives et dans des configurations géométriques complexes en dynamique rapide tridimensionnelle.</p> <p>Dans la suite des travaux présentés dans le présent mémoire, la représentation implicite est ainsi choisie.</p> |
| <i>Définition des fonctions d'enrichissement du champ de déplacement prenant en compte la fissure</i> | <p>L'enrichissement en mécanique de la rupture se présente en général sous la forme de l'association de 2 types de fonctions [Moës et Belytschko, 2002]:</p> <ul style="list-style-type: none"> ❖ la fonction de Heavyside, pour décrire le saut de déplacement en aval de la fissure, ❖ des fonctions singulières décrivant le comportement asymptotique du déplacement en pointe de fissure. |
| <i>Construction du problème discret après approximation par éléments finis des champs enrichis</i> | <p>Les techniques de calcul classique des opérateurs éléments finis par quadrature de Gauss sur les cellules du maillage reposent sur la régularité des fonctions de formes utilisées.</p> <p>L'insertion de fonctions discontinues dans l'approximation du déplacement impose la mise en œuvre de méthodes d'intégration spécifiques.</p> |

Table 16 : Aspects techniques principaux de l'approche XFEM pour la mécanique de la rupture

Pour la représentation d'une fissure par des fonctions de niveau, deux sont nécessaires : l'une, notée ϕ_t , pour localiser la surface de fissure (une ligne en 2D), et l'autre, notée ϕ_n et orthogonale en principe à la première, pour localiser sur cette surface le front de la fissure (un point en 2D).

Des travaux préalables existent dans EPX par l'intermédiaire de la thèse de T. Menouillard [Menouillard, 2007], définissant les contours d'une approche compatible avec les exigences des techniques de résolution explicites en

temps. Cette approche, dont les principes fondateurs sont rappelés sur la Table 18, est restreinte à des modes de propagation purement bidimensionnels pour les fissures. Cette limitation est due d'une part à la nécessité de disposer d'un critère de propagation de fissure tridimensionnel et d'autre part, à la difficulté du problème d'évolution associé aux fonctions de niveau. Ce dernier requiert la résolution successive, et potentiellement antagoniste, d'une série d'équations de type Hamilton-Jacobi (cf. Table 17 pour le processus complet, introduit et expliqué notamment dans [Gravouil et al., 2002]).

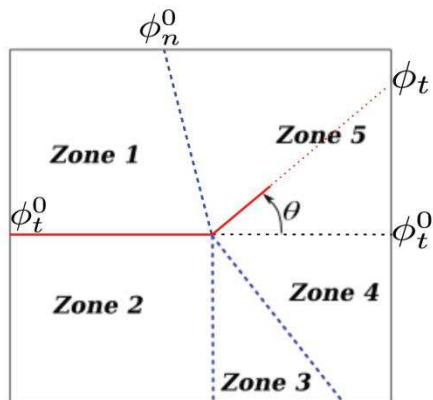
| Propriétés à conserver pour les fonctions de niveau au cours de leur évolution | |
|---|---|
| <i>Distance signée (i.e. la distance à l'isosurface zéro de la fonction est la valeur de la fonction)</i> | <i>Orthogonalité (évite en particulier tout définition défailante du front de fissure)</i> |
| $ \nabla\phi_t = 1$ et $ \nabla\phi_n = 1$ (49-a) | $\nabla\phi_t \cdot \nabla\phi_n = 0$ (49-b) |
| Mise à jour des fonctions à partir d'une vitesse de propagation donnée sur le front de la fissure | |
| <i>Extension de la vitesse normale à la surface de fissure</i> | <i>Extension de la vitesse tangente à la surface de fissure</i> |
| $\mathbf{V}_{\phi_t} = \mathbf{v}_{\text{fissure}} \cdot \mathbf{n}_{\phi_t} \text{ sur le front}$ $\mathbf{n}_{\phi_t} = \frac{\nabla\phi_t}{ \nabla\phi_t }$ $\frac{\partial\mathbf{V}_{\phi_t}}{\partial\tau} + \text{sign}(\phi_t)\mathbf{n}_{\phi_t} \cdot \nabla\mathbf{V}_{\phi_t} = 0$ $\frac{\partial\mathbf{V}_{\phi_t}}{\partial\tau} + \text{sign}(\phi_n)\mathbf{n}_{\phi_n} \cdot \nabla\mathbf{V}_{\phi_t} = 0$ (49-c) | $\mathbf{V}_{\phi_n} = \mathbf{v}_{\text{fissure}} \cdot \mathbf{n}_{\phi_n} \text{ sur le front}$ $\mathbf{n}_{\phi_n} = \frac{\nabla\phi_n}{ \nabla\phi_n }$ $\frac{\partial\mathbf{V}_{\phi_n}}{\partial\tau} + \text{sign}(\phi_n)\mathbf{n}_{\phi_n} \cdot \nabla\mathbf{V}_{\phi_n} = 0$ $\frac{\partial\mathbf{V}_{\phi_n}}{\partial\tau} + \text{sign}(\phi_t)\mathbf{n}_{\phi_t} \cdot \nabla\mathbf{V}_{\phi_n} = 0$ (49-d) |
| <i>Ajustement de la vitesse normale pour éviter de modifier la fissure antérieure</i> | <i>Actualisation des fonctions de niveau dans les champs de vitesse étendus</i> |
| $\bar{\mathbf{V}}_{\phi_t} = \frac{\phi_n H(\phi_n)}{\Delta t} \frac{\mathbf{V}_{\phi_t}}{\mathbf{V}_{\phi_n}} \nabla\phi_t$ (49-e) | $\frac{\partial\phi_t}{\partial\tau} + \bar{\mathbf{V}}_{\phi_t} \nabla\phi_t = 0$ $\frac{\partial\phi_n}{\partial\tau} + \mathbf{V}_{\phi_n} \nabla\phi_n = 0$ (49-f) |
| <i>Ré-initialisation de la fonction ϕ_t</i> | <i>Ré-orthogonalisation et ré-initialisation de la fonction ϕ_n</i> |
| $\frac{\partial\phi_t}{\partial\tau} + \text{sign}(\phi_t)(\nabla\phi_t - 1) = 0$ (49-g) | $\frac{\partial\phi_n}{\partial\tau} + \text{sign}(\phi_t)\mathbf{n}_{\phi_t} \cdot \nabla\phi_n = 0$ $\frac{\partial\phi_n}{\partial\tau} + \text{sign}(\phi_n)(\nabla\phi_n - 1) = 0$ (49-h) |

Table 17 : Evolution des fonctions de niveau par la résolution d'équations d'Hamilton-Jacobi

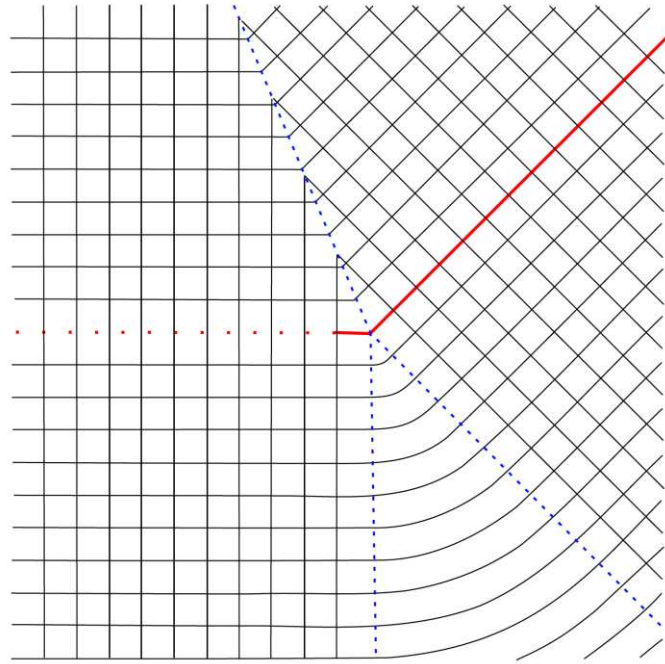
Dans les équations de la Table 17, les équations différentielles sont résolues en cherchant la stationnarité en fonction d'un paramètre de temps fictif τ . En pratique, elles sont discrétisées en espace dans [Menouillard, 2007] par une approche différences finies sur une grille structurée propre, déconnectée du maillage élément fini servant au calcul mécanique, des interpolations étant réalisées entre les deux grilles pour les quantités d'intérêt. L'intégration du temps fictif est réalisée à l'aide d'un schéma de Runge-Kutta d'ordre 2.

Les difficultés principales sont liées au fait que les étapes d'initialisation et d'orthogonalisation ne sont pas compatibles et qu'il en résulte des problèmes de convergence potentiels du processus de résolution des équations d'Hamilton-Jacobi associées. Cela peut également conduire à des temps nécessaires à la mise à jour des fonctions de niveau devenant fortement pénalisants pour le calcul de propagation de fissure complet.

Pour contourner ce problème, on trouve dans [Duflot, 2006] une méthode d'actualisation simplifiée des fonctions de niveau, fondée sur des considérations géométriques, mise en œuvre dans les applications pratiques présentées dans [Menouillard, 2007] (cf. Figure 30).



(a) Séparation de l'espace en zones en fonction de la position de la fissure et de l'avancée prévue



(b) Exemple d'actualisation correspondante des fonctions de niveau

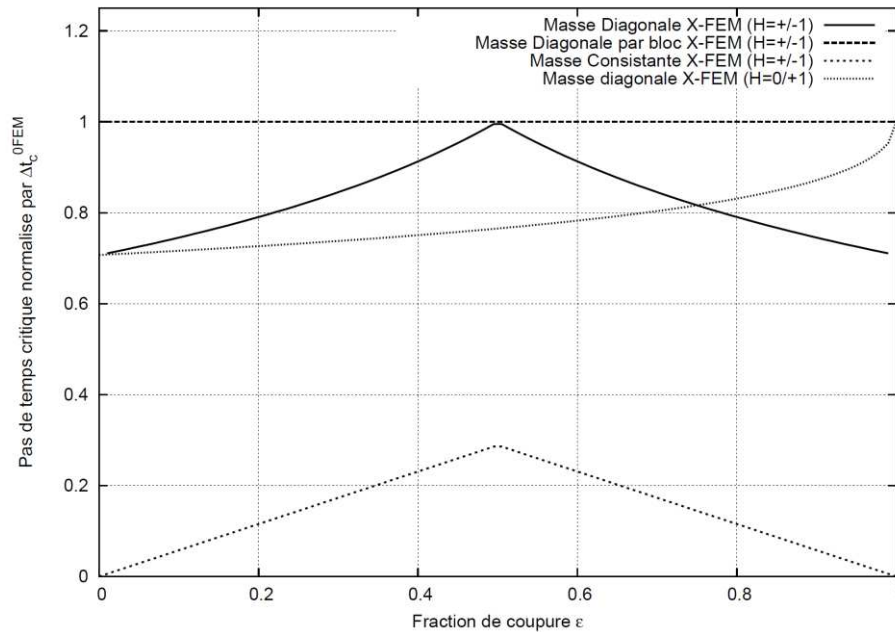
Figure 30 : Actualisation géométrique des fonctions de niveau

Les fonctions de niveau ainsi gérées peuvent ne pas conserver rigoureusement les propriétés de distance signée et d'orthogonalité, qui sont justement celles qui sont délicates à assurer simultanément avec les équations d'Hamilton-Jacobi. Ces limitations doivent être prises en compte dans la formulation du problème de mécanique de la rupture, en particulier en se dotant d'une méthode de calcul de la distance entre un point et le front de fissure ne reposant pas sur les fonctions de niveau. Ceci fait, le problème conserve sa précision, car la localisation de la surface et du front de la fissure à l'aide des isosurfaces zéro des fonctions de niveau n'est pas altérée.

Cette solution alternative participe à la limitation de l'approche existante au cadre bidimensionnel, pour lequel la méthode géométrique a été conçue.

En ce qui concerne l'intégration numérique, il est choisi de recourir à un enrichissement de la quadrature de Gauss dans les éléments concernés par une discontinuité, sous la forme d'une subdivision récursive en sous-éléments. En pratique, un quadrangle à 4 points de Gauss est remplacé par 16 quadrangles à 4 points de Gauss, soit 64 points d'intégration au total. Avec le même niveau de subdivision, un hexaèdre à 8 points de Gauss est remplacé par 64 hexaèdres à 8 points de Gauss, soit 512 points d'intégration au total. Cette approche présente l'avantage notable de ne pas demander à la subdivision de se conformer à la géométrie réelle de la fissure (ce qui représente une technique alternative de référence, décrite par exemple dans [Moës et al., 1999]) et simplifie largement la mise en œuvre. En contrepartie, le niveau de subdivision est important pour obtenir la précision adéquate, au prix d'une augmentation significative du temps de calcul pour des propagations sur de longues distances. Lorsque des matériaux ductiles sont utilisés, la modification du support d'intégration doit anticiper la plasticité pour éviter la projection de champs de variables internes.

Par ailleurs, on trouve dans [Menouillard, 2007] l'analyse approfondie d'une question numérique fondamentale pour l'application de la méthode XFEM dans le cadre d'une intégration explicite en temps, à savoir le calcul de la matrice de masse diagonale et la gestion du pas de temps critique. Une technique de diagonalisation est définie, préservant l'énergie cinétique du système en présence d'une discontinuité dans certains éléments et permettant de limiter les variations du pas de temps critique en fonction de la position relative de la discontinuité et des nœuds (voir Figure 31). Il s'agit du franchissement d'un verrou majeur, qui a une conséquence collatérale, à savoir que l'analyse proposée suppose que seules des fonctions d'enrichissement de type saut (cf. Table 16) sont utilisées.



La technique de référence est nommée *Masse Consistante X-FEM* et on observe bien que le pas de temps tend vers 0 quand la fissure approche des bords de l'élément. Au contraire, les autres techniques permettent une maîtrise du pas de temps, en particulier les deux aboutissant à une matrice complètement diagonale, d'un grand intérêt pour le processus de résolution.

Figure 31 : Pas de temps critique pour un élément monodimensionnel XFEM en fonction de la position de la discontinuité (extraite de [Menouillard, 2007])

On reporte finalement sur la Table 18 les principaux acquis des travaux antérieurs dans EPX et les perspectives associées pour le passage au cadre tridimensionnel.

| Acquis | Etat de l'art au démarrage de la thèse de R. Pelée de Saint Maurice | Perspectives |
|---|--|---|
| <i>Description et évolution robuste d'une fissure représentée à l'aide de fonctions de niveau</i> | Méthode géométrique bidimensionnelle pour l'actualisation des fonctions de niveau, contournant les difficultés de convergence du système fondé sur les équations d'Hamilton-Jacobi. Utilisation d'une grille structurée auxiliaire pour la représentation et la manipulation des fonctions de niveau. | Définition d'une stratégie d'évolution unifiée pour les cas bidimensionnel et tridimensionnel. Conservation de la grille auxiliaire pour les fonctions de niveaux. Pas de choix imposé entre les équations d'Hamilton-Jacobi et d'autres approches pour y parvenir. |
| <i>Adaptation aux contraintes de l'intégration temporelle explicite</i> | Diagonalisation de la matrice de masse et contrôle du pas de temps critique bien maîtrisés pour des enrichissements de type saut uniquement. | Etendre les concepts au cas tridimensionnels sans les dégrader. Sauf en cas de nécessité avérée sur cas de simulation défailants, pas d'utilisation prévue des fonctions d'enrichissement en pointe de fissure. |
| <i>Intégration numérique précise en présence de discontinuités</i> | Subdivision récursive des éléments pour enrichir le support d'intégration, sans lien avec la géométrie réelle de la fissure. | Extension générique de la méthode initiale au cas tridimensionnel. Recherche de techniques innovantes pour s'affranchir du surcoût numérique et surtout pour éviter le changement du support d'intégration en cours de calcul, complexe avec des matériaux ductiles. |

| | | |
|---|---|--|
| <i>Critère de propagation de fissure en mécanique de la rupture</i> | Utilisation privilégiée d'une approche locale en pointe de fissure (évaluation pondérée des contraintes sur un voisinage) pour permettre l'utilisation générique de matériaux potentiellement ductiles. | Mise en œuvre d'un critère de rupture adapté au cas tridimensionnel. |
|---|---|--|

Table 18 : Principaux acquis de l'approche existante pour la propagation de fissure bidimensionnelle en dynamique et perspectives d'extension pour le cas tridimensionnel

Un aspect majeur du travail de recherche à mettre en œuvre est une analyse bibliographique sélective pour construire une stratégie robuste et performante dans des situations de propagation complexes en environnement industriel. Les travaux sont publiés dans [Pelée et al. (1), 2013][Pelée et al. (2), 2013].

2.1.2.2 Technologie pour la représentation évolutive de fissures par des courbes de niveau en 3D

La représentation implicite de la fissure à partir des isosurfaces zéro de deux fonctions de niveau ϕ_t et ϕ_n est reprise. Un élément supplémentaire à intégrer à la méthodologie est la discrétisation du front de fissure, devenu une courbe en 3D. L'approche suggérée dans [Rannou, 2008] (voir Figure 32) est reprise, se présentant sous la forme :

1. d'une détection des nœuds de la grille auxiliaire situés à proximité du front de fissure (i.e. appartenant à des cellules où les deux fonctions de niveau changent deux fois de signe),
2. d'une projection itérative de ces nœuds sur le front par projections successives sur l'isosurface zéro de chaque fonction de niveau alternativement.

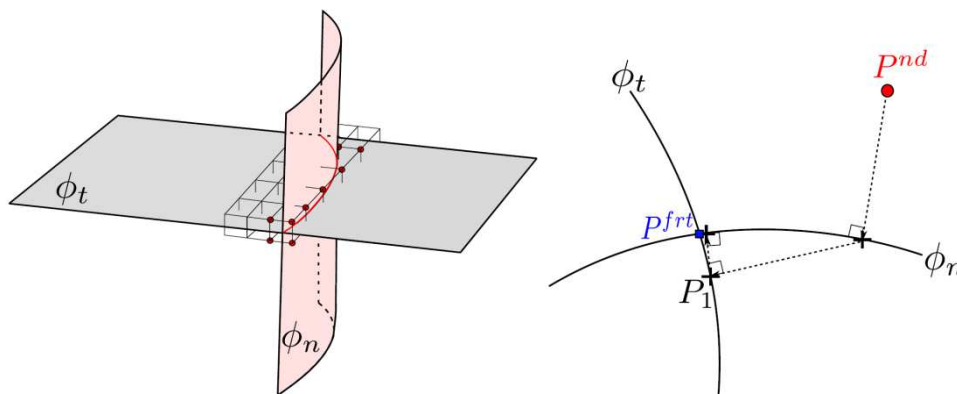


Figure 32 : Projection des nœuds de la grille auxiliaire pour les fonctions de niveau sur le front de fissure pour le discrétiser

La mécanique de la rupture donne la vitesse de propagation de la fissure en chaque point de discrétisation du front ainsi obtenu, sous la forme de deux angles définissant la direction de propagation à partir du repère local initial sur le front de fissure et d'une vitesse de propagation notée \dot{a} (cf. Figure 33).

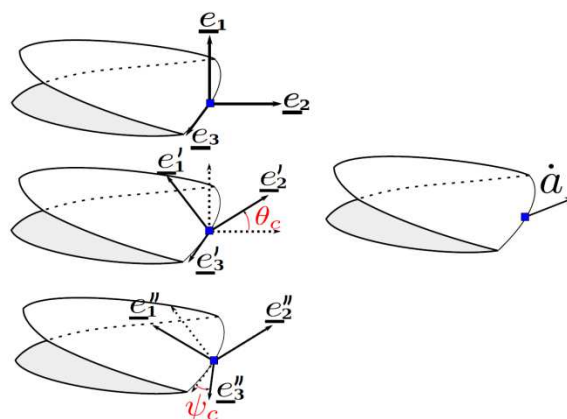
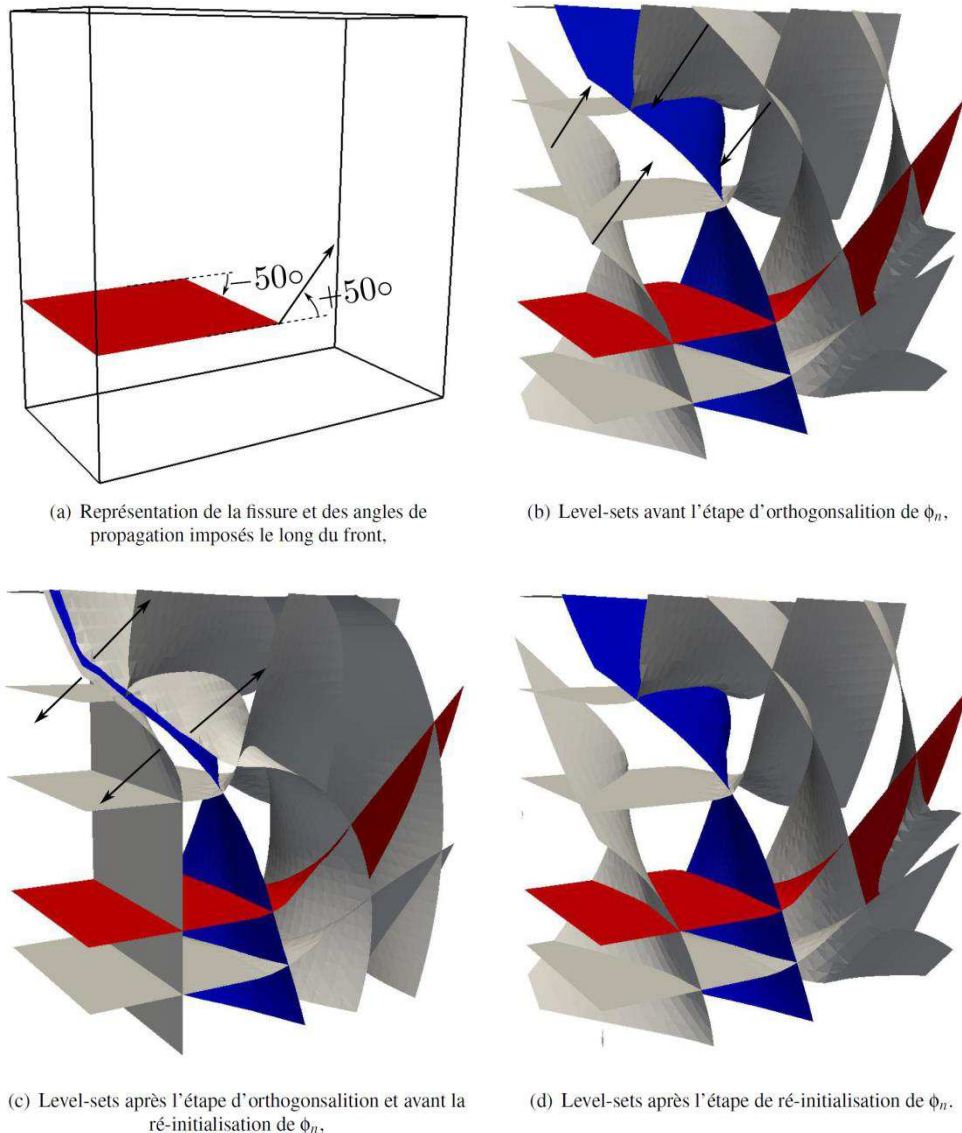


Figure 33 : Vitesse de propagation sur les nœuds du front de fissure

Les vitesses V_{ϕ_t} et V_{ϕ_n} sont alors données par :

$$\begin{aligned} V_{\phi_t} &= \dot{a} \cos(\theta_c) \sin(\psi_c) \\ V_{\phi_n} &= \dot{a} \sin(\theta_c) \end{aligned} \quad (50)$$

Pour l'extension des vitesses et l'actualisation des fonctions de niveau, l'approche originale par les équations d'Hamilton-Jacobi, qui représente formellement la référence théorique sur le sujet, est testée en profondeur dans [Pelée, 2014]. La conclusion est l'existence de défauts de robustesse associés à une complexité de mise en œuvre suggérant de recourir à une approche alternative (voir la Figure 34 pour une illustration d'une mise en défaut de l'approche pour une propagation tridimensionnelle complexe, telle qu'on peut en attendre avec des critères de rupture tenant compte de la ductilité du matériau par exemple).



La surface rouge représente l'isosurface zéro de la fonction de niveau normale et la surface bleue celle de la fonction de niveau tangente. On observe de grands déplacements de l'isosurface zéro de la fonction de niveau tangente entre les étapes d'orthogonalisation et de ré-initialisation. Les propriétés de distance signée et d'orthogonalité ne peuvent être obtenues simultanément dans cette configuration, d'où les difficultés de convergence.

Figure 34 : Illustration des difficultés de convergence associées à la mise en œuvre de la méthode des équations d'Hamilton-Jacobi

Une approche géométrique est donc préférée, aussi bien pour l'extension des vitesses que pour l'actualisation des fonctions de niveau, en sachant que les propriétés de distance signée et d'orthogonalité ne seront pas

vérifiées avec précision, en particulier loin du front. Comme signalé précédemment, les fonctions de niveau ainsi gérées remplissent leur rôle sans perte de qualité (localisation de la surface et du front de fissure, avec sa discrétisation) tant que la propriété de distance signée n'est pas utilisée explicitement dans la formulation du critère de rupture.

La Table 19 donne alors la procédure d'actualisation retenue.

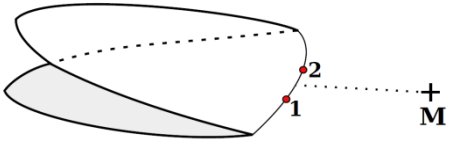
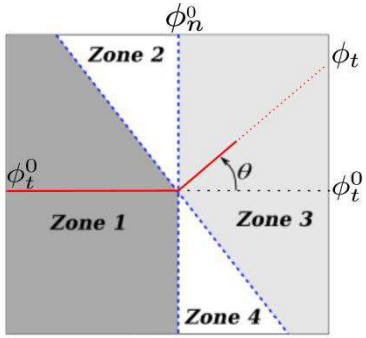
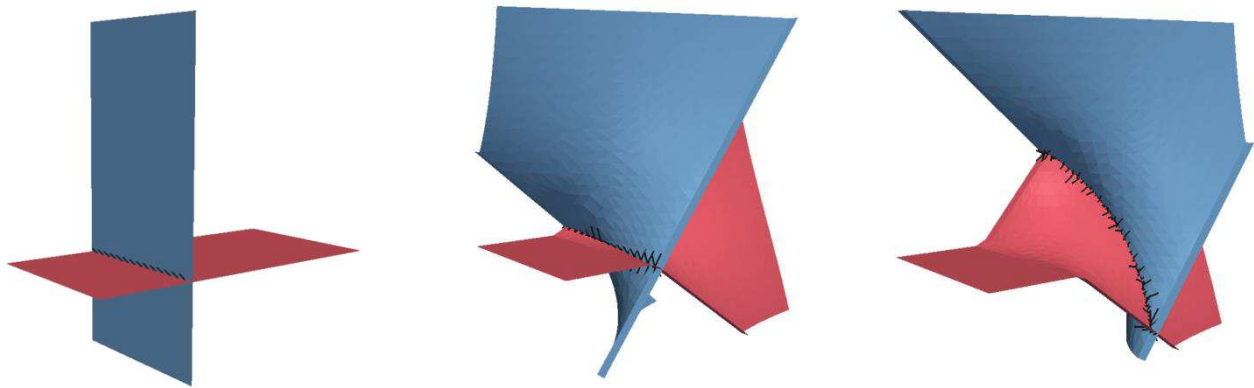
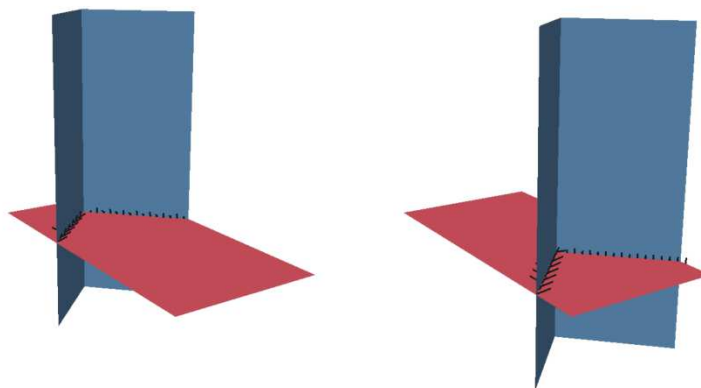
| Extension des vitesses | Evolution des fonctions de niveau |
|--|---|
| <p>Pour chaque point de la grille propre aux fonctions de niveau, les 2 points les plus proches sur le front de fissure sont identifiés. La vitesse d'avancée étendue est alors une combinaison des vitesses des points du front.</p>  <p>Figure 35 : Points de référence sur le front de fissure</p> $V_{\phi_x}^M = \frac{d_2}{d_1 + d_2} V_{\phi_x}^1 + \frac{d_1}{d_1 + d_2} V_{\phi_x}^2 \quad x = t, n \quad (51-a)$ <p>où d_1 et d_2 sont les distances entre la projection de M sur le front et les points 1 et 2 respectivement.</p> | <p>Une méthode géométrique dérivée de celle de [Dufloy, 2006] est utilisée. Le passage à la configuration tridimensionnelle est réalisée en se positionnant pour la chaque point de la grille propre aux fonctions de niveau dans le plan normal au front de fissure passant par ce point. La décomposition en zones illustrée par la Figure 36 est appliquée dans ce plan.</p>  <p>Figure 36 : Découpage du plan normal au front de fissure en 4 zones</p> |
| | <p>Mise à jour des fonctions par zone</p> |
| | $\theta = \arctan\left(\frac{V_{\phi_t}}{V_{\phi_n}}\right); \quad \dot{a} = \sqrt{V_{\phi_t}^2 + V_{\phi_n}^2} \quad (51-b)$ |
| | <p>Pour toutes les zones :</p> |
| | $\phi_n = [\phi_n^0 \cos(\theta) + \phi_t^0 \sin(\theta)] - \dot{a}\Delta t \quad (51-c)$ |
| <p>Zone 1</p> | <p>Zone 2</p> |
| $\phi_t = \phi_t^0 \quad (51-d)$ | $X = \phi_t^0 \cos(\theta) - \phi_n^0 \sin(\theta) \quad (51-e)$ $\phi_t = \min(\phi_t^0 , X) \cdot \text{sign}(\phi_t^0)$ |
| <p>Zone 3</p> | <p>Zone 4</p> |
| $\phi_t = \phi_t^0 \cos(\theta) - \phi_n^0 \sin(\theta) \quad (51-f)$ | $X = \sqrt{\phi_t^{0^2} + \phi_n^{0^2}} \quad (51-g)$ $\phi_t = X \cdot \text{sign}(\phi_t^0)$ |

Table 19 : Procédure d'actualisation des fonctions de niveau générique 2D/3D

La Figure 37 présente finalement deux illustrations de propagation de fonctions de niveau dans des cas complexes tridimensionnels validant l'approche proposée dans [Pelée, 2014].



(a) Propagation d'un front en hélice



(b) Propagation d'un front en V

Figure 37 : Mise à jour des fonctions de niveau pour des propagations de fronts complexes

2.1.2.3 Mécanique de la rupture tridimensionnelle avec l'approche XFEM en dynamique rapide

A partir de la description fonctionnelle de la fissure et de son évolution, mettre en œuvre une technique de propagation de fissure tridimensionnelle en dynamique rapide des structures avec l'approche XFEM revient à résoudre les problèmes suivants :

1. choisir les enrichissements des fonctions de forme pour l'intégration de la discontinuité dans les équations de la mécanique et construire des opérateurs éléments finis compatibles avec les exigences d'un solveur explicite,
2. choisir un critère de rupture et une technique d'évaluation associée en 3D pour déterminer l'avancée de la fissure en fonction des grandeurs mécaniques calculées par éléments finis,
3. définir une technique d'intégration numérique sur les éléments précise et la plus économique possible en présence de discontinuités.

Pour le premier point, les conclusions de [Menouillard, 2007] sont intégralement reprises, ce qui impose implicitement de ne pas recourir à l'utilisation d'enrichissements spécifiques en pointe de fissure en raison de la technique de diagonalisation de la matrice de masse (cf. paragraphe B-2.1.2.1). Il est notable qu'en plus de cette dernière contrainte, les enrichissements en pointe de fissure présentent des difficultés spécifiques pour des fissures en mouvement [Elguedj, 2006], ce qui rend complexe leur implémentation générique dans un code de dimension industrielle tel qu'EPX. Cependant, cela signifie que tout élément concerné par la fissure est supposé intégralement tranché, ce qui suggère en pratique une finesse de maillage suffisante pour disposer d'une résolution satisfaisante dans le processus de propagation.

En ce qui concerne le critère de rupture, il est judicieux de situer le contexte de lancement de la thèse de R. Pelée de Saint Maurice, en l'intégrant à la stratégie de recherche et développement à l'échelle du Consortium EPX, réunissant en particulier le CEA et l'ONERA. Pour ces besoins propres en association avec DCNS, l'ONERA s'intéresse également à la propagation tridimensionnelle de fissure avec le code, dans une collaboration avec le LaMCoS. Il est ainsi décidé conjointement entre les partenaires de formellement séparer les difficultés en deux thèses : l'une traitant particulièrement de l'élaboration d'un critère de rupture robuste intégré

la propagation en mode mixte en fonction de la ductilité du matériau en pointe de fissure, l'autre traitant de la stratégie numérique pour la mise en œuvre de la fissuration tridimensionnelle, utilisant les résultats obtenus pour le critère de propagation. En pratique, la thèse DCNS/ONERA/LaMCoS [Haboussa, 2012] est opportunément commencée un an avant celle considérée dans ce paragraphe.

Le critère proposé, initialement implémenté et testé uniquement en 2D, repose sur une approche locale en pointe de fissure, avec l'évaluation par moyenne sur un voisinage de contraintes et déformations plastiques moyennes obtenues par :

$$\tilde{\sigma} = \frac{\int_{\Omega} \sigma w(r) d\Omega}{\int_{\Omega} w(r) d\Omega} \quad \text{et} \quad \tilde{\varepsilon} = \frac{\int_{\Omega} \varepsilon w(r) d\Omega}{\int_{\Omega} w(r) d\Omega} \quad \text{avec} \quad w(r) = e^{-\left(\frac{r}{R}\right)^2} \quad (52)$$

où Ω est un domaine définissant le voisinage, de rayon R, en pratique, un demi-disque en amont de la fissure.

En fonction de cette contrainte équivalente, la Table 20 présente la procédure de détermination des grandeurs liées à la propagation éventuelle de la fissure, utilisant également une déformation moyenne en pointe de fissure, donnée également dans la formule (52).

| Contraintes et déformations équivalentes à partir des tenseurs moyens en pointe de fissure | |
|--|--------|
| $\tilde{\sigma}_{\text{eq}} = \max(\tilde{\sigma}_I, \tilde{\sigma}_{II}, 0) \quad \text{et} \quad \tilde{\varepsilon}_{\text{eq}} = \sqrt{\langle \varepsilon_I \rangle_+^2 + \langle \varepsilon_{II} \rangle_+^2}$ <p>où $\tilde{\sigma}_I, \tilde{\sigma}_{II}$ sont les valeurs principales du tenseur des contraintes,</p> <p>$\tilde{\varepsilon}_I, \tilde{\varepsilon}_{II}$ sont les valeurs principales du tenseur des déformations et $\langle \cdot \rangle_+$ la partie positive.</p> | (53-a) |
| Vitesse de propagation de la fissure par la formule de Kanninen [Kanninen et Popelar, 1985] | |
| $\dot{a} = c_r \left(1 - \frac{\sigma_{lc}}{\tilde{\sigma}_{\text{eq}}} \right) \quad \text{si} \quad \tilde{\sigma}_{\text{eq}} > \sigma_{lc}, \quad 0 \quad \text{sinon}$ <p>où c_r est la célérité des ondes de Rayleigh et σ_{lc} est la contrainte limite à rupture.</p> | (53-b) |

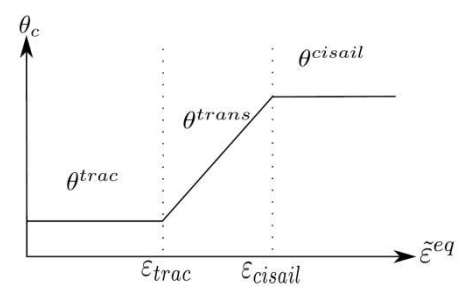
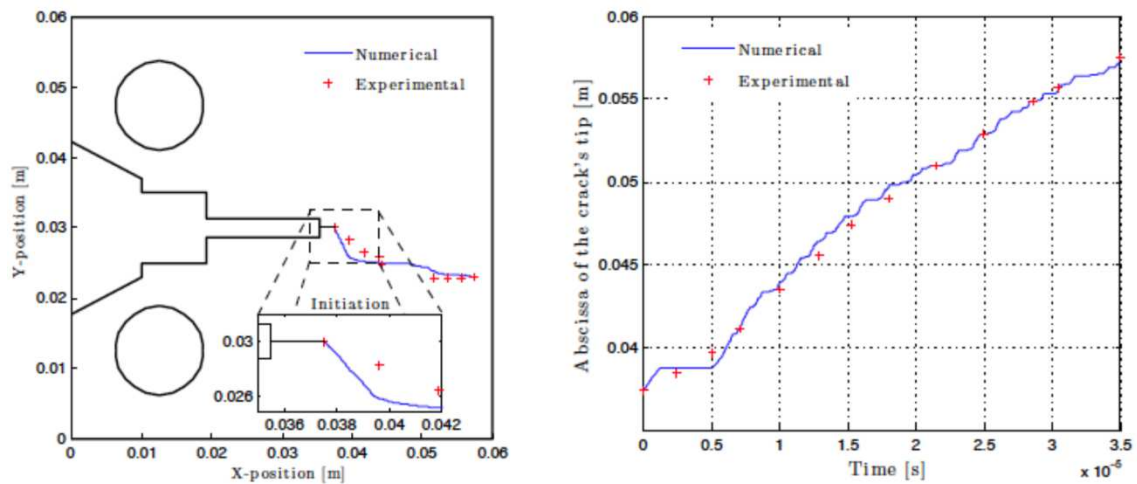
| Détermination de la direction de propagation | |
|--|--|
| Evaluation des angles de propagation | Transition entre propagation fragile (rupture en traction) et propagation ductile (rupture en cisaillement) |
| $\theta_{\text{trac}} = 2 \cdot \arctan \left[\frac{1}{4} \left(\frac{\tilde{\sigma}_{22}}{\tilde{\sigma}_{12}} - \text{sign}(\tilde{\sigma}_{12}) \sqrt{8 + \left(\frac{\tilde{\sigma}_{22}}{\tilde{\sigma}_{12}} \right)^2} \right) \right]$ $\theta_{\text{cisail}} = \text{sign}(\tilde{\sigma}_{12}) \frac{\pi}{4} \arctan \left(\frac{4}{19} \sqrt{\pi} \left \frac{\tilde{\sigma}_{22}}{\tilde{\sigma}_{12}} \right \right) \quad (53-c)$ $\theta_{\text{trans}} = \left(1 - \frac{\tilde{\varepsilon}_{\text{eq}} - \varepsilon_{\text{trac}}}{\varepsilon_{\text{cisail}} - \varepsilon_{\text{trac}}} \right) \theta_{\text{trac}} + \left(1 - \frac{\tilde{\varepsilon}_{\text{eq}} - \varepsilon_{\text{cisail}}}{\varepsilon_{\text{cisail}} - \varepsilon_{\text{trac}}} \right) \theta_{\text{cisail}}$ | $\theta_c = \begin{cases} \theta_{\text{trac}} & \text{si } \tilde{\varepsilon}_{\text{eq}} \leq \varepsilon_{\text{trac}} \\ \theta_{\text{cisail}} & \text{si } \tilde{\varepsilon}_{\text{eq}} \geq \varepsilon_{\text{cisail}} \\ \theta_{\text{trans}} & \text{sinon} \end{cases} \quad (53-d)$ <p>L'originalité de l'approche tient à la définition des déformations plastiques de transition $\varepsilon_{\text{trac}}$ et $\varepsilon_{\text{cisail}}$, faisant varier l'angle de propagation en fonction de la ductilité en pointe de fissure (cf. Figure 38).</p>  |

Table 20 : Evaluation des grandeurs pour la propagation de la fissure

La Figure 39 illustre le comportement du critère sur une expérience de référence avec direction de propagation de la fissure variable au cours du temps.



A gauche, le trajet de la fissure est bien reproduit par le calcul, avec les changements d'angle de propagation. A droite, la vitesse de propagation expérimentale est également bien retrouvée par la simulation.

Figure 39 : Validation expérimentale du critère de rupture

Pour l'extension du critère proposé au cas tridimensionnel, la question principale à considérer est celle de la définition du meilleur voisinage pour l'évaluation des contraintes et déformations au niveau des points de discrétisation du front de fissure (voir Figure 40 pour les choix envisagés).

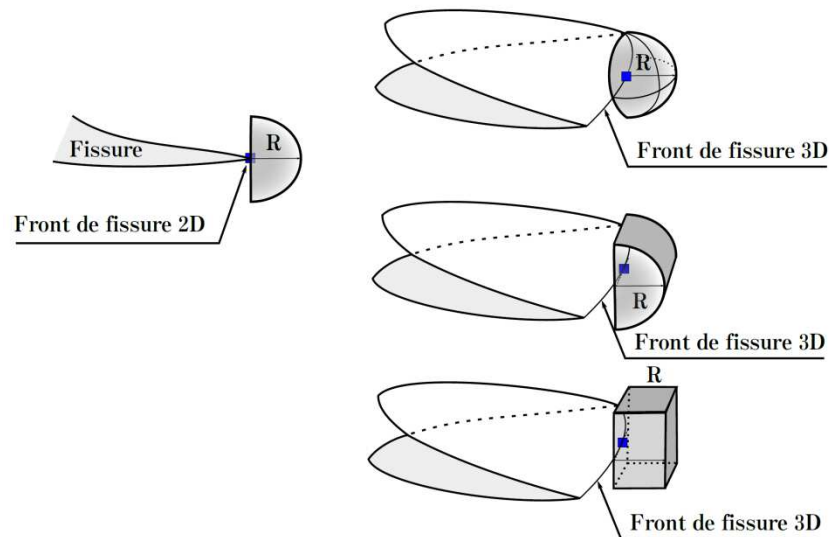
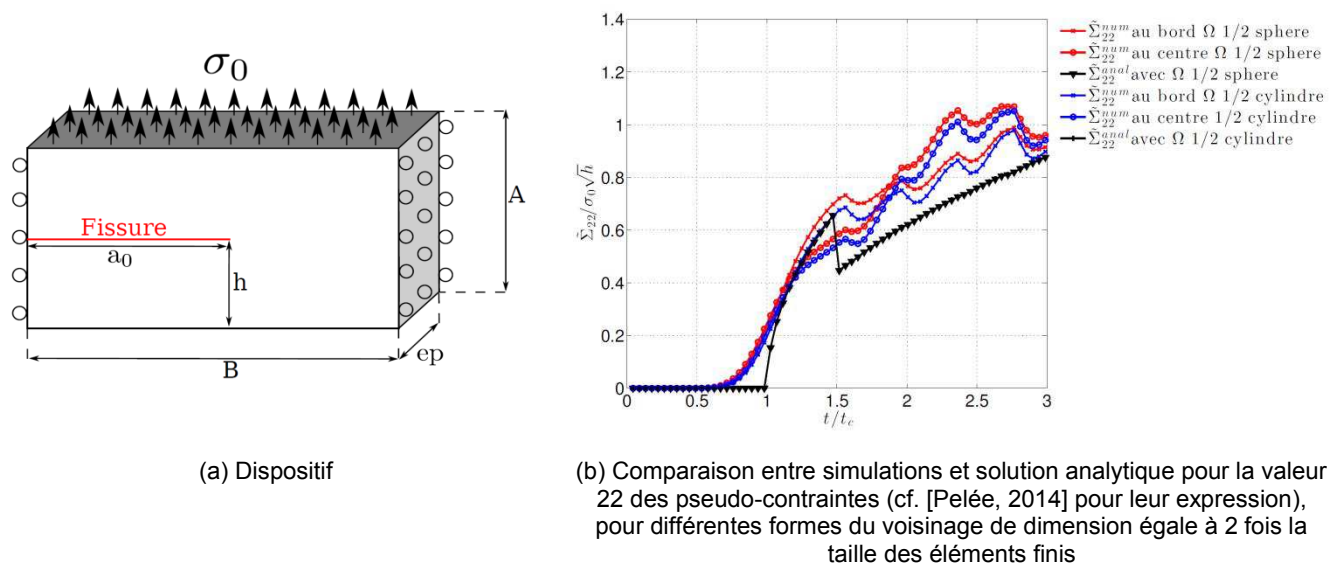


Figure 40 : Formes envisagées pour le voisinage du front de fissure en 3D

Les analyses comparatives menées dans [Pelée, 2014] sur un cas simple [Broberg, 1960] disposant d'une solution analytique (cf. Figure 41), concluent à la pertinence de l'utilisation d'une demi-sphère, avec une taille optimale liée à la finesse du maillage éléments finis : les meilleurs résultats sont obtenus lorsque le rayon de la demi-sphère se situe entre 2 et 3 fois la taille des mailles, pour un équilibre entre quantité d'information pour l'évaluation des grandeurs moyennes et lissage excessif des gradients. Il s'avère également judicieux de filtrer les avancées de fissure, en évitant la multiplication des avancées infinitésimales (en raison du pas de temps critique fixé par la vitesse des ondes et non par la vitesse de propagation de la fissure). Cumuler les avancées pour réaliser des propagations effectives de l'ordre de la taille d'une maille à chaque fois produit à nouveau les meilleurs résultats.



(a) Dispositif

(b) Comparaison entre simulations et solution analytique pour la valeur 22 des pseudo-contraintes (cf. [Pelée, 2014] pour leur expression), pour différentes formes du voisinage de dimension égale à 2 fois la taille des éléments finis

Figure 41 : Test utilisé pour les analyses comparatives sur la forme et la taille du voisinage pour l'estimation des tenseurs sur le front de fissure

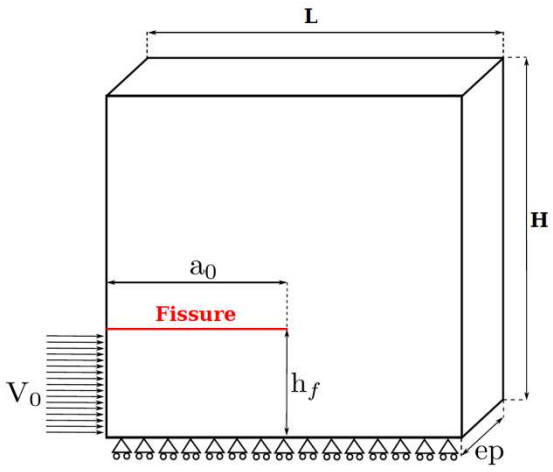
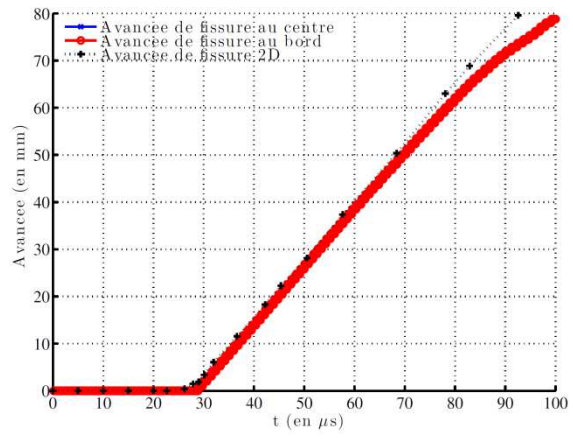
Enfin, pour la question de l'intégration numérique sur les éléments finis en présence d'une discontinuité dans le champ de déplacement, la méthode par subdivision récursive des cellules reste la référence, malgré son coût et la gestion astucieuse qu'elle impose pour la transition entre les supports d'intégration en présence de plasticité. Une approche alternative est toutefois élaborée et testée, reposant sur une adaptation des poids de Gauss pour intégrer avec le plus de précision possible des champs discontinus de référence, tout en conservant la position géométrique des points pour éviter la projection des champs en présence de plasticité. Elle présente des résultats prometteurs pour les matériaux élastiques, mais elle impose de partitionner les contraintes en une contribution continue et une contribution discontinue, sans quoi la recherche de poids présentant le niveau de

précision souhaitée pour l'intégration numérique n'aboutit pas. De ce fait, il n'est pour l'instant pas possible de l'étendre au cas des matériaux inélastiques, ce qui la rend inutilisable pour les cas d'intérêt industriels. A noter que des tentatives similaires figurent dans [Esnault, 2013], avec des conclusions voisines.

2.1.2.4 Illustrations et perspectives

Parmi les tests de validation figurant dans [Pelée, 2014], on considère deux cas significatifs reportés sur la Table 21 : le premier est le traitement tridimensionnel d'une expérience bidimensionnelle déjà représentée dans [Menouillard, 2007], le second est la simulation d'une expérience avec une propagation de fissure réellement tridimensionnelle.

Durant le temps imparti pour le travail doctoral, il n'est pas possible de valider le comportement tridimensionnel du critère de rupture en présence de ductilité. Seuls des matériaux élastiques sont considérés pour les cas de propagation réellement 3D, en raison de la hiérarchie qui s'impose dans le traitement des difficultés.

| Expérience bidimensionnelle de Kalthoff [Kalthoff, 2000] en représentation tridimensionnelle | |
|---|--|
| Dispositif (éléments principaux) | Comparaison avec l'expérience et les simulations de référence 2D (pour un cas de rupture en traction) |
|  <p>Figure 42 : Essai de Kalthoff ($H=L=100$ mm, $h_f=25$ mm, $a_0=50$ mm)</p> <p>Matériau : acier élastoplastique à écrouissage isotrope</p> <p>En fonction de la vitesse d'impact, la fissure se propage avec un mode de traction ou de cisaillement.</p> | <p>La fissure se propage avec un angle de 70° par rapport à son plan initial, en 2D comme en 3D (cf. Figure 44).</p> <p>On donne sur la Figure 43 l'évolution de la longueur de fissure en 2D et en 3D, à cœur dans le modèle et sur les bords.</p>  <p>Figure 43 : Essai de Kalthoff : évolution de la longueur de la fissure en 2D et 3D</p> <p>On retrouve bien une propagation bidimensionnelle avec le modèle 3D et les calculs antérieurs sont bien reproduits.</p> |

Visualisation de la propagation de la fissure au cours du temps

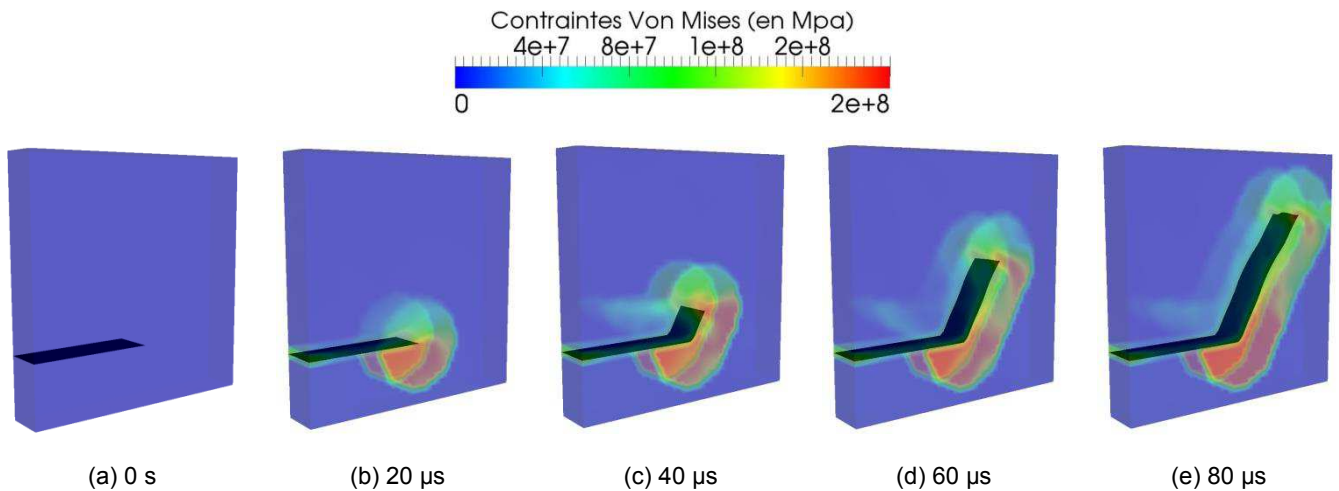


Figure 44 : Propagation de la fissure dans la simulation de l'expérience de Kalthoff

Commentaires et validation de l'approche XFEM en dynamique rapide tridimensionnelle

L'angle de propagation est très stable jusqu'à 80 μ s et devient plus variable ensuite. Cela met en évidence une instabilité potentielle de la technique de propagation tridimensionnelle pour de longs trajets de fissuration qui reste encore à expliquer (voir les perspectives ci-dessous).

En l'état, ce test valide la capacité du formalisme générique proposé à dégénérer avec précision vers le cas bidimensionnel.

Simulation d'un essai de propagation en mode mixte en rupture fragile (issu de [Grégoire, 2008]).

Dispositif (éléments principaux)

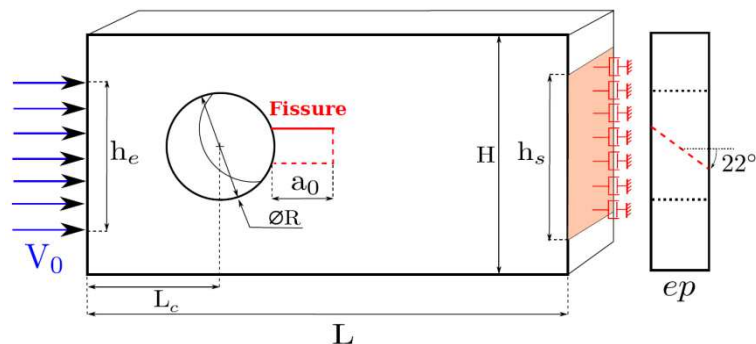
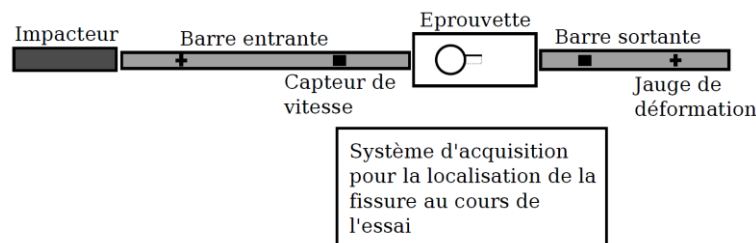
Figure 45 : Epreuve avec pré-entaille inclinée ($L=140$ mm, $H=70$ mm, $R=30$ mm, $a_0=15$ mm, $V_0=12.4$ m.s $^{-1}$)

Figure 46 : Chargement imposé par un système de barres de Hopkinson

Matériau : PMMA (connu sous le usuel de *plexiglas*), comportement élastique

Comparaison de la simulation avec l'expérience pour l'avancée de fissure

L'essai est caractérisé par un arrêt suivi d'un redémarrage dans la propagation. La Figure 47 montre que cet aspect est correctement reproduit par le calcul. La différence au moment de l'arrêt peut être attribuée à une incertitude sur la vitesse de la barre de Hopkinson entrante.

Contrairement au cas précédent, l'avancée de la fissure est légèrement plus rapide à cœur que sur les bords.

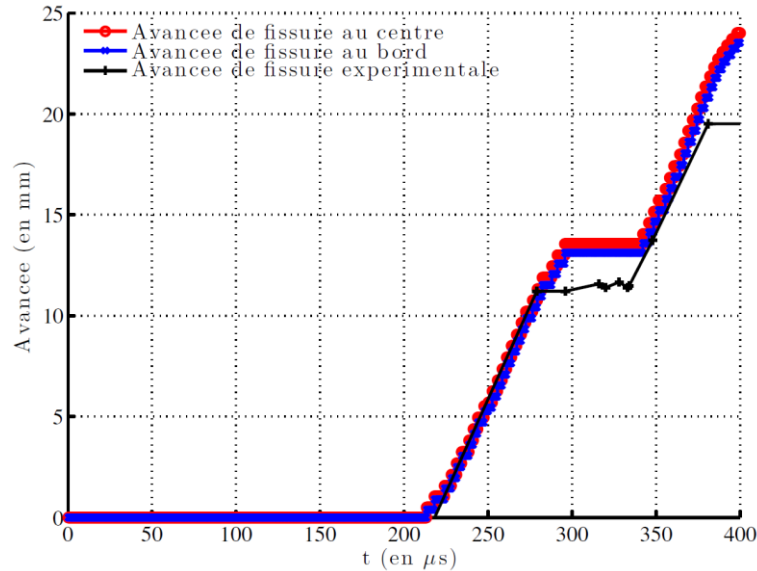


Figure 47 : Comparaison des avancées de fissure pour l'expérience et la simulation

Visualisation de la propagation de la fissure

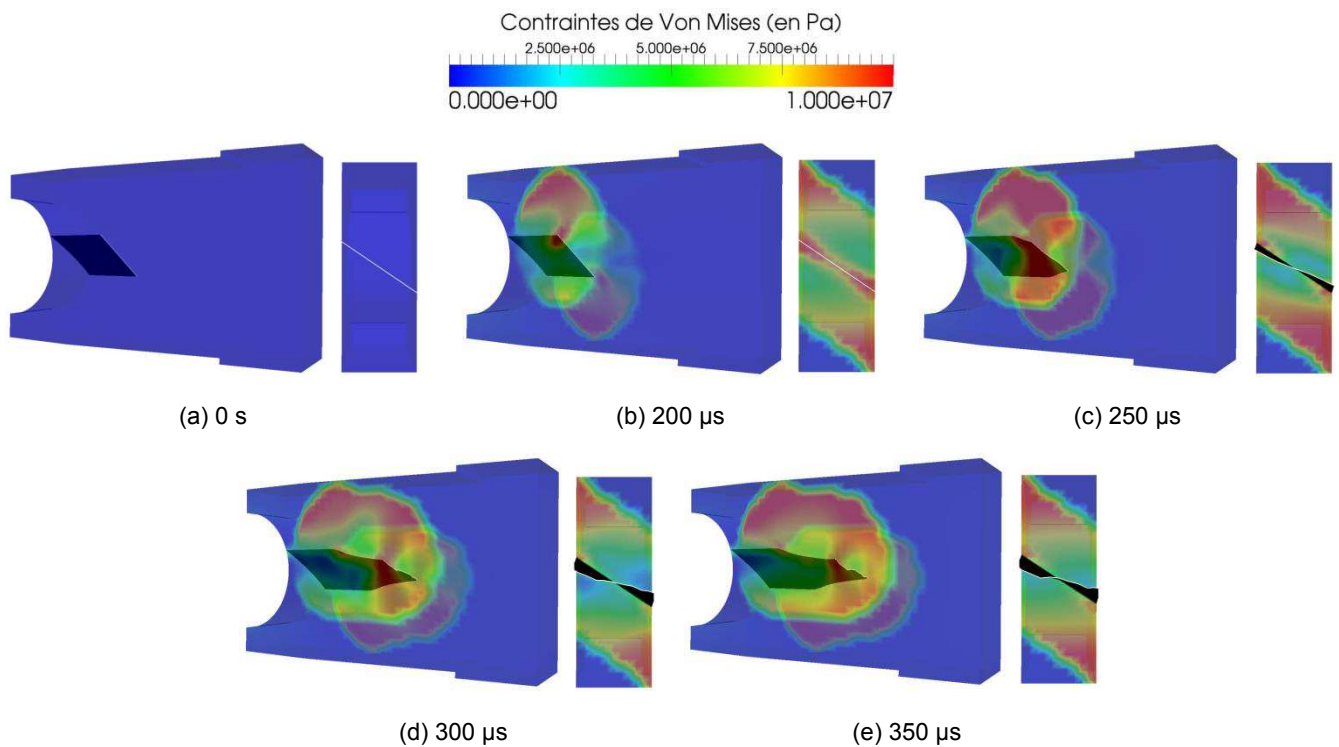


Figure 48 : Propagation de la fissure dans la simulation de l'essai avec pré-entaille inclinée

Commentaires et validation de l'approche XFEM en dynamique rapide tridimensionnelle

On retrouve la rotation attendue de la fissure pour se repositionner dans le plan de symétrie de l'éprouvette (cf. Figure 49 pour la visualisation du trajet de la fissure dans l'expérience).

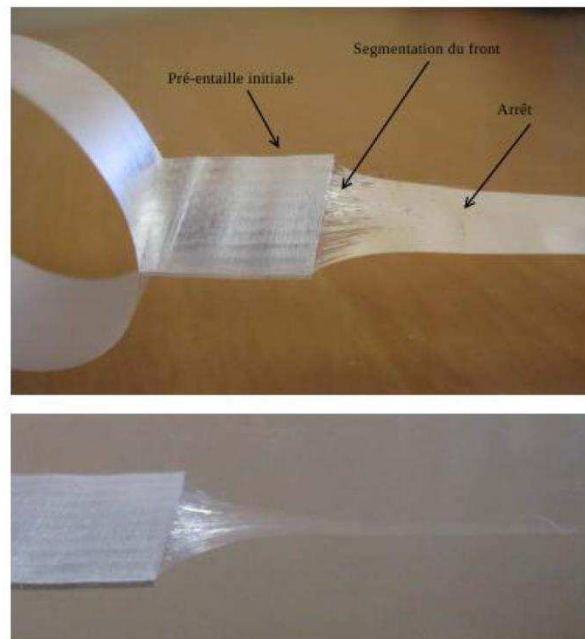


Figure 49 : Trajet de fissuration expérimental pour une pré-entaille inclinée

Les instabilités dans le calcul des angles de propagation après un long trajet de fissuration sont rencontrées à nouveau.

Malgré ce point à élucider, ce test valide la capacité de l'approche proposée à représenter des propagations complexes tridimensionnelles en dynamique, avec arrêt et redémarrage de la fissure au cours du temps.

Table 21 : Simulations de validation de l'approche XFEM en dynamique rapide tridimensionnelle

En termes de perspectives, le travail doctoral présenté ci-dessus appelle deux remarques.

1. Le nombre importants de verrous techniques à considérer et résoudre pour parvenir à la mise en œuvre de simulations tridimensionnelles couplant d'une part la représentation robuste d'une fissure et de son évolution par des fonctions de niveau, et d'autre part la mécanique de la rupture en 3D pour des matériaux ductiles, laisse légitimement certains points inachevés en raison du temps limité.

Ainsi sont encore en suspens les thèmes du calcul parallèle pour l'approche XFEM en dynamique, nécessaire pour la mise en œuvre de maillages raffinés réellement conformes à l'utilisation d'enrichissements saut seuls (cf. paragraphe B-2.1.2.3), de la vérification du comportement du critère de rupture pour des matériaux ductiles en 3D, auxquels s'ajoute la difficulté numérique rencontrée pour les longues propagations de fissure.

2. Le doctorant a affiché un souci constant de produire un outil logiciel utilisable et robuste, sans zone d'obscurité, en particulier au niveau numérique. Il s'agit d'une intention louable et rigoureuse qui, face au volume de travail nécessaire mentionné, s'est fait un peu au détriment du volume de publication. Ce dernier ne rend finalement pas compte de la quantité de points nouveaux étudiés et maîtrisés au cours de la thèse dans le domaine difficile des méthodes XFEM en dynamique.

Cela ouvre donc un champ important de capitalisation et de publication des résultats après la thèse.

2.1.3 Éléments discrets pour la ruine des structures en béton armé sous impact

Les travaux de ce paragraphe sont liés à la thèse d'A. Masurel (financement CIFRE EDF, direction par L. Daudeville à l'UJF Grenoble, encadrement mixte par l'auteur et S. Potapov pour EDF), encore en cours et sont logiquement présentés avec moins de détails que les travaux précédents.

Ils font suite à la thèse de J. Rousseau [Rousseau, 2009], posant les bases d'une formulation par éléments discrets sphériques pour la simulation de la ruine d'une structure en béton armé sous impact. Si le comportement du béton sous impact est bien reproduit (voir la Figure 50 pour des exemples significatifs), la gestion de l'interaction entre les aciers de renforcement et le béton environnement ne donne pas totalement satisfaction (voir ci-dessous). La question du couplage continu entre éléments discrets et éléments finis, pour permettre de construire des modèles de structure où seule une zone d'intérêt d'amplitude restreinte est représentée à l'aide d'éléments discrets, est également traitée en profondeur dans [Rousseau, 2009]. Il est notable que la mise en œuvre d'une approche par éléments discrets sphériques requiert une étape de caractérisation des lois d'interaction entre les éléments pour reproduire le comportement de la mécanique des milieux continus. Elle est réalisée sur la base de tests bien choisis sur des échantillons associés à un arrangement donné des éléments discrets (distribution de la taille des éléments en particulier). Ce point n'est pas discuté dans le présent travail.

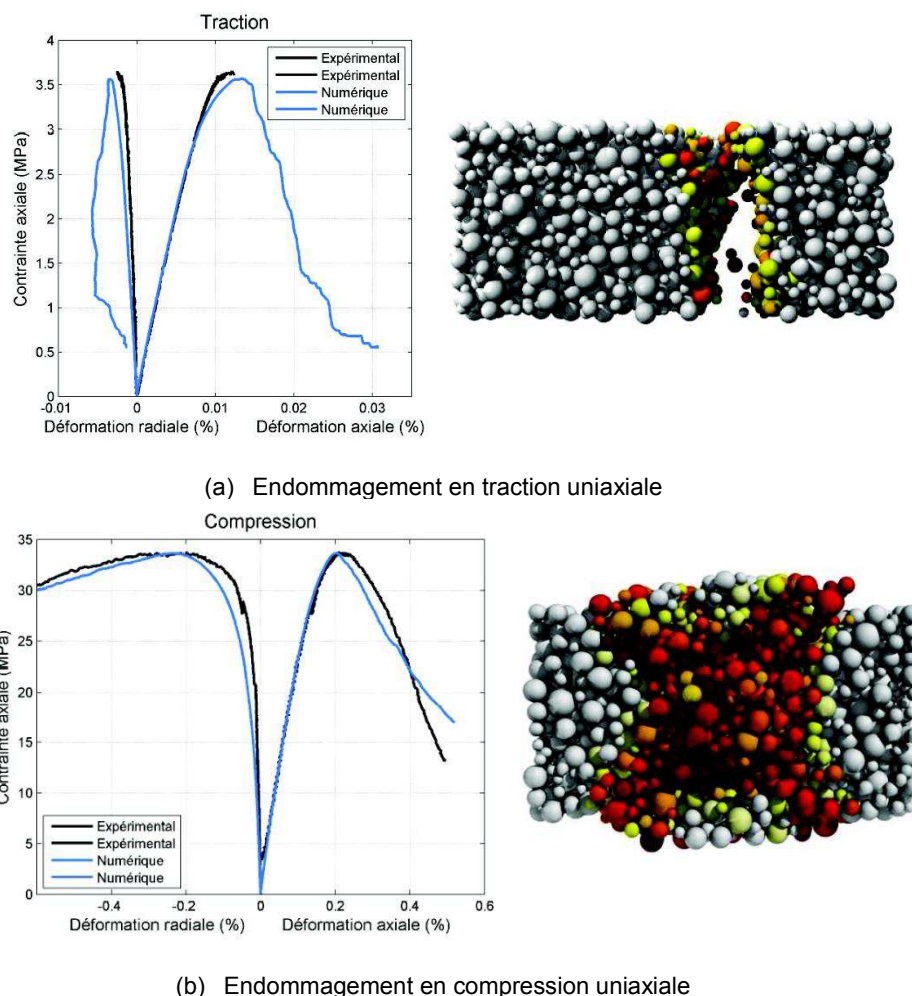


Figure 50 : Simulations de référence pour la modélisation du béton en dynamique rapide par éléments discrets

Le choix initial fait pour la représentation des aciers est d'utiliser une formulation par éléments discrets particulière, leur donnant un comportement de poutre pour les interactions entre eux, et un comportement différencié entre une direction tangente et une direction normale pour leurs interactions avec des éléments discrets de béton environnants.

Il se trouve que ce choix impose des considérations géométriques difficiles à prendre en compte pour repérer les directions tangente et normale aux armatures et suivre leur évolution au cours des simulations. Il en résulte un comportement fréquemment instable des armatures, difficile à maîtriser. Une direction alternative est alors privilégiée, fondée sur l'expérience importante disponible dans l'environnement du code EPX pour la gestion de liaisons cinématiques complexes entre entités de natures différentes. Les aciers de renforcement sont alors

représentés par des éléments finis de poutre, ce qui correspond à l'approche la plus adaptée pour des structures de cette nature. Le travail de recherche associé consiste alors à concevoir une liaison cinématique rendant compte de l'interaction de ces éléments avec les éléments discrets de béton, intégrant la non-linéarité de cette relation et la différenciation entre directions tangente et normale. Les principes généraux d'une telle liaison sont donnés par la Table 22.

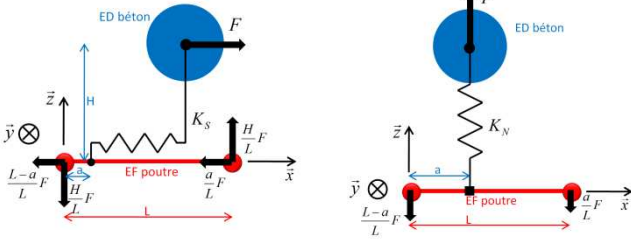
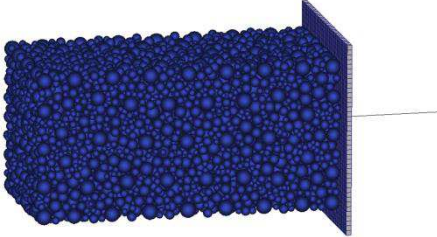
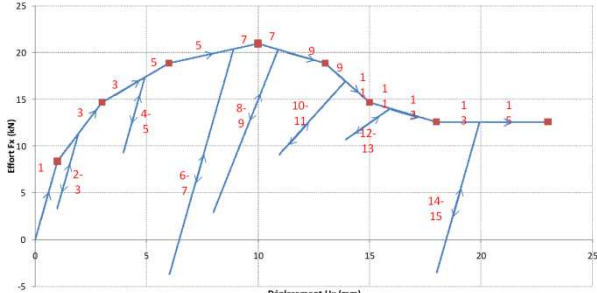
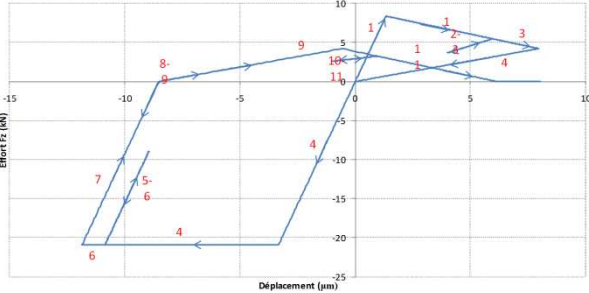
| Formulation de la liaison dans les directions tangente et normale | Méthode d'identification des paramètres de la liaison |
|--|---|
|  <p>(a) Direction tangente (b) Direction normale</p> <p>Figure 52 : Formulation de la liaison entre acier et béton</p> <p>Un élément discret de béton peut glisser d'un élément d'acier à son voisin pour prendre en compte les grands déplacements.</p> | <p>L'essai de référence est l'arrachement (<i>pull out</i>), où il s'agit de recalculer la courbe donnant l'effort tangentiel en fonction du glissement de l'armature.</p>  <p>Figure 51 : Configuration de l'essai d'arrachement</p> |
| Comportement de la liaison dans la direction tangente | Comportement de la liaison dans la direction normale |
| <p>La loi utilisée entre la force tangente et le glissement relatif entre acier et béton est dérivée de [Eligehausen et al., 1983].</p>  <p>Figure 53 : Relation non-linéaire entre force et glissement relatif dans la direction tangente</p> | <p>Un modèle de plasticité parfaite en compression et d'endommagement en traction est mis en œuvre.</p>  <p>Figure 54 : Relation non-linéaire entre force et déplacement dans la direction normale</p> |

Table 22 : Liaison cinématique entre éléments finis de poutre pour les armatures et éléments discrets pour le béton

La Table 23 présente un test sur structure représentatif des capacités du modèle couplé béton/armature ainsi composé, comparant la simulation à un essai d'impact réalisé au CEA/Saclay [Leroux, 2012].

Simulation d'un essai d'impact sur poutre en béton armé

Dispositif expérimental [Leroux, 2012]

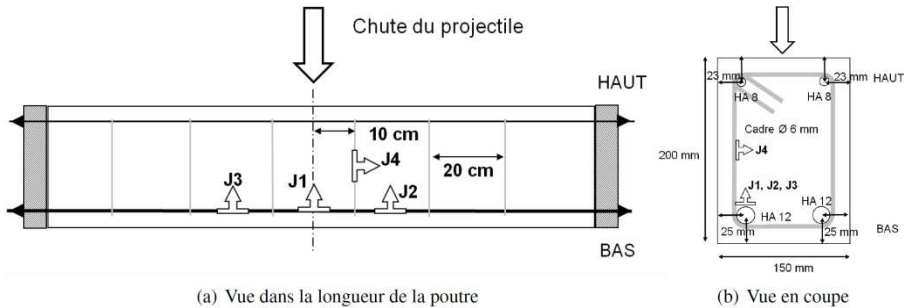


Figure 55 : Poutre et ferrailage

Vitesse d'impact : $5.425\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ 

Figure 56 : Tour de chute du CEA/Saclay

Visualisation de la déformation et de l'endommagement de la poutre

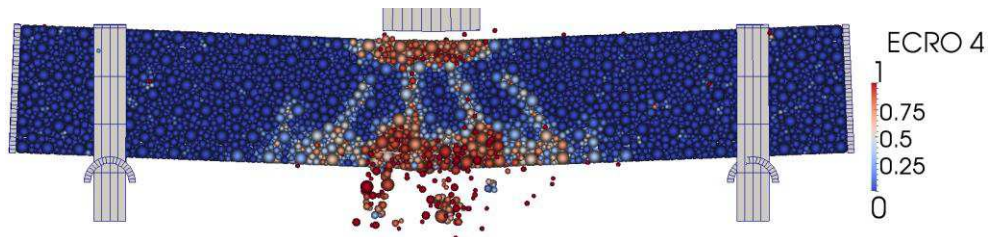


Figure 57 : Endommagement dans la poutre après 20 ms

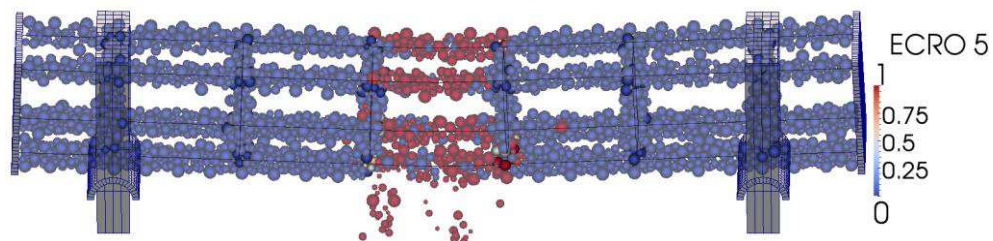


Figure 58 : Endommagement dans la liaison entre armatures et béton après 20 ms

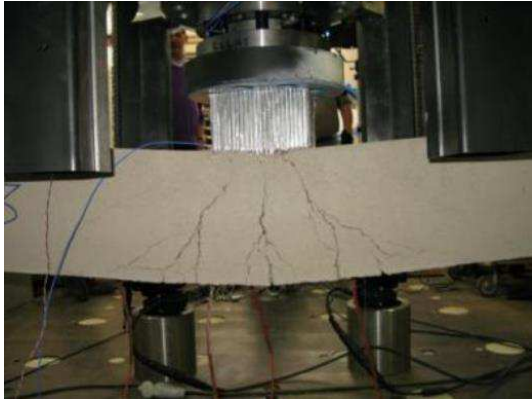
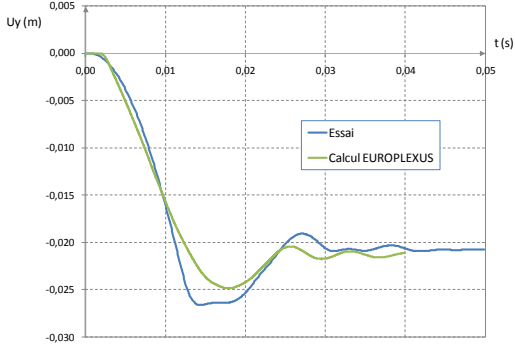
| Visualisation de la poutre après l'essai | Comparaison entre simulation et expérience |
|---|---|
|  <p data-bbox="153 658 802 689">Figure 59 : Déformée et fissuration de la poutre après l'essai</p> |  <p data-bbox="837 640 1487 672">Figure 60 : Flèche au droit de l'impacteur au cours du temps</p> |
| <p data-bbox="153 730 309 761">Commentaires</p> | |
| <p data-bbox="153 786 1090 817">L'accord entre simulation et expérience est très prometteur sur l'essai d'impact proposé.</p> | |

Table 23 : Impact sur une poutre en béton armé modélisé par éléments discrets avec armatures en éléments finis

Le formalisme proposé dispose d'un potentiel validé sur un essai représentatif. Une mise en œuvre sur des modèles de structure plus complexes est en cours.

2.1.4 Bibliographie et publications spécifiques (surlignées)

[Belytschko, 1999]

Elastic crack growth in finite elements with minimal remeshing, *Int. J. for Num. Meth. in Engrg.*, vol. 45(5): 601-620, 1999.

[Belytschko et al., 2003]

T. Belytschko, H. Chen, J. Xu, G. Zi, Dynamic crack propagation based on loss of hyperbolicity and a new discontinuous enrichment, *Int. J. for Num. Meth. in Engrg.*, vol. 58(12): 1873-1905, 2003.

[Belytschko et Moës, 2001]

T. Belytschko, N. Moës, Arbitrary discontinuities in finite elements, *Int. J. for Num. Meth. in Engrg.*, vol. 50: 993-1013, 2001.

[Broberg, 1960]

K. Broberg, The propagation of a brittle crack. *Arkiv fur Fysik*, vol. 165: 16-18, 1960.

[Caleyron, 2011]

F. Caleyron, Simulation numérique par la méthode SPH de fuites de fluide consécutives à la déchirure d'un réservoir sous impact, Thèse de doctorat de l'INSA Lyon, 2011.

[Caleyron et al. (1), 2013]

F. Caleyron, A. Combescure, V. Faucher, S. Potapov, Dynamic simulation of damage-fracture transition in smoothed particles hydrodynamics shells, *Int. J. for Num. Meth. in Engrg.*, vol. 90(6): 707-738, 2013.

[Chen et al., 1999]

J. Chen, J. Beraun, C. Jih, An improvement for tensile instability in smoothed particle hydrodynamics. *Computational Mechanics*, vol. 23(4): 279-287, 1999.

[Dilts, 1999]

G. Dilts, Moving-least-squares-particle hydrodynamics-I, Consistency and stability, *Int. J. for Num. Meth. in Engrg.*, vol. 44(8): 1115-1155, 1999.

[Dolbow et al., 2000]

Discontinuous enrichment in finite elements with a partition of unity method, *Finite Elements in Analysis and Design*, vol. 36(3): 235-260, 2000.

[DufLOT, 2006]

A study of the representation of cracks with level sets, *Int. J. for Num. Meth. in Engrg.*, vol. 70: 1261-1302, 2006.

[Dyka et al., 1997]

C. Dyka, P. Randles, R. Ingel, Stress points for tension instability in SPH, *Int. J. for Num. Meth. in Engrg.*, vol. 40(13): 2325-2341, 1997.

[Elguedj, 2006]

T. Elguedj, Simulation numérique de la propagation de fissure en fatigue par la méthode des éléments finis étendus : prise en compte de la plasticité et du contact-frottement, Thèse de doctorat de l'INSA Lyon, 2006.

[Eligehausen et al., 1983]

R. Eligehausen, E.P. Popov, V.V. Bertoro, Local bond stress-slip relationships of deformed bars under generalized excitations, Report 82/23, Earthquake Engineering Research Centre, university of California, Berkeley, 1983.

[Esnault, 2013]

J. B. Esnault, Etude expérimentale et numérique en trois dimensions du développement en fatigue d'une fissure déversée dans une tôle mince, Thèse de doctorat de l'Ecole Polytechnique, 2013.

[Goto et al., 2008]

D. Goto, R. Becker, T. Orzechowski, H. Springer, A. Sunwoo, C. Syn, Investigation of the fracture and fragmentation of explosively driven rings and cylinders, *Int. J. of Impact Engrg.*, vol. 35(12): 1547-1556, 2008.

[Gravouil et al., 2002]

A. Gravouil, N. Moës, T. Belytschko, Non-planar 3D crack growth by the extended finite element and level sets - Part II: Level set update, *Int. J. for Num. Meth. in Engrg.*, vol. 53: 2569-2586, 2002.

[Grégoire, 2008]

D. Grégoire, Initiation, propagation, arrêt et redémarrage de fissures sous impact, Thèse de doctorat de l'INSA Lyon, 2008.

[Hugues et al., 1978]

Reduced and selective integration techniques in the finite element analysis of plates, *Nuclear Engineering and Design*, vol. 46(1): 203-222, 1978.

[Haboussa, 2012]

D. Haboussa, Modélisation de la transition traction-cisaillement des métaux sous choc par la X-FEM, Thèse de doctorat de l'INSA Lyon, 2012.

[Kalthoff, 2000]

J. Kalthoff, Modes of dynamic shear failure in solids. *International Journal of Fracture*, vol. 101(1): 1-31, 2000.

[Kanninen et Popelar, 1985]

M. Kanninen, C. Popelar, *Advanced Fracture Mechanics*. Oxford Engineering Science Series, Oxford University Press, USA, 1985.

[Leroux, 2012]

A. Leroux, Modèle multiaxial d'endommagement anisotrope : gestion numérique de la rupture et application à la ruine de structures en béton armé sous impacts, Thèse de l'Ecole Normale Supérieure de Cachan, 2012.

[Liu et al., 1995]

W. Liu, S. Jun, Y. Zhang, Reproducing kernel particle methods, *Int. J. for Num. Meth. in Fluids*, vol. 20(8-9): 1081-1106, 1995.

[Maurel, 2008]

B. Maurel, Modélisation par la méthode SPH de l'impact d'un réservoir rempli de fluide, Thèse de doctorat de l'INSA Lyon, 2008.

[Menouillard, 2007]

T. Menouillard, Dynamique explicite pour la simulation numérique de propagation de fissure par la méthode des éléments finis étendus, Thèse de doctorat de l'INSA de Lyon, 2007.

[Menouillard et al., 2008]

Mass lumping strategies for X-FEM explicit dynamics: Application to crack propagation, Int. J. for Num. Meth. in Engrg., vol. 74(3): 447-474, 2008.

[Moës et al., 1999]

N. Moës, J. Dolbow, T. Belytschko, A finite element method for crack growth without remeshing., Int. J. for Num. Meth. in Engrg., vol. 46: 131-150, 1999.

[Moës et Belytschko, 2002]

N. Moës, T. Belytschko, Extended finite element method for cohesive crack growth, Engineering Fracture Mechanics, vol. 69(7): 813-833, 2002.

[Pelée, 2014]

R. Pelée de Saint Maurice, Extension de l'approche X-FEM en dynamique rapide pour la propagation tridimensionnelle de fissure dans des matériaux ductiles, Thèse de doctorat de l'INSA Lyon, 2014.

[Pelée et al. (1), 2013]

R. Pelée de Saint Maurice, V. Faucher, T. Elguedj, A. Combescure, P. Prabel, Propagation de fissures 3 dimensions et en dynamique rapide, 11e Colloque National en Calcul des Structures CSMA, Giens, France, 13-17 mai 2013.

[Pelée et al. (2), 2013]

R. Pelée de Saint Maurice, T. Elguedj, A. Combescure, B. Prabel, V. Faucher, Dynamic simulation of crack propagation in 3D by X-FEM method, ASME XFEM 2013, Lyon, 11-13 septembre 2013.

[Prabel et al., 2006]

B. Prabel, A. Combescure, A. Gravouil, S. Marie, Level set X-FEM non-matching meshes: application to dynamic crack propagation in elastic-plastic media. Int. J. for Num. Meth. in Engrg., vol. 69: 1533-1569, 2006.

[Rabczuk et al., 2007]

T. Rabczuk, P. Areias, T. Belytschko, A meshfree thin shell method for non-linear dynamic fracture, Int. J. for Num. Meth. in Engrg., vol. 72(5): 524-548, 2007.

[Ramulu et Kobayashi, 1985]

M. Ramulu, A. Kobayashi, Mechanics of crack curving and branching - a dynamic fracture analysis. Int. J of Fracture, vol. 27(3): 187-201, 1985.

[Rannou, 2008]

J. Rannou, Prise en compte d'effets d'échelle en mécanique de la rupture tridimensionnelle par une approche XFEM multigrille localisée non-linéaire, Thèse de doctorat de l'INSA de Lyon, 2008.

[Rousseau, 2009]

J. Rousseau, Modélisation numérique du comportement dynamique des structures sous impact sévère avec un couplage éléments discrets / éléments finis, Thèse de doctorat de l'Université Joseph Fourier – Grenoble I, 2009.

[Rusinek et al., 2009]

Experimental and numerical study on the perforation process of mild steel sheets subjected to perpendicular impact by hemispherical projectiles. Int. J. of Impact Engrg., vol. 36(4): 565-587, 2009.

[Song et al., 2006]

J. Song, P. Areias, T. Belytschko, A method for dynamic crack and shear band propagation with phantom nodes, Int. J. for Num. Meth. in Engrg., vol. 67(6): 868-893, 2006.

[Swegle et al., 1994]

J. Swegle, S. Attaway, M. Heinstein, F. Mello, D. Hicks, An analysis of smoothed particle hydrodynamics. Technical Report, Sandia National Labs., Albuquerque, NM (United States), 1994.

[Vignjevic et al., 2000]

R. Vignjevic, J. Campbell, L. Libersky, A treatment of zero-energy modes in the smoothed particle hydrodynamics method, *Comp. Meth. in App. Mech. and Engrg.*, vol. 184(1): 67-85, 2000.

[Wen et al., 1994]

Y. Wen, D. Hicks, J. Swegle, Stabilizing SPH with conservative smoothing, Technical Report, Sandia National Labs., Albuquerque, NM (United States), 1994.

[Zi et al., 2007]

G. Zi, T. Rabczuk, W. Wall, Extended meshfree methods without branch enrichment for cohesive cracks. *Computational Mechanics*, vol. 40(2): 367-382, 2007.

2.2 ECOULEMENTS ET SYSTEMES COMPLEXES EN INTERACTION FLUIDE-STRUCTURE

On s'intéresse dans le présent sous-chapitre aux systèmes fluide-structure soumis à des chargements transitoires brutaux. L'ouverture de vides dans une structure initialement intègre, provoquant la fuite de son contenu modélisé par des particules lagrangiennes SPH, est tout d'abord considérée, avant d'aborder une autre méthode pour traiter de manière robuste les écoulements à interface (surfaces libres ou autre). Enfin, la dernière section est consacrée à la simulation d'un transitoire multi-phasique complexe envisagé à l'échelle du circuit primaire complet d'un réacteur, avec les besoins en modélisation avancée que cette démarche comporte.

2.2.1 Fuites de réservoir sous impact

Il s'agit du second volet de la thèse de F. Caleyron [Caleyron, 2011], dont sont à nouveau extraites les figures de ce paragraphe. Le fluide est considéré de manière lagrangienne via des particules SPH classiques : le système d'équations correspondant est donné sur la Table 24.

Cette formulation est particulièrement adaptée au caractère non-borné du domaine fluide : après la déchirure éventuelle d'une enveloppe, le contenu interne s'écoule librement, ce qui rend compliqué (ou très coûteux) de recourir à une grille de calcul pour le représenter.

| Modélisation du fluide | | |
|--|--|---|
| <i>Conservation de la masse pour un fluide faiblement compressible</i> | <i>Conservation de la quantité de mouvement pour un fluide newtonien (i.e. les termes visqueux sont proportionnels à la partie symétrique du tenseur taux de déformation)</i> | <i>Equation d'état acoustique</i> |
| $\dot{\rho} + \rho \nabla \cdot \dot{\mathbf{q}} = 0 \quad (54-a)$ <p>(terme $\dot{\mathbf{q}} \cdot \nabla \rho$ négligé)</p> | $\rho \ddot{\mathbf{q}} + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0}$ $\boldsymbol{\sigma} = -P\mathbf{I} + 2\mu\mathbf{D} \quad (54-b)$ $\mathbf{D} = \frac{1}{2}(\nabla \dot{\mathbf{q}} + {}^t\nabla \dot{\mathbf{q}})$ <p>où μ est le coefficient de viscosité dynamique</p> | $dP = c^2 d\rho \quad (54-c)$ <p>où c est la célérité du son</p> |
| Equations du mouvement après interpolation des champs à l'aide de la fonction <i>spline B3</i> (cf. Figure 11) et colocation sur les particules [Gingold et Monaghan, 1983] | | |
| <i>Conservation de la masse</i> | <i>Conservation de la quantité de mouvement</i> | |
| $\dot{\rho}_i - \rho_i \sum_{j=1}^{N_v} \Delta V_j (\dot{\mathbf{q}}_j - \dot{\mathbf{q}}_i) \nabla w(\ \mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\ , h) = 0 \quad (54-d)$ <p>où ΔV_j est le volume associé à la particule j</p> | $\ddot{\mathbf{q}}_i + \sum_{j=1}^{N_v} m_j \left(\frac{\boldsymbol{\sigma}_i}{\rho_i^2} + \frac{\boldsymbol{\sigma}_j}{\rho_j^2} + \frac{\pi_{ij}\mathbf{I}}{\rho_{ij}^2} \right) \nabla w(\ \mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\ , h) = 0$ $\rho_{ij} = \frac{1}{2}(\rho_i + \rho_j)$ $\pi_{ij} = \begin{cases} -\alpha c h \mu_{ij} + \beta h^2 \mu_{ij}^2 & \text{si } \mu_{ij} < 0 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (54-e)$ $\mu_{ij} = \frac{(\dot{\mathbf{q}}_i - \dot{\mathbf{q}}_j) \cdot (\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i)}{\ \mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i\ ^2 + \varepsilon}$ <p>où $m_j = \rho_j \Delta V_j$ est la masse associée à la particule j</p> | |
| <i>Remarques</i> | | |
| <p>Les équations du mouvement sont des versions modifiées des équations obtenues après la stricte discrétisation par l'approche SPH, pour assurer <i>a minima</i> la consistance à l'ordre 0 (approximation d'une fonction constante).</p> <p>L'équation de conservation de la quantité de mouvement intègre une pression visqueuse artificielle déjà rencontrée au paragraphe 2.1.1.3).</p> | | |

Table 24 : Equations pour un fluide modélisé par des particules lagrangiennes SPH

2.2.1.1 Formulation de l'interaction entre des particules fluides SPH et les particules SPHC pour une coque

Dans la mesure où le fluide est représenté par des particules lagrangiennes, la méthode d'interaction fluide-structure est en fait à proprement parler une technique de gestion du contact entre les particules fluides (des sphères) et les particules SPHC (des cylindres, cf. Figure 13).

Parmi les multiples approches disponibles dans l'environnement logiciel EPX, le choix porte logiquement sur l'approche dénommée *pinballs* [Casadei, 2002][Belytschko et O'Neal, 2005], consistant à affecter à chaque élément (cellule d'un maillage ou particule) une sphère auxiliaire utilisée pour la détection des contacts (voir la Figure 61 pour le cas d'un impact entre deux solides éléments finis).

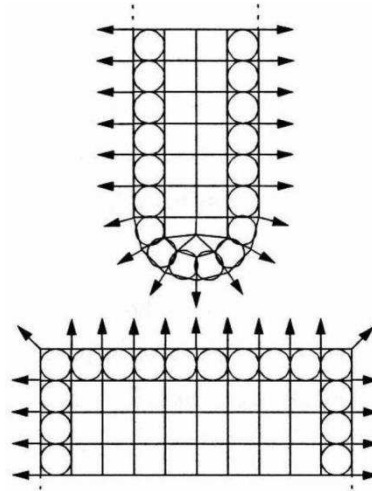


Figure 61 : Contact par la méthode des *pinballs*

La procédure de détection du contact dans le cas général (entre sphères) est alors décrite par la Figure 62.

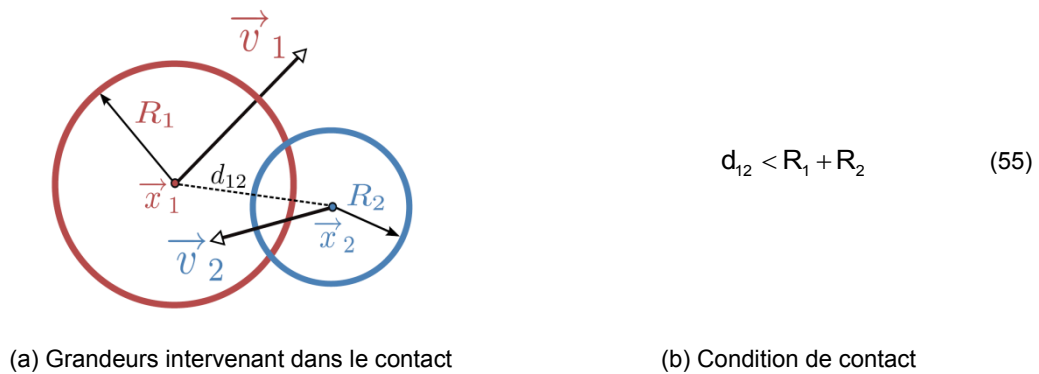


Figure 62 : Détection du contact par la méthode des *pinballs*

Une fois le contact détecté, il est nécessaire d'écrire une contrainte cinématique exprimant la non-interpénétration des corps concernés. En l'absence de frottement, cette contrainte prend la forme courante :

$$(\dot{\mathbf{q}}_1 - \dot{\mathbf{q}}_2) \cdot \mathbf{n}_{12} = 0 \quad (56)$$

La définition de la direction normale est un point clé de la méthode. Elle peut être déduite de considérations globales sur l'enveloppe des corps en contact ou obtenue uniquement à partir de données locales aux couples de *pinballs* deux à deux (i.e. du vecteur reliant les centres des *pinballs*) :

$$\mathbf{n}_{12} = \frac{\mathbf{n}_2 - \mathbf{n}_1}{\|\mathbf{n}_2 - \mathbf{n}_1\|} \Leftrightarrow \text{normale moyenne quand les normales } \mathbf{n}_1 \text{ et } \mathbf{n}_2 \text{ sont connues} \quad (57-a)$$

$$\mathbf{n}_{12} = \frac{\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1}{\|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1\|} \Leftrightarrow \text{vecteur normalisé reliant les centres dans le cas contraire} \quad (57-b)$$

Dans le cas présent d'un contact entre une particule et une coque, un choix pertinent introduit dans [Maurel, 2008] est de prendre pour normale de contact la normale à la coque, indépendamment de la position relative entre les particules et sans considérer la normale à l'enveloppe du domaine fluide.

Une fois la contrainte cinématique connue, les forces de contact (réaction à la contrainte) sont obtenues selon la procédure décrite au paragraphe B-1.2.5 par l'intermédiaire de multiplicateurs de Lagrange. En fonction du signe de la force de réaction, la contrainte peut être relâchée, pour laisser libre le rebond des particules en contact.

La procédure générique ci-dessus est adaptée au cas particulier du contact avec des particules SPHC, en raison de la perte de précision résultant de l'utilisation de *pinballs* exclusivement sphériques (cf. Figure 63).

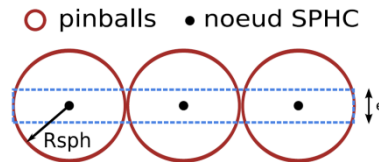


Figure 63 : Mauvaise approximation de la topologie réelle de la coque par des sphères

Une géométrie alternative est alors proposée pour les *pinballs* associés à des particules SPHC [Caleyron, 2011][Caleyron et al., 2013 (2)], avec une procédure de détection spécifique présentée sur la Table 25, la contrainte cinématique assurant la non-pénétration restant inchangée.

| Pinballs cylindriques pour les particules SPHC | Nouveau paramétrage de la situation de contact | Nouvelle condition de contact |
|--|---|---|
| <p>Figure 64 : Pinballs cylindriques</p> | <p>Figure 65 : Paramètres du contact SPH-SPHC</p> | $d_n < \frac{e}{2} + R_2 \quad (58)$ $d_t < a + R_1$ $\begin{cases} d_n = \mathbf{n}_{12} \cdot (\mathbf{c}_2 - \mathbf{c}_1) \\ d_t^2 + d_n^2 = d_{12}^2 \end{cases}$ <p>avec</p> $a = \sqrt{R_2^2 - (R_2 - g)^2}$ $g = R_2 + \frac{e}{2} - d_n$ |

Table 25 : Procédure de détection du contact pour les particules SPHC

2.2.1.2 Validation de l'interaction SPH-SPHC avec déchirure de la coque

Le test de validation choisi dans [Caleyron, 2011] est un impact balistique sur un réservoir, qui peut être vide ou rempli d'eau, dont les résultats expérimentaux figurent dans [Timm, 2003].

La Table 26 présente l'expérience et les simulations associées.

Impact balistique sur un réservoir

Dispositif (éléments principaux)

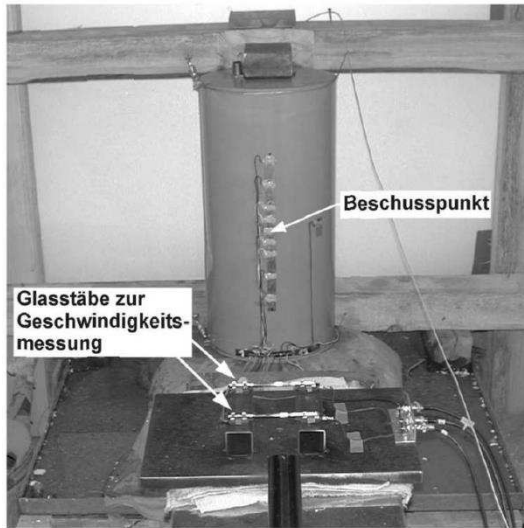


Figure 66 : Banc pour impact balistique

Dimensions du cylindre : hauteur=600 mm, diamètre=300 mm, épaisseur=1 mm

Impacteur : diamètre=18 mm, masse=31 g (représenté comme un corps rigide)

Vitesses d'impact du projectile : 300 à 750 m.s⁻¹

Matériau : acier élasto-plastique, modèle de Johnson-Cook endommageable pour la prise en compte de la vitesse de déformation

Résultats expérimentaux



(a) Réservoir vide

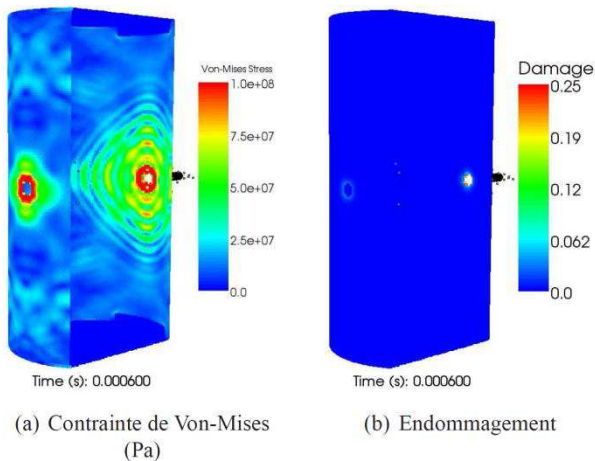
(b) Réservoir plein

Figure 67 : Etat final du réservoir pour une vitesse d'impact de 730 m.s⁻¹

En l'absence de fluide interne, une simple perforation du réservoir est constatée (identique en face arrière).

Au contraire, l'onde de pression dans le fluide provoque la propagation d'une fissure sur toute la hauteur du réservoir.

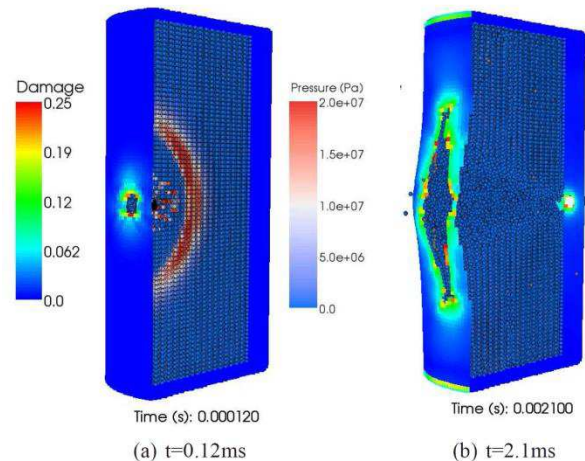
Résultats de simulation



(a) Contrainte de Von-Mises (Pa)

(b) Endommagement

Figure 68 : Simulation sans fluide interne



(a) t=0.12ms

(b) t=2.1ms

Figure 69 : Simulation avec fluide interne

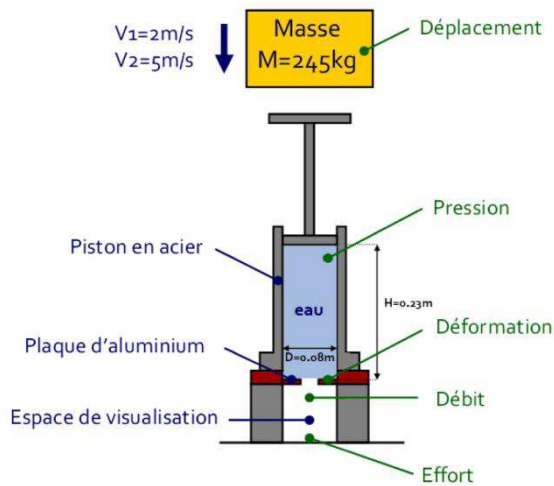
Les caractéristiques des résultats expérimentaux sont bien retrouvées par la simulation, en termes de modes d'endommagement du réservoir et de taille de la fissure dans le cas rempli. Il n'est pas possible de fournir des comparaisons plus poussées en raison des incertitudes sur les caractéristiques réelles du matériau du cylindre (chaque paramètre dans le modèle de comportement dont la valeur ne peut être déduite des informations accompagnant l'expérience se voit affecter une valeur classique prise dans la littérature).

Table 26 : Impact balistique sur un réservoir cylindrique

2.2.1.3 Validation expérimentale approfondie de l'approche SPH-SPHC

Les travaux s'appuient sur une ne campagne expérimentale d'envergure réalisée en 2006 à l'ONERA par J. Fabis pour les besoins de la thèse [Maurel, 2008].

Utilisant la tour de chute de l'ONERA Lille, il consiste en un réservoir métallique cylindrique muni d'un piston sur sa face supérieure sur lequel est lâchée une masse. En face inférieure, diverses plaques sont installées, munies d'ouvertures de forme différentes, du simple trou fermé initialement par un film sans résistance à des formes de découpes plus complexes. Après compression par le piston, le fluide s'écoule par l'ouverture dans un bac de récupération transparent, le jet étant filmé à l'aide d'une caméra rapide. La Figure 70 rassemble les informations sur le dispositif expérimental et la Figure 71 montre quelques images de jets ainsi obtenues.



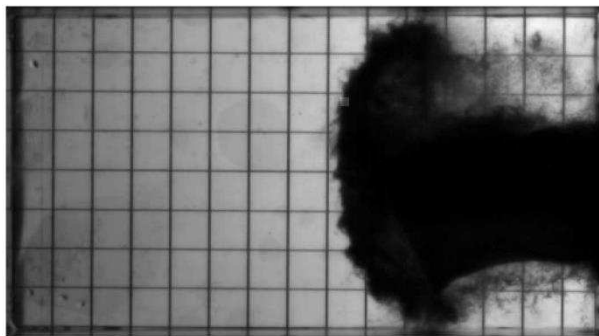
(a) Schéma de principe



(b) Photographie

Figure 70 : Dispositif expérimental pour les essais d'impact sur réservoir ONERA

Le cylindre et le piston sont en acier. La plaque inférieure est en aluminium, choisi pour éviter une dépendance de son comportement à la vitesse de déformation et simplifier la modélisation. Une description exhaustive du système mécanique et des matériaux figure dans [Maurel, 2008] et [Caleyron, 2011].



(a) Jet initial pour un trou circulaire (après 2.5 ms)



(b) Jet initial pour une ouverture préfissurée en U (après 1.75 ms)

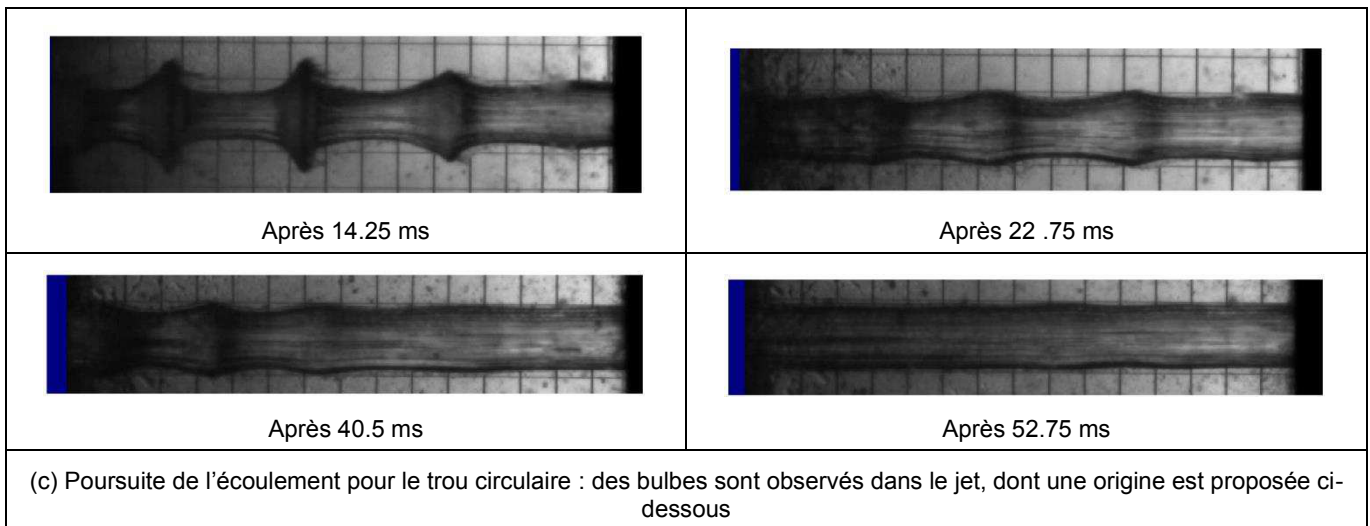


Figure 71 : Visualisation du jet dans le bac de récupération

Le modèle de calcul destiné à la simulation des essais de cette campagne est présenté sur la Figure 72. La plaque inférieure est modélisée à l'aide d'éléments finis ou de particules SPHC (utilisées si la coque se déchire dans l'essai). Le cylindre est représenté avec des éléments finis et le piston est une poutre impactée à son extrémité par un point matériel représentant la masse tombante. Le fluide interne est représenté par des particules SPH, interagissant avec les particules SPHC selon la méthode du paragraphe B-2.2.1.1) et avec les éléments finis à l'aide d'une méthode de contact classique *point contre facette* (nommée ici *surfaces glissantes*). Le modèle est relativement grossier (de l'ordre 100 000 particules pour le fluide et 3000 éléments ou particules pour les coques) pour permettre les nombreux ajustements de modélisation nécessaires au processus de simulation d'essais complexes tels que ceux proposés ici. Des simulations avec des discrétisations plus fines devraient améliorer certaines des conclusions données ci-dessous.

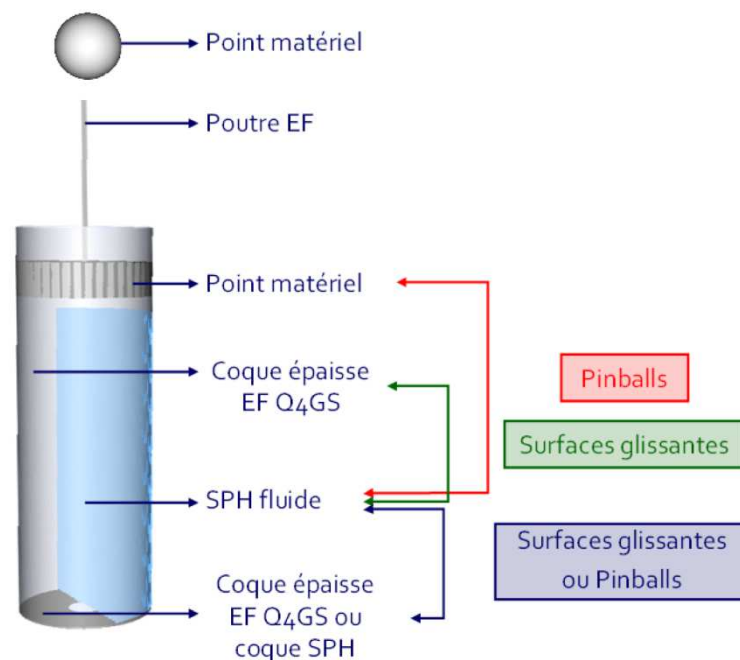


Figure 72 : Modèle de calcul pour la simulation des essais

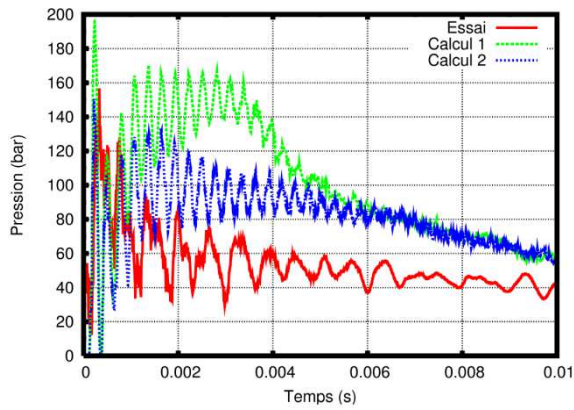
Parmi les nombreuses simulations réalisées et publiées dans [Caleyron et al., 2013 (2)], on s'intéresse à trois cas présentant des enseignements remarquables et reportés sur la Table 27.

Fuite avec trou circulaire dans une plaque épaisse et vitesse d'impact 5 m.s^{-1}

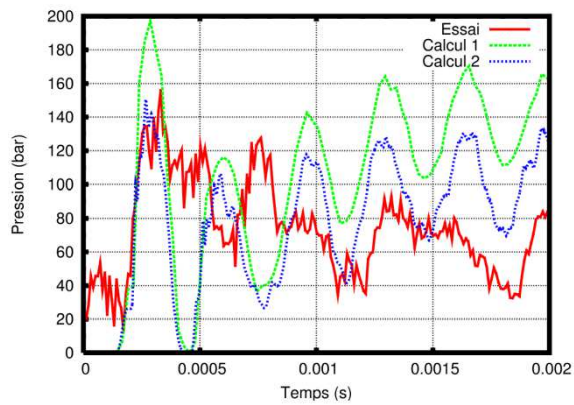
Il s'agit du cas le plus simple permettant de vérifier et calibrer la modélisation du dispositif complet. La plaque inférieure de 25 mm d'épaisseur se déforme très peu.

Dans les résultats de simulation, les calculs 1 et 2 désignent deux modélisations différentes de la condition aux limites d'encastrement pour la plaque inférieure, la seconde étant plus réaliste et donnant les meilleurs résultats [Caleyron, 2011].

Pression dans le fluide



(a) Pression durant l'essai



(c) Zoom sur les premières millisecondes

Figure 73 : Fuite avec trou circulaire – Mesures de pression

Déplacement du piston

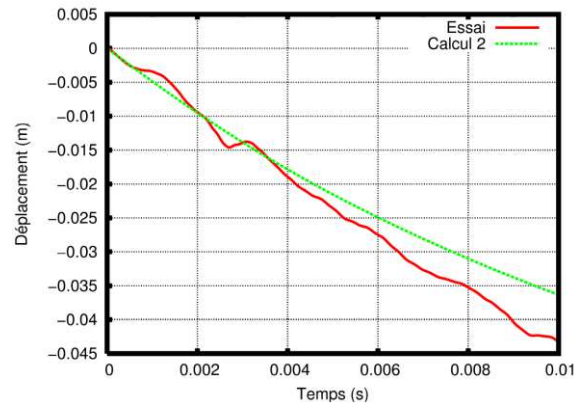


Figure 74 : Fuite avec trou circulaire – Déplacement du piston

Vitesse de sortie du fluide

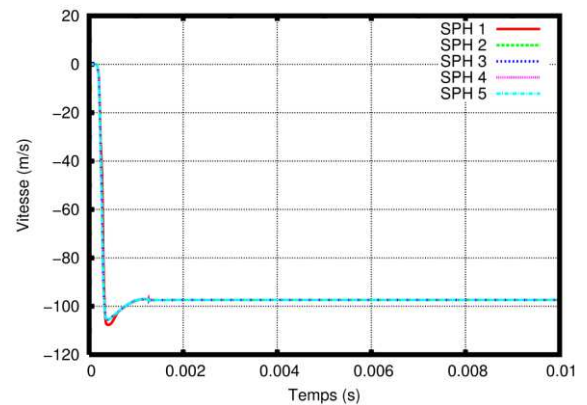


Figure 75 : Fuite avec trou circulaire – Vitesse de sortie des particules SPH

Visualisation de la réponse du système et de la forme du jet

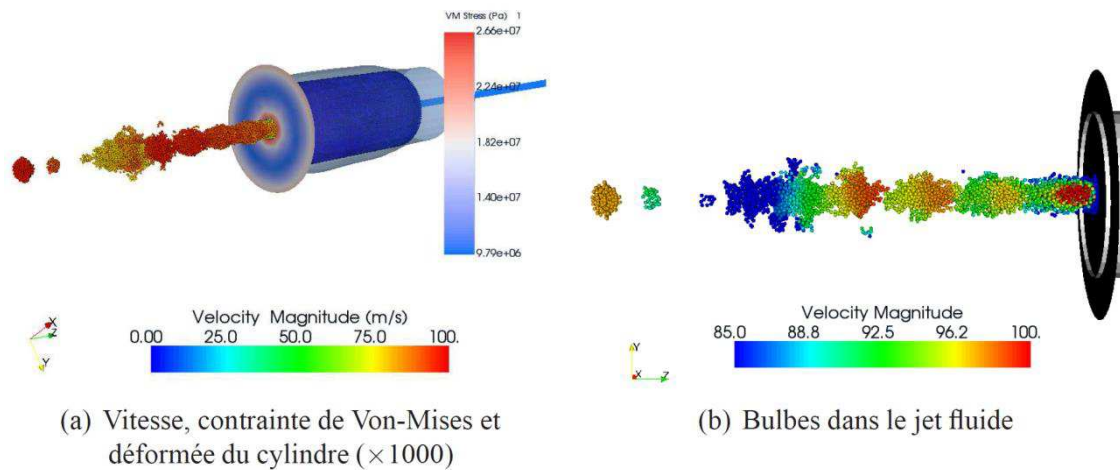


Figure 76 : Fuite avec trou circulaire – Déformation du système et forme du jet après 3 ms

Commentaires

Le recalage du mouvement du piston est satisfaisant, de même que la vitesse de sortie du fluide, mesurée à 92 m.s^{-1} et simulée à 97 m.s^{-1} .

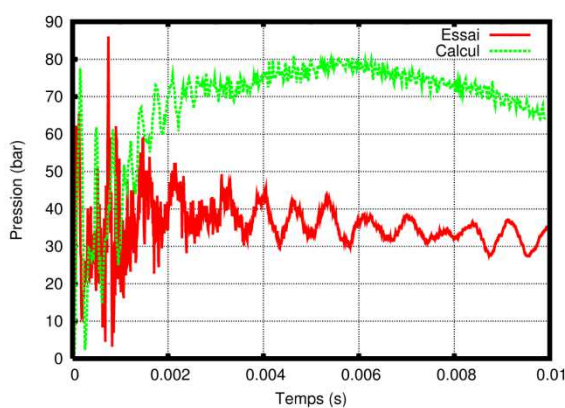
Au contraire, les mesures de pression dans le cylindre sont du même ordre de grandeur que celle de l'essai, mais sont globalement surestimées par la simulation. On peut attribuer cette précision perfectible à la loi d'état de type liquide faiblement compressible utilisée pour le liquide, qui rend la pression très sensible à la moindre variation de densité et en particulier à la qualité du remplissage du volume interne du cylindre par les particules SPH.

Enfin, la représentation des bulbes dans le jet requiert la représentation du système fluide-structure complet, la période d'apparition de ces bulbes étant corrélées avec le premier mode de gonflement du cylindre.

Fuite avec préfissure en U dans une plaque mince et vitesse d'impact de 5 m.s^{-1}

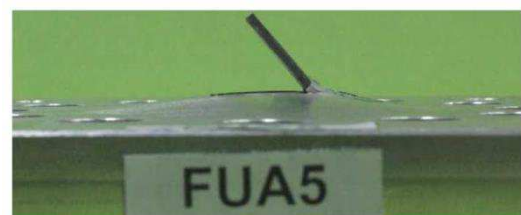
La fissure initiale ne se propage pas, il est donc inutile de mettre en œuvre la méthodologie SPHC sur ce test. Il présente un intérêt particulier dans la mesure où l'angle formé à l'instant final entre la languette et le plan initial de la plaque représente un paramètre de validation très pertinent.

Pression dans le fluide

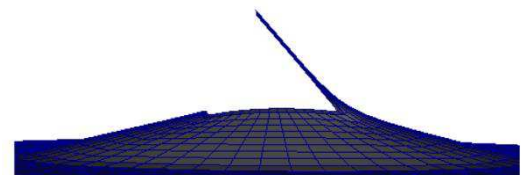


(a) Pression durant l'essai

Comparaison des déformations finales de la languette

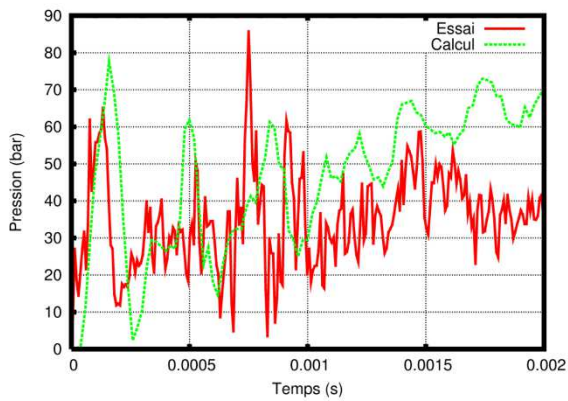


(a) Déformation expérimentale



(b) Déformation simulée

Figure 78 : Fuite avec préfissure en U – Déformation de la languette



(b) Zoom sur les premières millisecondes

Figure 77 : Fuite avec préfissure en U – Mesures de pression

Visualisation du système complet et du jet

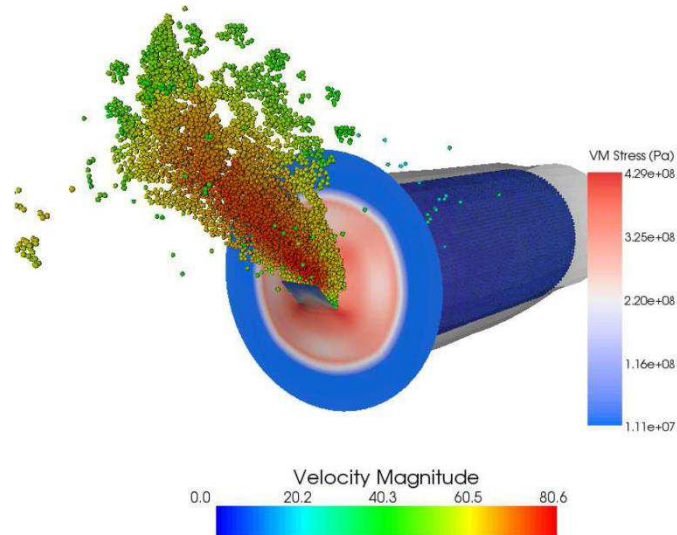


Figure 79 : Fuite avec préfissure en U – Système complet et visualisation du jet

Commentaires

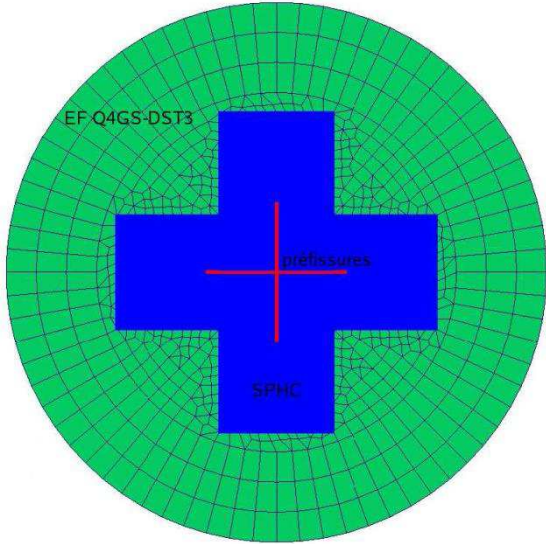
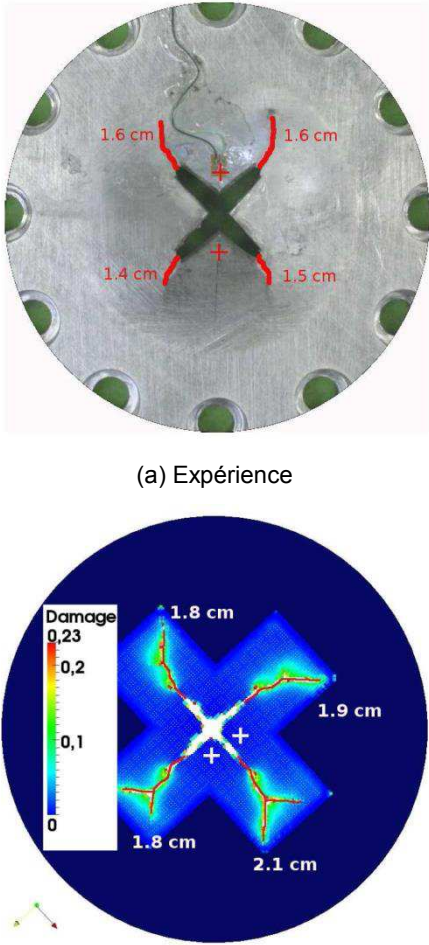
On retrouve la même imprécision que pour le cas précédent dans la simulation de la pression après les premiers instants où les propagation d'ondes sont prépondérantes. Ensuite, la relation entre la densité globale du liquide et sa pression, en lien avec la représentation du volume fluide, devient dominante, conduisant à une erreur importante par rapport à l'essai.

Au contraire, la déformation de la languette est très bien reproduite, avec un angle de 50° mesuré expérimentalement et simulé.

Fuite avec préfissure en X dans une plaque mince et vitesse d'impact 5 m.s^{-1}

A présent, la préfissure se propage à partir de ses extrémités et la partie utile de la plaque inférieure est ainsi représentée avec des particules SPHC.

Un couplage continu est mis en œuvre entre des particules SPHC et des éléments finis de plaque, utilisant une zone de recouvrement suivant l'approche Arlequin [Ben Dhia et Rateau, 2004][Caleyron, 2011].

| Modèle de la plaque inférieure | Comparaison entre les profils de fissuration au terme de l'essai |
|---|--|
|  <p data-bbox="181 1066 774 1122">Figure 80 : Représentation de la plaque inférieure avec couplage éléments finis – particules SPHC</p> |  <p data-bbox="1082 748 1241 779">(a) Expérience</p> <p data-bbox="1082 1256 1241 1288">(b) Simulation</p> <p data-bbox="852 1301 1474 1357">Figure 81 : Fuite avec pré-fissure en X – Comparaison des profils de fissuration</p> |

Visualisation du système complet et du jet

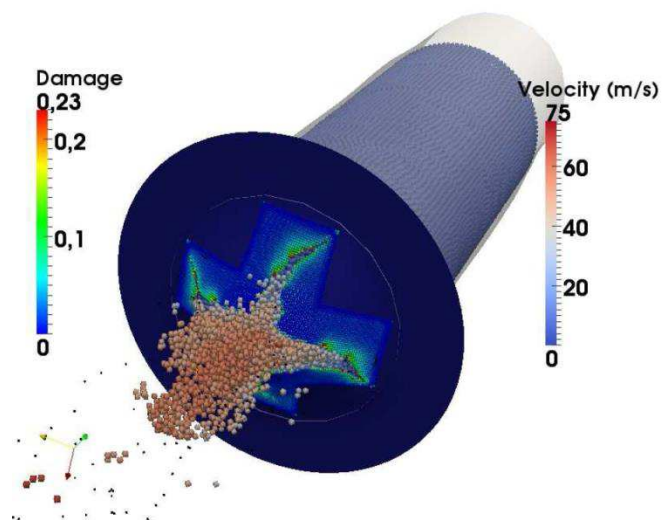


Figure 82 : Fuite avec pré-fissure en X – Système complet et visualisation du jet

Commentaires

Le processus de fissuration est bien reproduit par la simulation, notamment en termes de trajectoire. Les fissures simulées sont un peu trop longues, ce qui peut être attribué à la taille excessive des particules SPH fluides, qui chargent plus fortement les lèvres des fissures.

Des branchements apparaissent dans la simulation et pas dans l'essai, mais ils sont probablement dûs à la proximité de la zone de couplage avec les éléments finis, qui modifie logiquement le processus d'endommagement dans le voisinage SPHC.

Ce dernier cas valide tout de même de manière satisfaisante la capacité de l'approche couplée SPH-SPHC à prévoir la déchirure d'un réservoir sous impact.

Table 27 : Validation de l'approche SPH-SPHC sur des simulations complexes d'impact sur réservoir

2.2.2 Approche anti-diffusive pour les écoulements à interfaces

Les écoulements à interface sont un élément clé des simulations d'explosion en eau (ou en sodium), que ce soit pour la prise en compte du comportement d'une bulle de gaz incondensable comprimée ou pour la représentation de mouvements de surface libre complexes, en particulier dans des configurations où la réponse couplée du gaz de couverture avec le liquide est importante, interdisant alors l'emploi d'approche de type SPH (cf. Accident de Dimensionnement du Confinement sur la Table 4). La problématique principale associée à ce type d'écoulements est logiquement la localisation de l'interface.

Remarque :

Sont uniquement considérés dans ce paragraphe des fluides non-miscibles, donnant lieu à des interfaces physiquement de mesure nulle. Ce n'est pas le cas pour l'analyse du comportement multi-phasique d'un fluide, qui peut également être vu comme l'interaction de fluides aux comportements différents, mais alors, les interfaces ont une extension physique associée au changement de phase.

Pour le suivi d'interfaces de mesure nulle, deux classes principales de méthodes sont à distinguer et sont rappelées sur la Table 28.

| Approches sans mélange | Approches avec mélange |
|--|---|
| <i>Caractéristiques</i> | |
| <p>L'interface entre chaque phase du domaine fluide est exactement localisée et le volume occupé par chaque fluide à tout instant de la simulation est exactement pris en compte.</p> <p>Ceci peut se faire à l'aide d'une modélisation lagrangienne de l'interface entre chaque fluide et un matériau différent, correspondant à chacun des fluides en présence, est alors affecté à chaque zone du maillage.</p> <p>Une autre approche, désignée sous le nom générique de <i>Volume Of Fluid (VOF)</i> [Lafaurie et al., 1994][Mosso et Cleancy, 1995], consiste à utiliser un maillage eulérien pour le domaine fluide et à considérer un matériau unique pour l'ensemble du domaine, avec des variables propres donnant localement la concentration de chacune des phases en présence. A partir du champ des concentrations, l'interface physique entre les phases est reconstruite, sous la forme d'un maillage explicite immergé dans la grille fluide (<i>front tracking</i>) ou encore de lignes de niveaux (<i>level sets</i>, [Sussman et al., 1994]).</p> | <p>Comme pour l'approche <i>VOF</i>, un seul matériau est affecté à l'ensemble du domaine fluide, avec un suivi de la concentration de chacune des phases dans les mailles.</p> <p>Cependant, à présent, le volume occupé par les différentes phases n'est pas pris en compte exactement. Chaque maille est supposée remplie d'un mélange homogène des différents fluides, dont les caractéristiques thermodynamiques sont déduites des concentrations et des propriétés de chacun des fluides.</p> |
| <i>Avantages</i> | |
| <p><i>Interface lagrangienne</i></p> <p>On assure ainsi de manière forte la non-miscibilité des fluides, puisqu'aucun transfert de matière n'intervient au niveau des frontières.</p> <p><i>Volume Of Fluid</i></p> <p>Connaissant la position de l'interface, les mailles contenant plusieurs phases sont sous-découpées sous la forme d'un assemblage de polyèdres, chacun contenant exclusivement une phase, ce qui assure encore la non-miscibilité.</p> | <p>L'intégration dans un solveur fonctionnel pour un fluide homogène est très simple et robuste, avec un surcoût minimal pour prendre en compte des fluides multi-composants.</p> |

| Inconvénients | |
|--|--|
| <p>Interface lagrangienne</p> <p>Dans le cas de l'expansion importante d'une bulle, de grands mouvements de surface libre ou de l'interaction avec des structures complexes, il est impossible de maîtriser la déformation du maillage. Cette approche est ainsi trop limitée pour permettre des simulations industrielles.</p> <p>Volume of Fluid</p> <p>Les opérations géométriques pour reconstruire l'interface et découper les mailles sont complexes et coûteuses, en particulier pour des maillages non-structurés en 3D.</p> | <p>La formulation avec mélange vient en contradiction avec l'hypothèse initiale de non-miscibilité des différents fluides.</p> <p>La problématique principale tient alors à la diffusion numérique des variables concentration en cours de calcul, ce qui produit une extension non-physique de la zone de mélange. Il est donc nécessaire de la contrôler pour préserver les sauts de concentration entre les phases, permettant de localiser implicitement les interfaces.</p> <p>Un tel contrôle peut être obtenu à l'aide d'une localisation explicite de l'interface, comme pour l'approche VOF, ce qui permet de gérer les flux parasites des constituants à travers l'interface, en limitant la complexité géométrique à la gestion du modèle d'interface. La gestion de topologies d'interface très complexes peut toutefois toujours s'avérer délicate.</p> |

Table 28 : Classes de méthodes pour le suivi d'interface entre fluides non-miscibles

Malgré les inconvénients cités ci-dessus, l'utilisation d'une approche avec mélange sans localisation explicite de l'interface est la plus adéquate pour mettre en œuvre des simulations complexes en interaction fluide-structure, du fait de sa robustesse et de sa compatibilité aisée avec les autres fonctionnalités d'un code de calcul industriel en dynamique rapide tel qu'EPX. Il est alors indispensable de lui adjoindre une technique de contrôle de la diffusion numérique des concentrations. De telles méthodes existent pour les grilles structurées et pour une large gamme d'équations d'état dans les travaux de B. Després, F. Lagoutière et S. Kokh [Després et Lagoutière, 2007][Kokh et Lagoutière, 2010]. Une première extension aux maillages non-structurés est disponible sous le nom de VOFIRE dans [Després et al., 2011], dont l'adaptation à des simulations de complexité industrielle en interaction fluide-structure fait l'objet du présent paragraphe.

2.2.2.1 Principe anti-diffusif et approche VOFIRE initiale

La problématique de la diffusion numérique est introduite par la Figure 83. Une bulle de gaz pressurisé à 20 bars est immergée dans un liquide remplissant la moitié inférieure d'un réservoir rigide fermé représenté en 2D avec l'hypothèse de déformations planes. La partie supérieure du réservoir est remplie par le même gaz que celui de la bulle, initialement au repos à la pression de 1 bar. On s'intéresse à la fraction volumique du gaz après 10 ms dans le cas de la bulle immergée. La variable représentée est comprise entre 0 (liquide seul) et 1 (gaz seul).

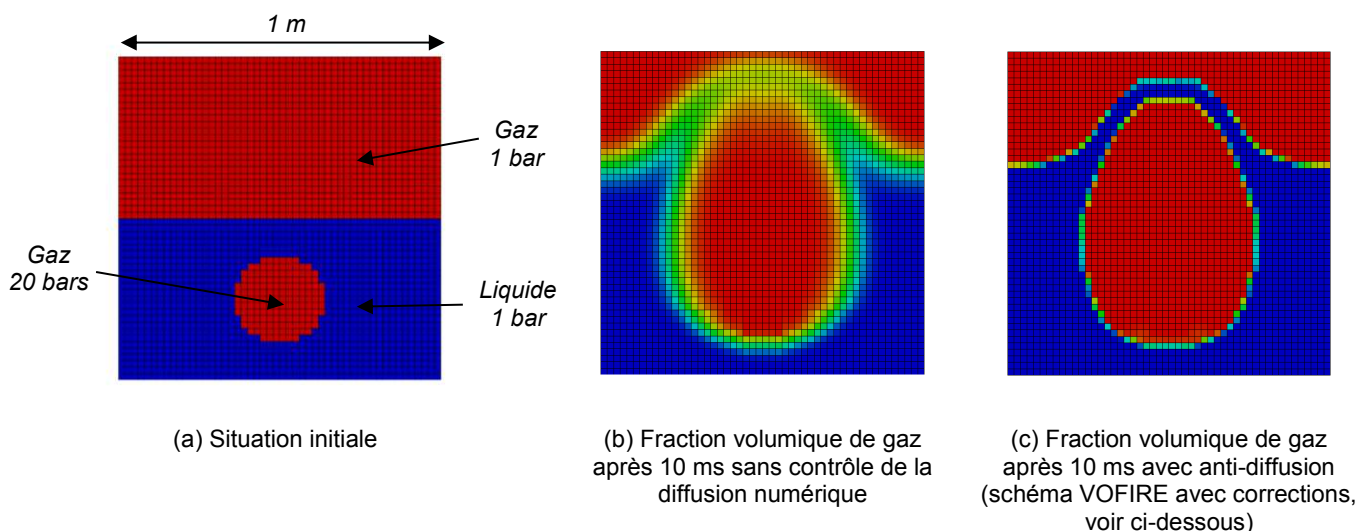


Figure 83 : Exemple illustratif du problème de diffusion numérique

Sans contrôle de la diffusion numérique, on observe une zone de mélange importante dans les deux composants fluides, rendant impossible la localisation précise de l'interface liquide-gaz, pourtant physiquement de mesure nulle. La définition d'une stratégie anti-diffusive palliative est alors illustrée par le problème modèle décrit sur la Table 29.

Advection monodimensionnelle d'une fonction de Heavyside dans un champ de vitesse uniforme

Description du problème

Le problème discrétisé à l'aide d'une approche volumes finis et un pas spatial Δx est illustré par la Figure 84.

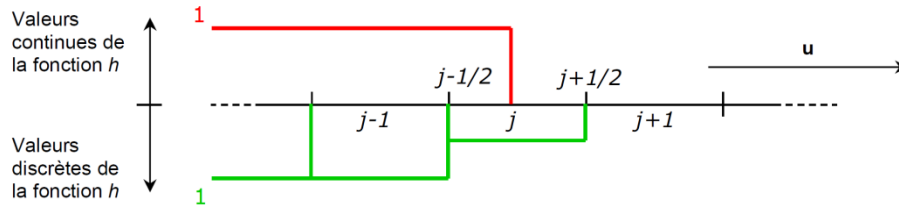
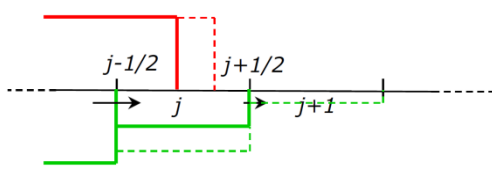


Figure 84 : Problème d'advection d'une fonction de Heavyside dans un champ de vitesse uniforme

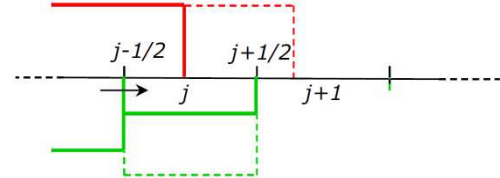
A un instant donné de l'échelle d'intégration temporelle, de pas de temps Δt , le front de la fonction se trouve dans la cellule j . La question porte alors sur le choix de la valeur discrète $h_{j+1/2}$ de la fonction h à considérer au niveau de la frontière $[j+1/2]$ de la cellule j pour écrire le flux $u \frac{\Delta t}{\Delta x} h_{j+1/2}$, intervenant dans le bilan de la fonction h dans la cellule entre l'instant courant et le suivant. Cette situation présente deux cas limite présentés ci-dessous.

Décentrement amont total (upwind) : $h_{j+1/2} = h_j$



Le flux est non-nul dès que h_j est non-nul, si bien qu'au niveau discret, la fonction se propage dans la cellule $j+1$ avant que le front analytique ait atteint la frontière $[j+1/2]$, ce qui est à l'origine de la diffusion numérique observée.

Décentrement aval total (downwind) : $h_{j+1/2} = h_{j+1}$



Le flux est toujours nul. Tant que le front théorique est localisé dans la cellule j , la diffusion numérique est bloquée. La solution devient fautive lorsque le front passe dans la cellule $j+1$, car la fonction ne peut être transportée à travers la frontière $[j+1/2]$. Il en résulte une augmentation instable de h dans la cellule j .

Table 29 : Problème modèle pour l'analyse de la diffusion numérique

Ces deux cas limite introduisent le concept de base établi par B. Després et F. Lagoutière : la recherche d'un schéma avec décentrement aval, associé à des contraintes lui permettant de rester stable lorsqu'une discontinuité traverse la frontière d'une cellule (*Downwind Scheme with Constraints*).

Les contraintes à considérer sont les suivantes :

$$\text{Consistance pour le flux : } m_{j+1/2} = \min(h_j, h_{j+1}) \leq h_{j+1/2} \leq \max(h_j, h_{j+1}) = M_{j+1/2} \quad (59-a)$$

$$\text{Stabilité pour l'advection : } m_{j-1/2} = \min(h_{j-1}, h_j) \leq h_j^* \leq \max(h_{j-1}, h_j) = M_{j-1/2} \quad (59-b)$$

$$\text{où } h_j^* = h_j + u \frac{\Delta t}{\Delta x} (h_{j-1/2} - h_{j+1/2})$$

En prenant en compte l'encadrement (59-a) pour le flux $h_{j-1/2}$, une condition suffisante pour la stabilité est donnée par les deux inégalités :

$$\begin{cases} m_{j-1/2} \leq h_j + u \frac{\Delta t}{\Delta x} (m_{j-1/2} - h_{j+1/2}) \\ h_j + u \frac{\Delta t}{\Delta x} (M_{j-1/2} - h_{j+1/2}) \leq M_{j-1/2} \end{cases} \quad (60)$$

On en déduit deux intervalles de confiance pour le $h_{j+1/2}$:

$$\begin{aligned}
m_{j+1/2} &\leq h_{j+1/2} \leq M_{j+1/2} \\
M_{j-1/2} + \frac{\Delta x}{u\Delta t}(M_{j-1/2} - h_j) &\leq h_{j+1/2} \leq m_{j-1/2} + \frac{\Delta x}{u\Delta t}(m_{j-1/2} - h_j)
\end{aligned}
\tag{61}$$

L'intersection de ces deux intervalles est forcément non-vide, car le choix *upwind* pour le flux est toujours stable. Le traitement anti-diffusif consiste alors à choisir pour $h_{j+1/2}$ la valeur la plus proche dans cette intersection de la valeur *downwind* h_{j+1} .

Ce traitement est aisément étendu au cas multidimensionnel sur maillages cartésiens en appliquant la technique du *Direction Splitting*, qui consiste à résoudre successivement pour chaque cellule un problème monodimensionnel dans chaque direction d'espace.

En ce qui concerne l'application de cette approche pour les écoulements multi-composants, le traitement anti-diffusif porte sur une variable scalaire discontinue définissant l'état du mélange (fraction massique ou volumique d'un des composants par exemple, pour le cas particulier de deux composants). Une fois cette variable identifiée sur la frontière des cellules, le calcul des flux des quantités pilotant l'écoulement (masse, énergie et quantité de mouvement) diffère suivant les équations d'état choisies pour les composants. Un exemple pour un mélange de *stiffened gas* est donné dans [Kokh et Lagoutière, 2010]. Les équations spécifiques à EPX sont données au paragraphe suivant.

L'approche VOFIRE étend le raisonnement précédent de décentrement aval sous contrainte aux maillages non-structurés en 2D et 3D. A titre d'illustration, le résultat de l'application de l'approche anti-diffusive (schéma VOFIRE complet pour les grilles non-structurées) dans le cas de l'expansion d'une bulle pressurisée est présenté sur la Figure 83-c. On observe la limitation de l'épaisseur de la zone de mélange à la dimension d'une maille, ce qui correspond à un résultat théorique démontré pour le cas monodimensionnel dans [Kokh et Lagoutière, 2010].

2.2.2.2 Schéma VOFIRE pour des écoulements liquide-gaz

Les concepts précédents sont adaptés à un fluide multi-composants utilisé couramment dans EPX pour la simulation des transitoires explosifs en eau [Faucher et Kokh, 2013]. La Table 30 précise en particulier les équations de conservation de la masse modifiées pour prendre en compte les différentes espèces fluides (et leur expression discrète en espace et en temps après mise en œuvre d'une approche volumes finis, cf. paragraphe B-1.2.4), ainsi que la loi d'état utilisée pour chacune d'entre elles. On se restreint au cas de deux composants, un liquide et un gaz, l'extension au cas utile de trois composants, avec deux gaz, étant proposée dans [Faucher et Kokh, 2013]. Les lois d'état mises en œuvre font dépendre la pression de la masse volumique uniquement, si bien que l'équation de conservation de l'énergie est inutile. Cela n'induit aucune spécificité dans l'écriture du schéma VOFIRE correspondant.

Par ailleurs, le schéma proposé dans [Després et al., 2011] repose sur une approche *Lagrange-Projection*, i.e. à partir d'un champ de vitesse donné, un pas lagrangien est effectué, suivi d'une projection sur la grille initiale, éventuellement déplacée suivant la vitesse de grille en ALE. Dans la suite du paragraphe, on s'intéresse uniquement à la phase de projection, qui contient le traitement anti-diffusif. En particulier, la surface d'une cellule et la densité du fluide à l'intérieur qui sont considérées sont les quantités actualisées dans les mailles après le pas lagrangien (notées \sim).

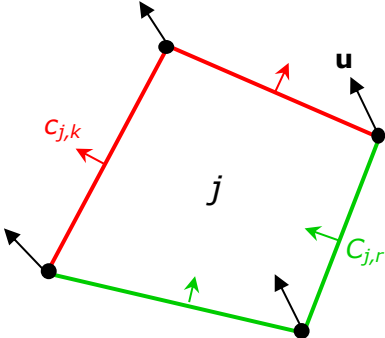
| Equations de conservation de la masse | Lois d'état |
|---|--|
| Conservation de la masse totale | Loi polytropique pour le gaz |
| $\dot{\rho} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0$ (62-a) | $\frac{P}{\rho^n} = \frac{P_{ref}}{\rho_{ref}^n}$ (62-c) |
| Conservation de la masse de gaz | Loi acoustique pour le liquide |
| $\dot{c}\rho + \nabla \cdot (c\rho \mathbf{u}) = 0$ (62-b) où c est la concentration (fraction massique) du gaz | $dP = C^2 d\rho$ (62-d) où C est la célérité du son |
| Equations de conservation discrètes (pour une cellule j du maillage) | |
|  <p>Dans les équations (62-e) et (62-f), $\{N^+\}$ désigne l'ensemble des faces <i>donneuses</i> pour la cellule ($\mathbf{L}_{j,k} \cdot \mathbf{u}_{j,k} > 0$), alors que $\{N\}$ désigne l'ensemble des faces <i>receveuses</i> ($\mathbf{L}_{j,r} \cdot \mathbf{u}_{j,r} < 0$), $\mathbf{L}_{j,k}$ étant le vecteur surface, orienté vers l'extérieur de la cellule, pour une face donneuse, et $\mathbf{L}_{j,r}$ le vecteur surface pour une face receveuse.</p> | |
| Figure 85 : Cellule typique d'un maillage non-structuré | |
| Conservation de la masse totale | |
| $S_j^{n+1} \rho_j^{n+1} - \tilde{S}_j^n \tilde{\rho}_j^n + \Delta t \sum_k (\mathbf{L}_{j,k}^n \cdot \mathbf{u}_{j,k}^n) \rho_{j,k}^{fn} = 0$ (62-e) | |
| Conservation de la masse de gaz | |
| $S_j^{n+1} \rho_j^{n+1} c_j^{n+1} - \tilde{S}_j^n \tilde{\rho}_j^n c_j^n + \Delta t \sum_{k \in N^+} (\mathbf{L}_{j,k}^n \cdot \mathbf{u}_{j,k}^n) \rho_{j,k}^{fn} c_{j,k}^n + \Delta t \sum_{r \in N} (\mathbf{L}_{j,r}^n \cdot \mathbf{u}_{j,r}^n) \rho_{j,r}^{fn} c_{j,r}^n = 0$ (62-f) | |

Table 30 : Equations de conservation de la masse (continues et discrètes) et lois d'état pour un écoulement liquide-gaz

Les équations (62-e) et (62-f) dépendent d'une densité totale reconstruite sur les faces des cellules notée $\rho_{j,k}^{fn}$. Dans le schéma VOFIRE original, cette quantité est obtenue par un traitement individuel de l'équation de conservation de la masse totale, indépendante du processus d'anti-diffusion, reposant par exemple sur une reconstruction au second ordre du champ de densité totale. Cette hypothèse est remise en cause dans la suite pour des fluides présentant de grands rapports de densité.

On introduit les quantités :

$$\rho_{j,k} = \frac{(\mathbf{L}_{j,k} \cdot \mathbf{u}_{j,k}) \rho_{j,k}^{fn}}{L^+} ; \rho_{j,r} = \frac{(\mathbf{L}_{j,r} \cdot \mathbf{u}_{j,r}) \rho_{j,r}^{fn}}{L^-} \quad (63)$$

$$L^+ = \sum_{k \in N^+} (\mathbf{L}_{j,k} \cdot \mathbf{u}_{j,k}) \rho_{j,k}^{fn} ; L^- = \sum_{r \in N} (\mathbf{L}_{j,r} \cdot \mathbf{u}_{j,r}) \rho_{j,r}^{fn}$$

La procédure anti-diffusive correspondant au schéma VOFIRE est alors donnée sur la Table 31. Le schéma se présente sous la forme d'une première étape, dite *reconstruction transverse*, destinée à prendre en compte le non-alignement du champ de vitesse sur les directions du maillage (voir [Després et al., 2011] pour une interprétation géométrique détaillée), suivie d'une seconde étape, dite *reconstruction longitudinale*, consistant à réécrire le bilan (62-f) sous la forme d'une somme convexe de problèmes pseudo-monodimensionnels impliquant chacun une face receveuse et une face donneuse de la cellule (cf. Table 31 et [Faucher et Kokh, 2013]).

Pour la reconstruction transverse (voir équation (64-a)), les coefficients $\lambda_{j,k}$ sont choisis pour minimiser une fonctionnelle J , exprimant la distance entre la valeur de c sur la face et la valeur *downwind* sur le jeu complet des faces donneuses, sous la contrainte de conserver le flux sortant total.

Pour la reconstruction longitudinale, on considère la décomposition (64-c) pour la concentration en gaz sur les faces donneuses. Si les coefficients $\mu_{j,k,r}$ valent 1 pour toutes les faces receveuses r , on obtient la valeur *downwind* pour la concentration reconstruite sur la face donneuse k de la cellule j . Au contraire, on obtient la valeur *upwind* si les coefficients valent 0.

La convexité de la somme (64-d) permet d'obtenir une condition suffisante pour la stabilité du flux de masse de gaz en imposant la stabilité de la chaque terme individuellement. Les inégalités obtenues donnent l'intervalle de confiance pour le coefficient $\mu_{j,k,r}$ associé à chaque face receveuse, en utilisant également l'encadrement $m_{j,r} \leq c_{j,r} \leq M_{j,r}$ (consistance du flux pour la face r). On choisit alors la valeur $\mu_{j,k,r}$ la plus proche de 1 dans cet intervalle et on obtient la valeur de $c_{j,k}$ avec anti-diffusion à l'aide de l'équation (64-c), en prenant également en compte l'intervalle de consistance pour le flux.

| Reconstruction transverse de la concentration en gaz | |
|--|---|
| <i>Expression de la concentration reconstruite</i> | <i>Problème de minimisation associé</i> |
| $c_{j,k}^R = c_j^n + \lambda_{j,k} (c_k^n - c_j^n), \quad \forall k \in N^+, \quad \lambda_{j,k} \in [0,1] \quad (64-a)$ <p>où c_k^n est à nouveau la densité <i>downwind</i> pour la face k</p> | $J = \sum_{k \in N^+} p_{j,k} c_{j,k}^R - c_k^n \quad (64-b)$ <p>sous la contrainte $\sum_{k \in N^+} p_{j,k} (c_k^n - c_j^n) \lambda_{j,k} = 0$</p> |
| Reconstruction longitudinale | |
| <i>Décomposition de la concentration sur les faces donneuses</i> | |
| $c_{j,k}^n = c_{j,k}^R + \sum_{r \in N^-} p_{j,r} \mu_{j,k,r} (c_k^n - c_{j,k}^R); \quad \mu_{j,k,r} \in [0,1] \quad (64-c)$ | |
| <i>Injection dans l'équation de conservation de la masse de gaz et réorganisation des termes</i> | |
| $\sum_{k \in N^+, r \in N^-} p_{j,k} p_{j,r} \left\{ S_j^{n+1} \rho_j^{n+1} c_j^{n+1} - \tilde{S}_j^n \rho_j^n c_j^n + \Delta t L^+ [c_{j,k}^R + \mu_{j,k,r} p_{j,r} (c_k^n - c_{j,k}^R)] + \Delta t L^- c_{j,r}^n \right\} = 0 \quad (64-d)$ <p>Somme convexe puisque $\sum_{k \in N^+, r \in N^-} p_{j,k} p_{j,r} = 1$</p> | |
| <i>Consistance du flux de masse de gaz</i> | <i>Stabilité du flux de masse de gaz</i> |
| $m_{j,k} = \min[c_j^n, c_k^n] \leq c_{j,k}^n \leq \max[c_j^n, c_k^n] = M_{j,k} \quad (64-e)$ | $m_j = \min[c_j^n, \min_{r \in N^-} (c_{j,r}^n)] \leq c_j^{n+1} \leq \max[c_j^n, \min_{r \in N^-} (c_{j,r}^n)] = M_j \quad (64-f)$ |
| <i>Intervalle de confiance pour le choix du paramètre $\mu_{j,k,r}$ (termes de la somme (64-d) pris séparément)</i> | |
| <p>stabilité $\Leftrightarrow \mu_{j,k,r} \in [b, B]$ (64-g)</p> <p>où $b = \min(B_1, B_2); B = \max(B_1, B_2),$</p> $B_1 = \frac{m_{j,r} (\tilde{S}_j^{n+1} \rho_j^{n+1} - \Delta t L^-) - \tilde{S}_j^n \rho_j^n c_j^n - \Delta t L^+ c_{j,k}^R}{\Delta t L^+ (c_{j,k}^R - c_k^n)}; \quad B_2 = \frac{M_{j,r} (\tilde{S}_j^{n+1} \rho_j^{n+1} - \Delta t L^-) - \tilde{S}_j^n \rho_j^n c_j^n - \Delta t L^+ c_{j,k}^R}{\Delta t L^+ (c_{j,k}^R - c_k^n)}$ | |

Table 31 : Schéma VOFIRE initial pour un écoulement liquide-gaz

Deux problèmes sont identifiés avec le schéma original [Faucher et Kokh, 2013], d'une part lorsque les fluides concernés ont un grand rapport entre leurs densités respectives, d'autre part lorsque le schéma est mis en œuvre sur une grille structurée (cf. Table 32 pour une illustration de chaque situation).

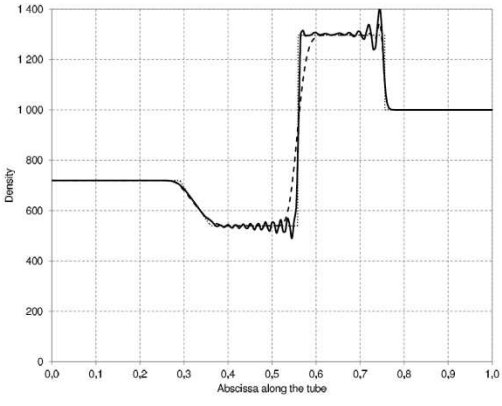
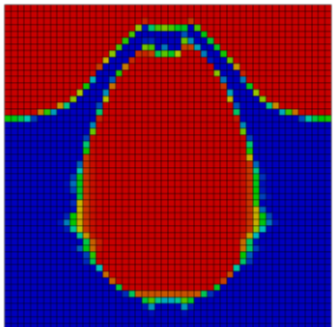
| Grands rapports de densité entre les fluides | Application du schéma original sur grilles structurées |
|---|---|
| <p>Le calcul de la densité totale sans tenir compte de la reconstruction des concentrations ne permet pas de vider entièrement une maille remplie de liquide en y injectant du gaz.</p> <p>Tant qu'il reste du liquide, la densité du fluide sortant devrait être celle du liquide. Ce n'est pas le cas avec une reconstruction classique, même au second ordre. En conséquence, une quantité trop faible de liquide est poussée hors de la maille à chaque pas de temps. Il en résulte des oscillations dans le champ de densité pouvant rendre le schéma instable (cf. Figure 86 donnant le profil de densité obtenu pour le cas de tube à choc de la Figure 83).</p>  <p>Figure 86 : Densité le long du tube après 4.74×10^{-7} s avec le schéma VOFIRE original</p> | <p>Des artefacts apparaissent sur la frontière d'une bulle de forme quasi-sphérique (circulaire en 2D) se détendant dans un liquide avec l'utilisation d'une grille cartésienne (cf. Figure 87 dans le cas bidimensionnel introduit par la Figure 83)</p>  <p>Figure 87 : Artefacts sur la frontière avec le schéma VOFIRE original</p> <p>Ces artefacts induisent des instabilités dans le champ de pression et conduisent à l'arrêt de la simulation.</p> |

Table 32 : Problèmes identifiées avec le schéma VOFIRE original

La correction du premier problème requiert de modifier le processus de reconstruction de la densité totale sur la face *donneuse* k , en la reliant à la concentration reconstruite sur une telle face, en utilisant les densités par fluide *upwind* et en partitionnant un volume arbitraire V considéré sur la face en une fraction de liquide et une fraction de gaz (α_j désignant la fraction volumique du gaz dans la maille j) :

$$\rho_{j,k}^{\text{gaz}} = \rho_j^{\text{gaz}} = \frac{c_j \rho_j}{\alpha_j}; \rho_{j,k}^{\text{liq}} = \rho_j^{\text{liq}} = \frac{(1-c_j) \rho_j}{1-\alpha_j} \quad (65)$$

$$V = V_{\text{gaz}} + V_{\text{liq}} \Leftrightarrow \frac{m}{\tilde{\rho}_{j,k}^f} = \frac{m^{\text{gaz}}}{\rho_{j,k}^{\text{gaz}}} + \frac{m^{\text{liq}}}{\rho_{j,k}^{\text{liq}}} = \frac{c_{j,k} m}{\rho_{j,k}^{\text{gaz}}} + \frac{(1-c_{j,k}) m}{\rho_{j,k}^{\text{liq}}} \Leftrightarrow \tilde{\rho}_{j,k}^f = \frac{\rho_{j,k}^{\text{gaz}} \rho_{j,k}^{\text{liq}}}{(1-c_{j,k}) \rho_{j,k}^{\text{gaz}} + c_{j,k} \rho_{j,k}^{\text{liq}}}$$

Pour obtenir la densité pour le calcul du flux de masse totale, un processus itératif doit alors formellement être utilisé, dans la mesure où $\tilde{\rho}_{j,k}^f$ dépend de $c_{j,k}$ et où le calcul de $c_{j,k}$ par le schéma VOFIRE fait intervenir la densité totale sur les faces. Dans la pratique, une seule itération est suffisante pour lever complètement le problème identifié.

$$\rho_{j,k}^f \xrightarrow{\text{VOFIRE}} c_{j,k} \rightarrow \tilde{\rho}_{j,k}^f \xrightarrow{\text{VOFIRE}} \tilde{c}_{j,k}$$

$\tilde{\rho}_{j,k}^f$ et $\tilde{c}_{j,k}$ sont utilisés pour le calcul des flux de masse totale et des flux de masse par composants sur les faces donneuses.

Le second problème est résolu par une correction géométrique apportée au schéma. Les artefacts observés sont dus à des interactions inopportunes entre différents écoulements pseudo-monodimensionnels dans une maille. Il est notable que le schéma monodimensionnel mis en œuvre sur les cas multidimensionnels par *Direction Splitting* ne présente pas ces artefacts. La stratégie palliative proposée pour le schéma consiste alors en une pondération modifiée dans l'équation (64-c) :

$$\begin{aligned}
c_{j,k}^n &= c_{j,k}^R + \sum_{r \in N^-} \tilde{p}_{j,r} \mu_{j,k,r} (c_k^n - c_{j,k}^R); \mu_{j,k,r} \in [0,1] \\
\tilde{p}_{j,r} &= \beta_{j,k,r} p_{j,r}; \beta_{j,k,r} = \frac{\max[\mathbf{n}_{j,k} \cdot (-\mathbf{n}_{j,r}), 0]}{\gamma_{j,k}}; \gamma_{j,k} = \sum_{r \in N^-} \max[\mathbf{n}_{j,k} \cdot (-\mathbf{n}_{j,r}), 0] \\
\sum_{r \in N^-} \tilde{p}_{j,r} &= 1
\end{aligned} \tag{66}$$

Cette modification annule la contribution à la somme convexe (64-d) (donnant la concentration reconstruite sur la face donneuse k) des écoulements pseudo-monodimensionnels impliquant une face receveuse formant un angle de plus de 90° avec la face k. Dans le cas d'une grille structurée, on retrouve alors le *Direction Splitting*.

L'intervalle de confiance est alors modifié comme suit :

$$\text{stabilité} \Leftrightarrow \mu_{j,k,r} \in [\hat{b}, \hat{B}] \tag{67}$$

$$\text{où } \hat{b} = \min(\hat{B}_1, \hat{B}_2); \hat{B} = \max(\hat{B}_1, \hat{B}_2),$$

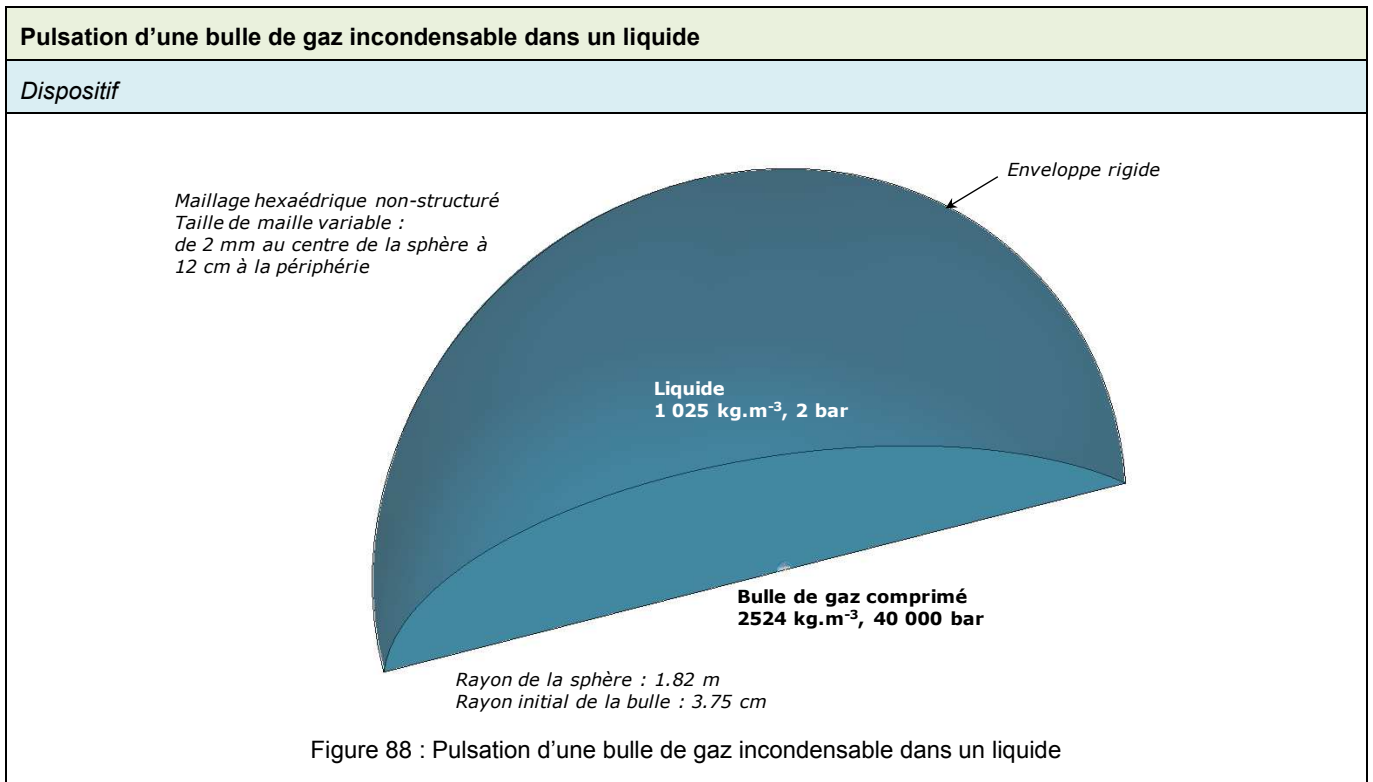
$$\hat{B}_1 = \frac{m_{j,r} (\tilde{S}_j^{n+1} \rho_j^{n+1} - \Delta t L^-) - \tilde{S}_j^n \tilde{p}_{j,r} c_j^n - \Delta t L^+ c_{j,k}^R}{\beta_{j,k,r} \Delta t L^+ (c_{j,k}^R - c_k^n)}; \hat{B}_2 = \frac{M_{j,r} (\tilde{S}_j^{n+1} \rho_j^{n+1} - \Delta t L^-) - \tilde{S}_j^n \tilde{p}_{j,r} c_j^n - \Delta t L^+ c_{j,k}^R}{\beta_{j,k,r} \Delta t L^+ (c_{j,k}^R - c_k^n)}$$

On peut remarquer quand quand $\gamma_{j,k}$ tend vers 0 (i.e. il ne reste aucune face receveuse en interaction avec la face donneuse k), alors $\beta_{j,k,r}$ tend vers $+\infty$ et les bornes de l'intervalle tendent vers 0, forçant logiquement par sécurité l'évaluation *upwind* de la concentration.

Une fois la correction appliquée, les artefacts disparaissent, comme en témoigne la solution du problème sur grille structurée sur la Figure 83.

2.2.2.3 Exemples de validation de l'approche VOFIRE pour les écoulements liquide-gaz en dynamique rapide et en interaction fluide-structure

Parmi les nombreux exemples de validation et d'illustration disponibles dans [Faucher et Kokh, 2010] et [Faucher et Kokh, 2013], on s'intéresse aux trois cas significatifs présentés sur la Table 33.



Visualisation de l'évolution de la bulle sur les premières millisecondes

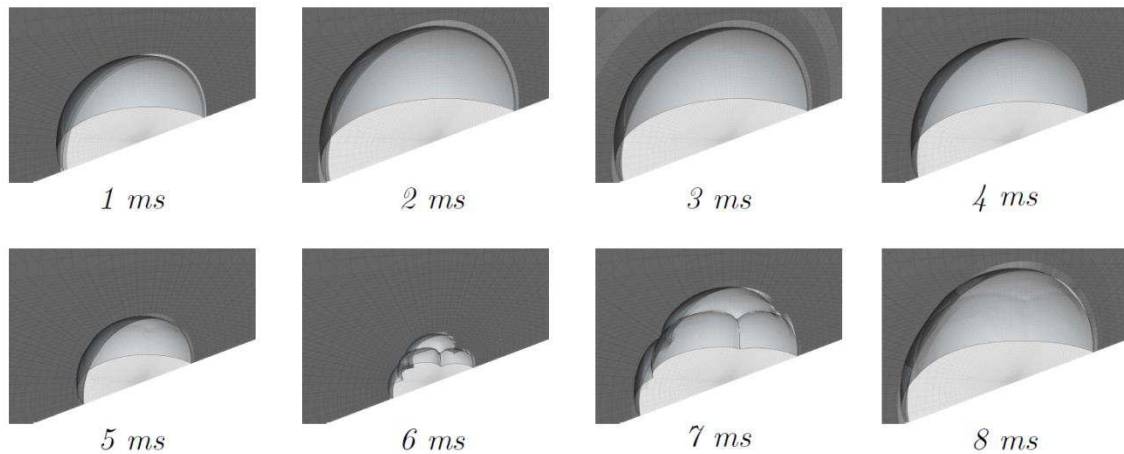


Figure 89 : Pulsation de la bulle au cours du temps avec le schéma VOFIRE

Comparaison à une solution de référence et commentaires

Un intérêt majeur de ce test tient à la symétrie sphérique, qui permet de mettre en œuvre un calcul équivalent avec une interface lagrangienne entre le gaz et le liquide (cf. Figure 90). Il s'agit d'un point fondamental pour valider la capacité de l'approche avec mélange munie du traitement anti-diffusif à reproduire le comportement mécanique d'une interface entre deux fluides non-miscibles.

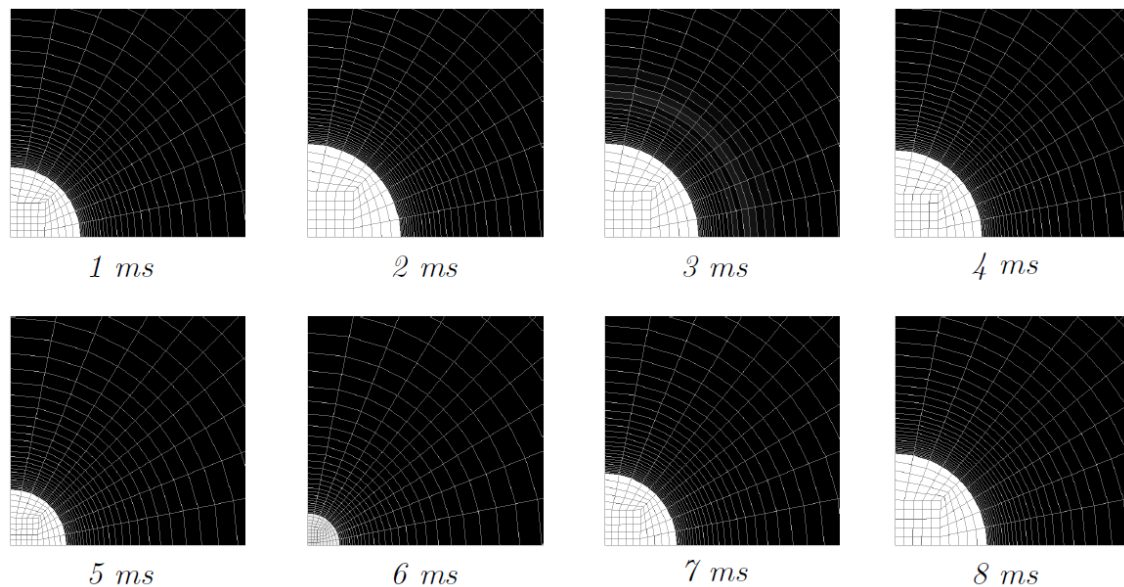


Figure 90 : Pulsation de la bulle au cours du temps avec une représentation ALE assurant la stricte non-miscibilité entre les fluides

On observe un comportement très proche de la bulle entre la simulation avec un fluide homogène muni du schéma VOFIRE et la simulation ALE, ce qui est confirmé par la Figure 91 représentant l'évolution du rayon de la bulle en fonction du temps dans les deux cas.

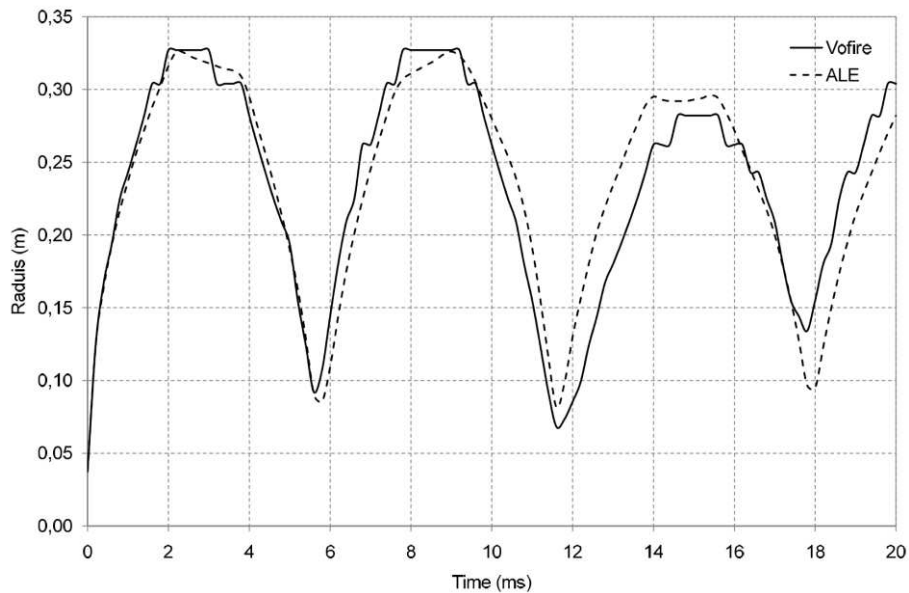


Figure 91 : Evolution du rayon de la bulle au cours du temps dans les deux cas de simulation

L'oscillation, non-linéaire en raison de la pression initiale et de la propagation d'ondes de compression dans le liquide, est identique en amplitude et pulsation dans les deux cas, ce qui valide la modélisation proposée.

Balancement dans un réservoir décéléré

Dispositif et principaux résultats expérimentaux

Il s'agit d'un test industriel connu dans le domaine automobile pour la maîtrise du comportement du carburant dans les réservoirs en cas de crash. Il propose une visualisation du domaine gazeux au cours de l'expérience.

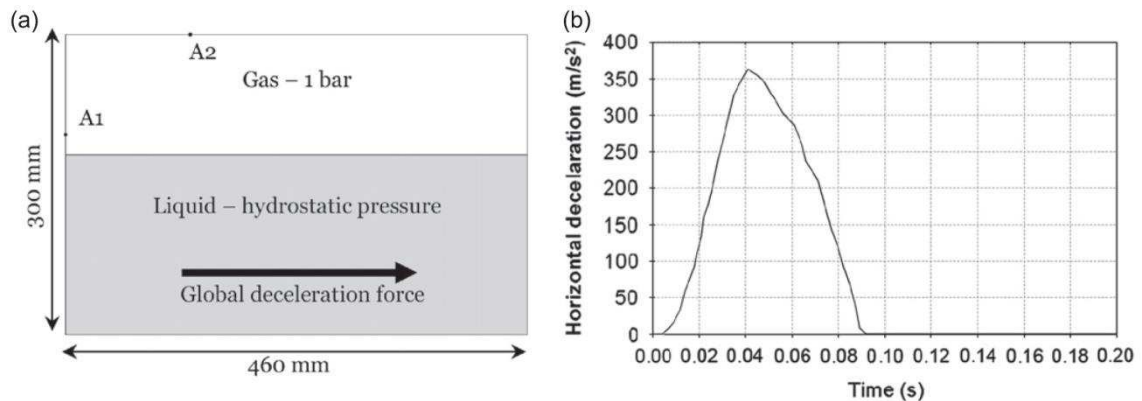


Figure 92 : Balancement dans un réservoir

Les résultats expérimentaux sont présentés sur la Figure 93, extraite de [Nakano et Iwamoto, 1988]. Le test propose des mesures de pression, qui sont comparées à la simulation dans [Faucher et Kokh, 2013], mais le résultat le plus significatif, privilégié dans le présent mémoire, est la visualisation de la surface du liquide au cours du temps.

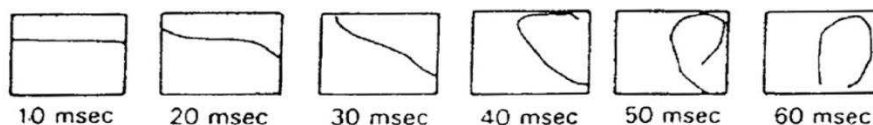


Figure 93 : Balancement dans un réservoir – Visualisation de la surface du liquide au cours du temps

Résultats de simulation

3 cas de calcul sont considérés : les deux premiers avec un maillage relativement fin, l'un sans VOFIRE et l'autre avec, et le troisième avec un maillage fortement raffiné, sans le schéma VOFIRE, pour confirmer les bénéfices de l'anti-diffusion face à la réduction de la taille de mailles pour capturer l'interface.

Les caractéristiques des cas de calcul et les lois d'état utilisées sont données sur la Figure 94.

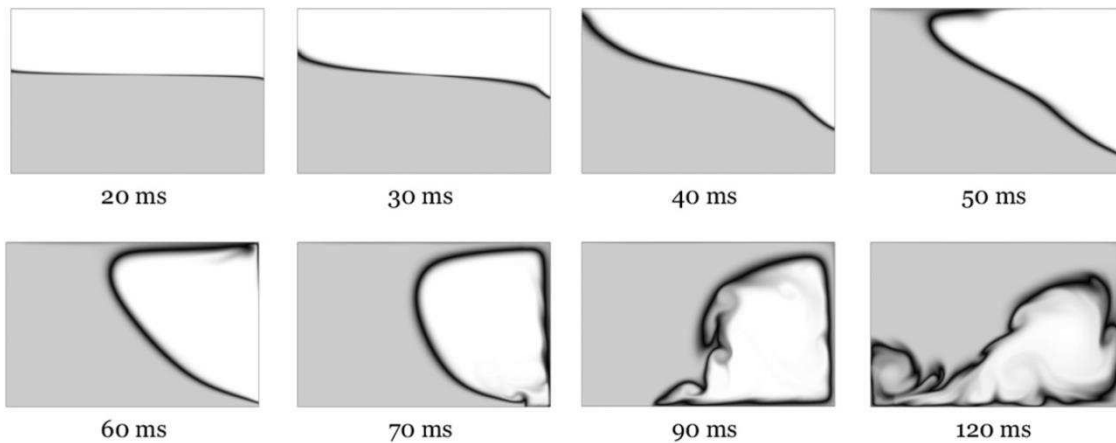
| Regular mesh | | Cover gas | | Liquid | |
|--------------------|-------------------|---------------------------|---------------------------|---------------------------------------|---|
| Mesh size | 1 mm | $P_{ref} = 1 \text{ bar}$ | $P_{ref} = 1 \text{ bar}$ | $\rho_{ref} = 1.22 \text{ kg.m}^{-3}$ | $\rho_{ref} = 1\,000 \text{ kg.m}^{-3}$ |
| Number of elements | 138 000 | $\gamma = 1.4$ | | | $C = 2\,089 \text{ m.s}^{-1}$ |
| Refined mesh | | | | | |
| Mesh size | 0.33 mm | | | | |
| Number of elements | 1 242 000 | | | | |
| Simulation time | 120 ms | | | | |
| Average time step | 0.2 μs | | | | |

(a) Maillage et temps de simulation

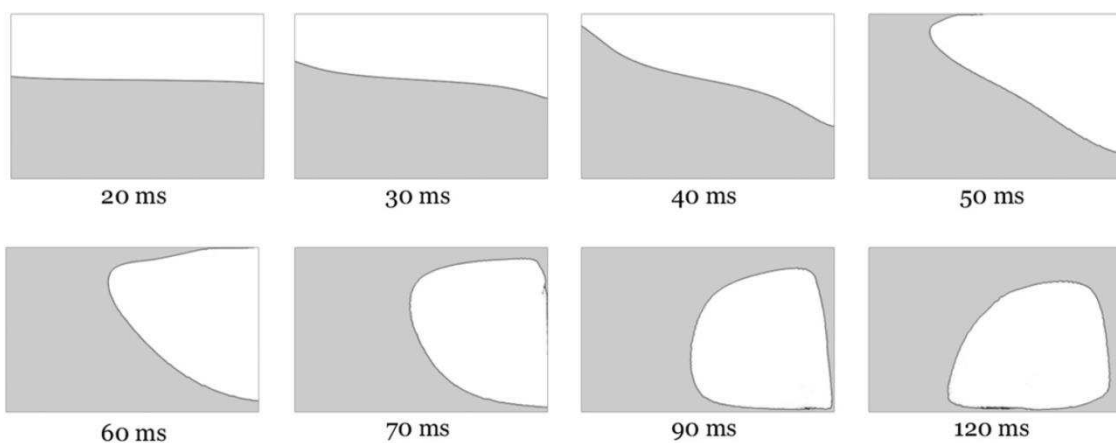
(b) Loi d'état utilisées

Figure 94 : Caractéristiques des simulations de balancement dans un réservoir

Les résultats, en termes de champ de densité au cours du temps, sont donnés sur la Figure 95.



(a) Maillage standard sans anti-diffusion



(b) Maillage standard avec schéma anti-diffusif VOFIRE

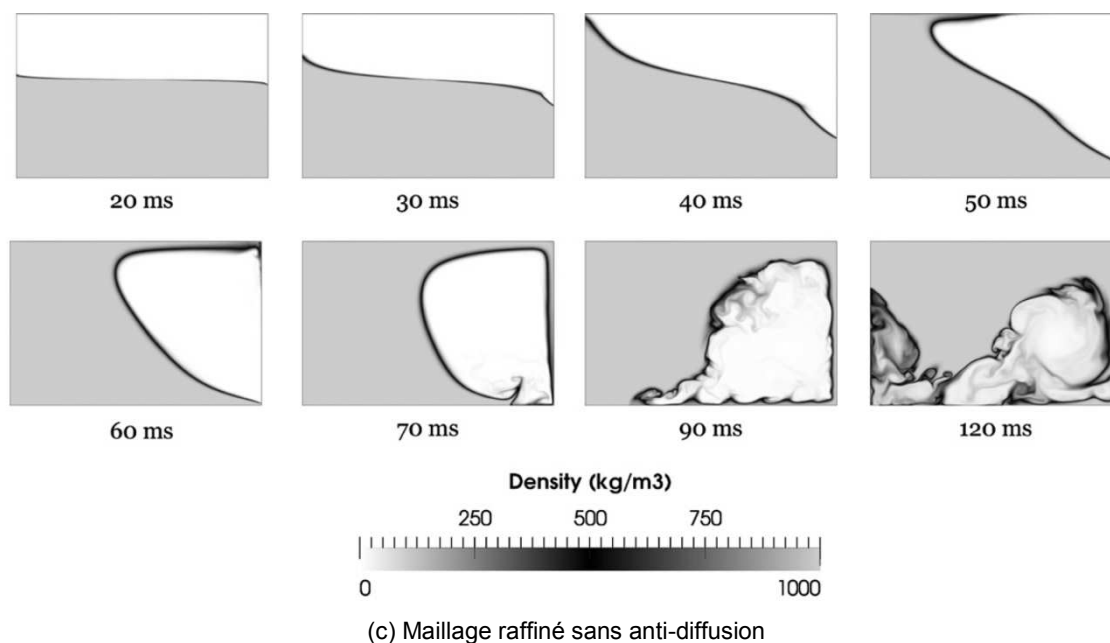


Figure 95 : Balancement dans un réservoir – Comportement de l'interface liquide-gaz dans les 3 cas de calcul

Commentaires

Seule la mise en œuvre du schéma anti-diffusif permet de préserver la forme de la cavité créée au moment du retournement du liquide. Même un maillage très raffiné ne peut empêcher l'apparition d'une zone de mélange en amont de la vague principale de liquide, dont la rencontre avec le fond du réservoir crée des remous qui détruisent le contour de la cavité.

Malgré un décalage en temps d'environ 10 ms attribuable à une incertitude sur l'instant de démarrage effectif de la chaîne de mesure, l'accord entre expérience et simulation est alors satisfaisant avec un maillage de taille modérée et le schéma VOFIRE.

Simulation de l'essai MARA10*Dispositif (éléments principaux) et modèle de calcul*

L'essai MARA10 est une des expériences de référence pour la sûreté des réacteurs rapides au sodium, consistant en une cuve métallique munie de structures internes simplifiées, partiellement remplie d'eau et reproduisant à échelle réduite la cuve principale du réacteur. Un explosif est placé à l'emplacement théorique du cœur, représentant un initiateur issu d'une interaction violente hypothétique entre un cœur en fusion et le liquide réfrigérant dans lequel il est plongé.

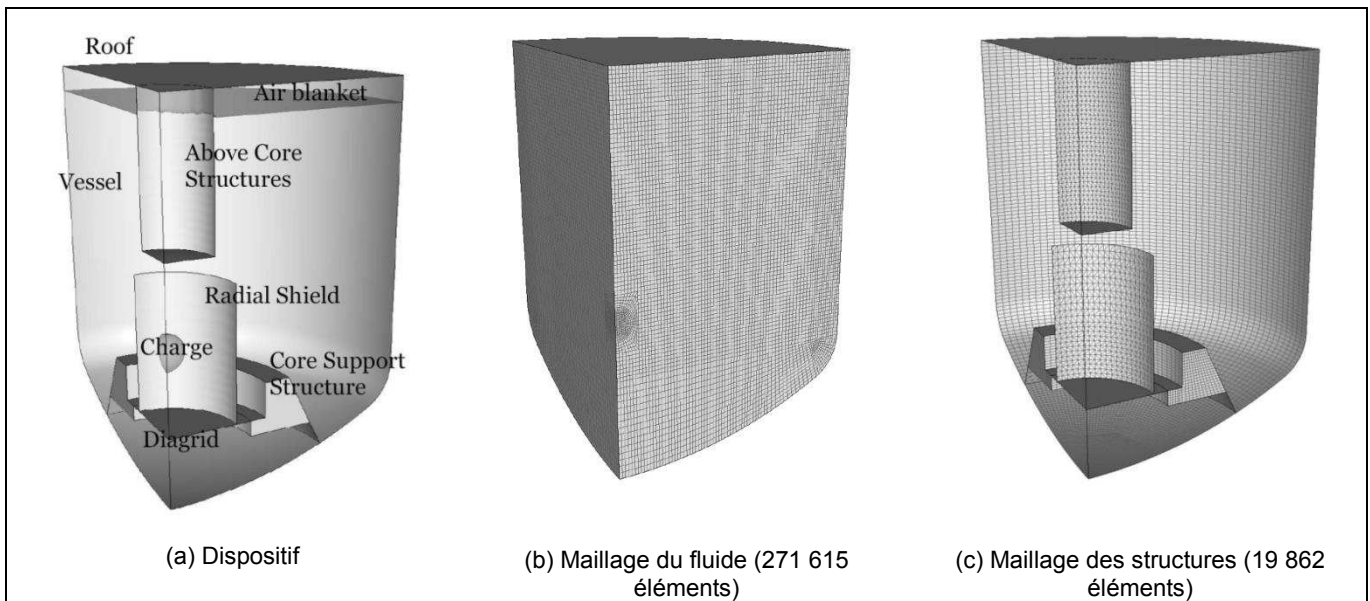


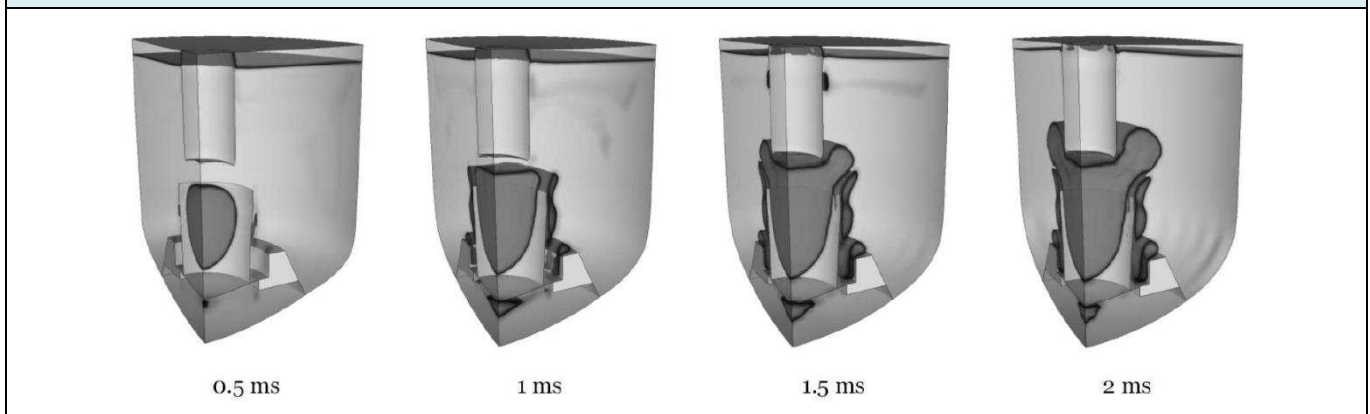
Figure 96 : Essai MARA10

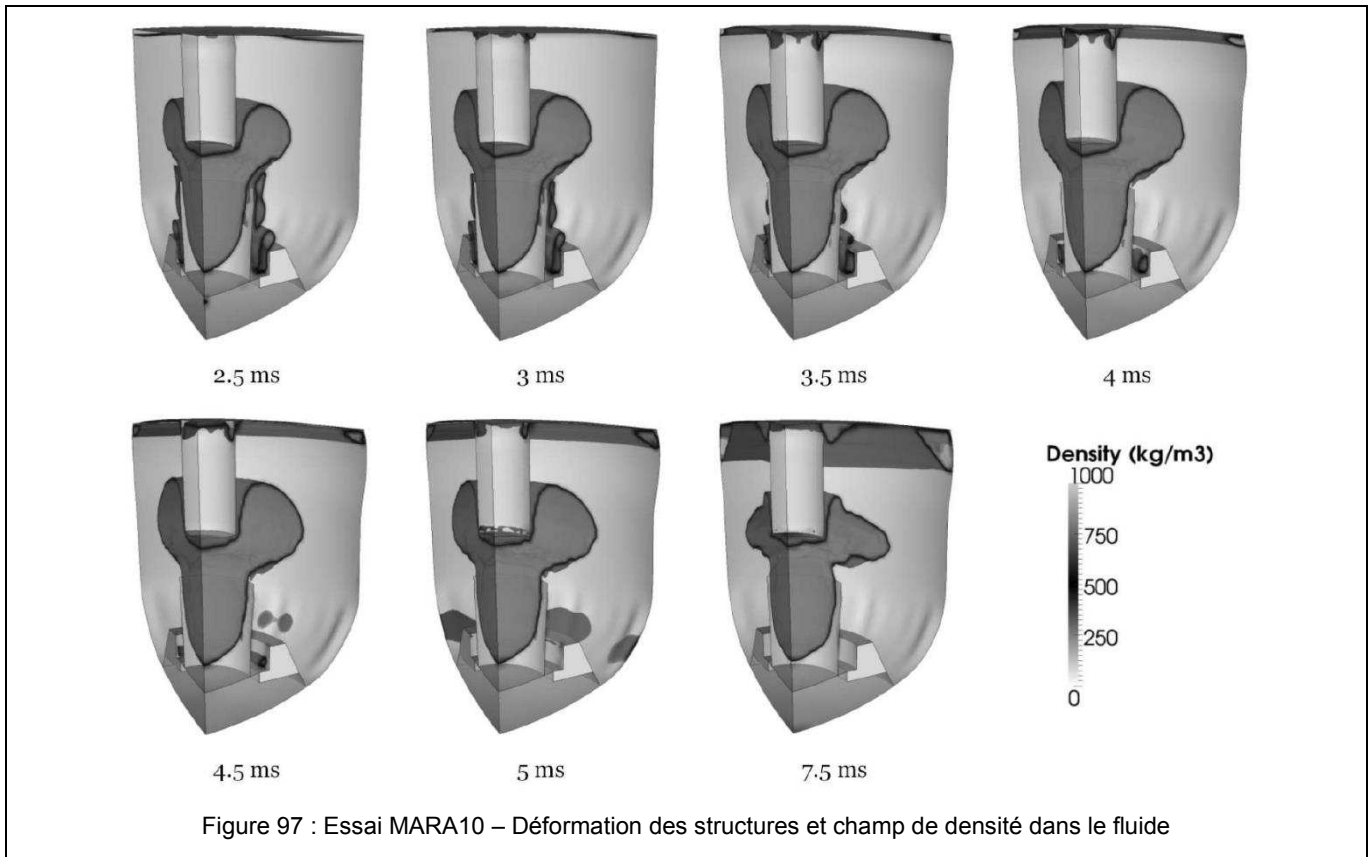
Au niveau des conditions aux limites, un quart du modèle est représenté compte-tenu des symétries, avec les conditions adéquates sur les plans de symétrie pour le fluide et la structure. Cette dernière est encastree sur le contour de la dalle (*roof*).

En ce qui concerne l'interaction fluide-structure, le maillage du fluide est conforme à celui des structures au niveau de l'enveloppe du domaine fluide (cuve et dalle, voir la Figure 7 pour la contraintes cinématique correspondante). Il doit donc suivre leur mouvement, d'où la mise en œuvre d'un formalisme ALE. Au contraire, les structures internes sont prises en compte avec une approche de type *frontières immergées* (voir Figure 8). Ce test met ainsi en œuvre à des fins de démonstration une combinaison vaste des technologies disponibles dans EPX en interaction fluide-structure.

Les matériaux pour les structures sont des aciers élasto-plastiques dont les paramètres figurent dans [Faucher et Koh, 2013], de même que les épaisseurs. Le fluide utilisé est conforme à celui décrit au paragraphe précédent, avec un ajustement pour prendre en compte la présence de deux gaz : le gaz pour la bulle d'explosif et le gaz de couverture. L'interface dont le schéma VOFIRE assure le suivi est celle entre le liquide et chacun des deux gaz (et éventuellement le mélange des deux, même si cela ne se produit pas dans le présent calcul).

Résultats en termes de déformation des structures et de champ de densité dans le fluide





Commentaires

Les interfaces sont précisément capturées, en particulier pour l'impact de l'eau sur la dalle après 2.5 ms environ et l'expansion de la bulle de gaz entre les protections radiales (*radial shield*) et le bouchon couvercle cœur (*above core structures*).

Des bulles apparaissent transitoirement au-dessous du platelage (*diagrid*), au-dessus du sommier (*core support structure*) et derrière les protections radiales. Elles sont dues à un traitement simplifié de la cavitation dans le liquide. L'interaction de ces bulles avec la frontière de la bulle de gaz d'explosif demande d'adapter le calcul de la densité totale dans le schéma VOFIRE.

Au niveau des structures, un bourrelet caractéristique apparaît à la jonction entre la cuve et la dalle, consécutif à la compression du gaz de couverture. On observe un flambage radial de la cuve en raison de l'abaissement du fond de cuve. Un tel phénomène ne peut être reproduit qu'avec une simulation tridimensionnelle, malgré la nature axisymétrique de la configuration du test.

L'accord avec l'expérience, détaillé dans [Faucher et Kokh, 2013], est satisfaisant. Cette simulation valide la mise en œuvre de l'approche proposée dans un contexte d'interaction fluide-structure industrielle.

Table 33 : Calculs de validation de l'approche VOFIRE pour les écoulements liquide-gaz

2.2.3 Simulation des conséquences mécaniques de l'APRP à l'échelle réacteur

La problématique principale associée à la simulation des conséquences mécaniques de l'Accident par Perte de Réfrigérant Primaire (*Loss Of Coolant Accident* ou *LOCA* en anglais) d'un Réacteur à Eau Pressurisée (REP) tient à la distance entre le lieu d'initiation de l'accident (la rupture conventionnelle d'une des tuyauteries sous pression du circuit primaire) et le lieu de mesure des quantités d'intérêt (les structures internes dans la cuve du réacteur, en particulier celles qui assurent le fonctionnement des organes de contrôle de la réaction, voir par exemple [Brandt et al., 2010][Hermansky et Krajkovic, 2011] pour des considérations de sûreté associées à cet accident). On rappelle les conditions de température et de pression dans un REP en fonctionnement normal : 320°C sous 155 bars. L'eau est monophasique liquide dans ces conditions, mais l'ouverture d'une brèche introduit inévitablement des phénomènes diphasiques lors de la détente.

Le circuit primaire du réacteur doit être modélisé en totalité, pour permettre la simulation de la propagation de l'onde de détente depuis la brèche jusqu'à l'intérieur de la cuve, dans laquelle une représentation tridimensionnelle avec interaction fluide-structure permet d'accéder aux efforts recherchés. Ce besoin de modélisation fine du volume interne de la cuve distingue les travaux de ce paragraphe des analyses classiques à l'échelle système, menées avec des outils tels que CATHARE [Valette et al., 2011] ou GOTHIC [Papini et al., 2011].

Une illustration de la géométrie considérée à l'intérieur de la cuve est donnée sur la Figure 98 pour un REP 900 MW du parc nucléaire français. La Figure 99 présente un exemple de modèle de calcul représentant un circuit primaire complet.

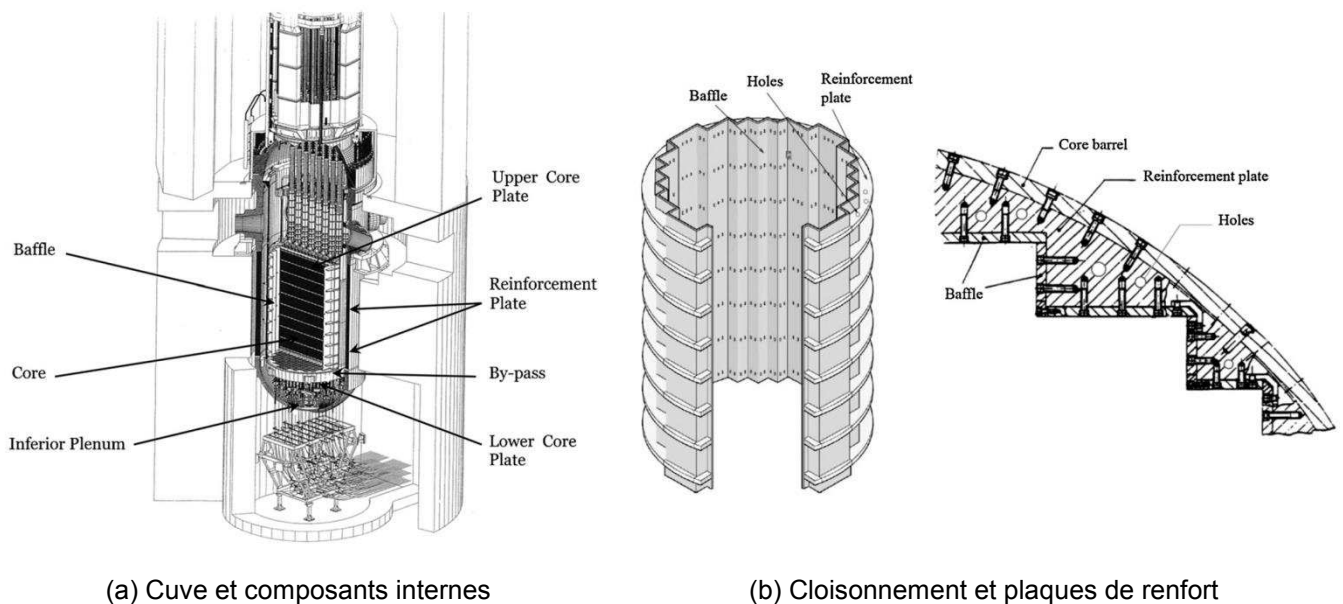


Figure 98 : Géométrie pour la cuve et ses internes

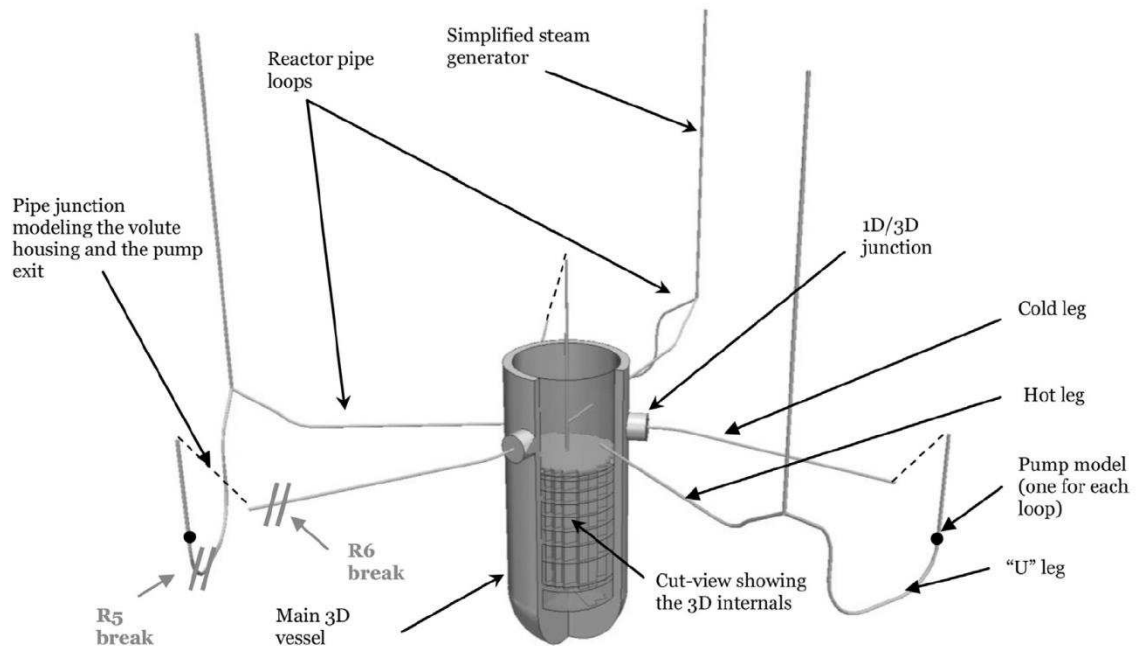


Figure 99 : Exemple de modèle de calcul représentant un circuit primaire complet

Pour des raisons de coût numérique et de simplicité de mise en œuvre, un modèle de calcul complet fait intervenir un couplage entre des modélisations volumiques dans la cuve et des modélisations filaires pour le réseau de tuyauteries. Les composants principaux du circuit primaire, comme les générateurs de vapeur ou les pompes, sont pris en compte à l'aide de tuyauteries équivalentes, alors que de nombreux détails géométriques, que leur petite taille met hors de portée d'une représentation explicite, sont intégrés via des relations locales entre la vitesse et la pression, dites relations d'impédance. Ces détails géométriques sont notamment des diaphragmes (dans les tuyauteries ou dans des plaques dans la partie 3D du modèle) ou des changements brutaux de section, influençant fortement la propagation des ondes dans le système. Les perforations dans les plaques de renfort du cloisonnement sont ainsi d'un intérêt particulier, sur la base d'une onde de détente arrivant dans le plenum inférieur et remontant vers le plenum supérieur à travers le cœur et la dérivation (*by-pass*) de part et d'autre du cloisonnement et dont la vitesse de propagation est modifiée dans la dérivation par ces orifices, générant des différentiels de pression à quantifier sur le cloisonnement.

On définit ainsi les directions de recherche principales pour parvenir à mettre en œuvre les simulations attendues, résumées sur la Table 34. Ces travaux sont menés dans le cadre de la collaboration entre le CEA et EDF, avec un affichage original des contributions scientifiques, dans la mesure où elles sont demandées et mises à profit par l'ingénierie EDF pour consolider sa démarche de sûreté.

| Validation et calibration des modèles d'impédance pour la représentation des singularités géométriques | Mise en œuvre du modèle couplé 1D/3D pour le calcul du régime nominal et du transitoire accidentel |
|--|---|
| <i>Description</i> | |
| <p>Il s'agit de définir une stratégie de validation et de calibration approfondie pour les modèles d'impédance chargés de reproduire l'effet d'un diaphragme ou d'un changement de section sur la propagation d'une onde de détente.</p> <p>L'approche retenue repose sur l'obtention de solutions de références auxquelles comparer rigoureusement les approches simplifiées. Le processus associe une démarche expérimentale sur une maquette spécifique et une démarche numérique par l'intermédiaire d'un code résolvant les équations de Navier-Stokes compressibles avec un schéma à haute précision. Validé sur l'expérience, ce code est destiné à fournir les solutions cherchées dans d'autres configurations que celles de la maquette.</p> | <p>On s'intéresse alors à la construction du modèle de calcul complet et de la définition du processus industriel associé, visant à calibrer et vérifier les différents paramètres numériques introduits par le passage à des géométries réelles.</p> |

| Publications | |
|---|--|
| [Crouzet et al., 2011] Etude analytique des modèles d'impédance pour la prise en compte de l'effet des singularités géométriques sur la propagation des ondes. | [Faucher et al. (1), 2014] Définition et mise en œuvre du processus industriel complet : calibration des paramètres numériques en géométrie réelle, calcul du régime nominal et du transitoire accidentel sur le modèle de circuit primaire entier. |
| [Faucher et al., 2012] Démarche de validation et de calibration des modèles d'impédance fondée sur une association entre expérience et simulation à haute précision. | |

Table 34 : Thèmes de recherche pour la simulation des conséquences mécaniques de l'APRP

2.2.3.1 Validation et calibration des impédances pour la propagation d'une onde à travers un diaphragme épais

Parmi la littérature abondante sur la modélisation des effets des singularités géométriques sur les écoulements et la propagation des ondes (voir notamment [Baylac et al., 1971][Gibert, 1988]), l'impédance retenue est conçue comme l'association d'un modèle de perte de charge stationnaire pour assurer la vidange correcte du circuit sur des temps relativement long et d'une correction acoustique pour représenter le retard induit par l'obstacle sur les ondes dans les temps courts :

$$\Delta P = \kappa \frac{\rho u^2}{2} - 2c\tau\rho\dot{u} \quad (68)$$

où κ est le coefficient de perte de charge, calculé analytiquement dans un certain nombre de configuration géométriques courantes [Idel'cik, 1969],

c est la vitesse du son,

τ est un temps caractéristique.

Dans le cadre d'un diaphragme, τ est relié à une longueur caractéristique L (dépendant de la géométrie), et au rapport entre la section de passage S en amont et aval de la singularité et la somme s des sections des orifices :

$$\tau = \frac{S}{s} \frac{L}{2c} \quad (69)$$

On trouve des formules analytiques pour L dans des configurations simples, mais la valeur adéquate pour ce paramètre dans des géométries industrielles complexes est inconnue.

L'utilisation d'une telle relation d'impédance suit toujours une logique monodimensionnelle, ce qui s'applique nativement à des tuyauteries. Dans des configurations multidimensionnelles, l'impédance est appliquée sur les faces des cellules dans la direction normale.

L'objectif de la démarche est de proposer une méthodologie pour valider que le modèle (68) est capable de reproduire les phénomènes pertinents et le cas échéant, pour calibrer les paramètres κ et L . Pour ce faire, il faut disposer de solutions de référence pour un problème de dépressurisation engendrant une propagation d'onde à travers des singularités, auxquelles comparer les solutions obtenues avec le modèle d'impédance.

L'expérience apparaît logiquement comme la voie privilégiée pour fournir une référence indiscutable. La limitation est l'impossibilité de produire un essai pour chaque configuration d'intérêt au niveau industriel. Il est alors judicieux de se doter d'un outil de simulation de haute précision, validé sur la solution expérimentale faisant foi et à même de produire des solutions de référence dans d'autres configurations. Pour cet outil, le choix porte sur *Code_Safari* développé à EDF R&D [Daude et al., 2012], résolvant les équations de Navier-Stokes avec une approche *LES (Large Eddy Simulation)* sur des grilles structurées à l'aide de schémas différences finies de degré élevé.

Solution de référence expérimentale

Le dispositif expérimental est présenté sur la Table 35. Il s'agit d'un tronçon de tuyauterie rempli d'eau froide à une pression initiale de 70 bars et muni d'accumulateurs dans sa partie supérieure. A l'instant initial, un disque de rupture s'ouvre à l'extrémité inférieure de la maquette, provoquant la remontée d'une onde de dépressurisation. Le diamètre de l'embout inférieur de la maquette est choisi de telle sorte que le saut de pression après l'ouverture soit de l'ordre de 10 bars, ce qui correspond à la valeur rencontrée pour une brèche en REP. La maquette est

alimentée en eau par les accumulateurs durant quelques millisecondes, puis la vidange complète du système intervient après environ 100 ms.

Dispositif expérimental

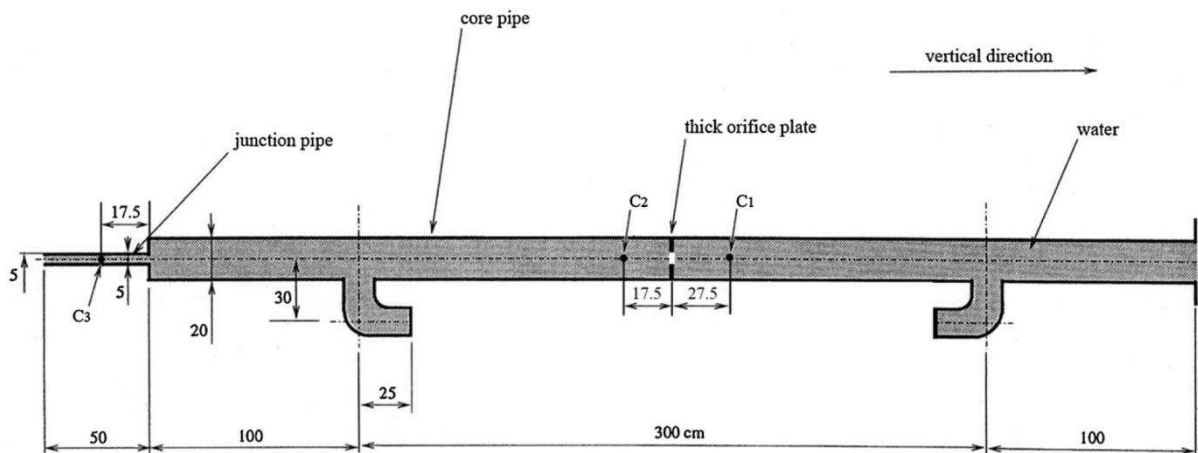


Figure 100 : Dispositif de la maquette pour l'analyse de la propagation d'une onde de dépressurisation à travers un diaphragme

La maquette utilisée est une adaptation d'une installation existante. Initialement, elle comportait deux branches, dont l'une a été enlevée pour les analyses actuelles qui ne concernent que la conduite principale. La présence des piquages de la branche auxiliaire ne perturbe que très peu l'écoulement et la propagation des ondes.

Vue de l'installation du CEA/Saclay



Figure 101 : Vue de la maquette au CEA/Saclay

Disques de rupture

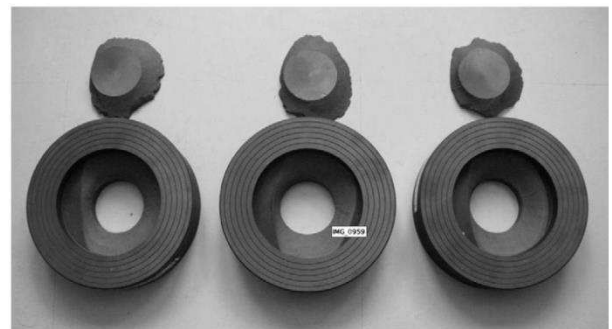


Figure 102 : Disques de rupture (face arrière et cône de rupture)

Emplacement des capteurs de pression

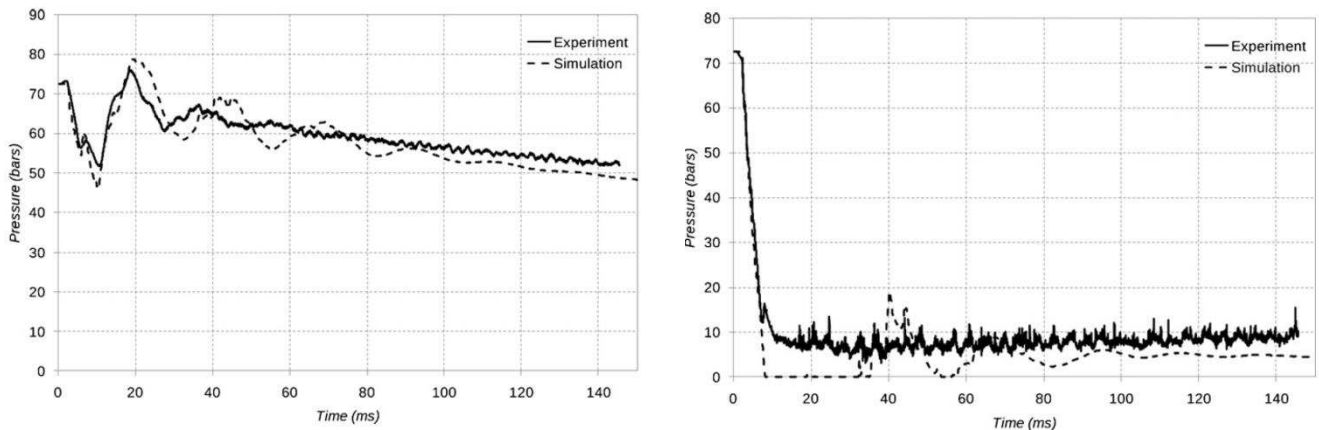
Captor locations.

| Captor name | Position |
|-------------|----------------------------------|
| C1 | 275 mm above thick orifice plate |
| C2 | 175 mm below thick orifice plate |
| C3 | 175 mm below sudden enlargement |

Figure 103 : Position des capteurs de pression dans l'embout inférieur et dans la conduite principale

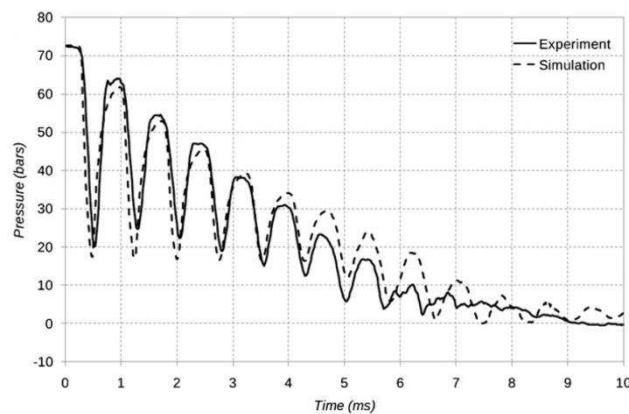
Table 35 : Maquette pour l'analyse de la propagation d'une onde de dépressurisation à travers un diaphragme

On donne sur la Figure 104 les mesures de pression durant l'essai pour les 3 capteurs repérés sur la Figure 100. Ces mesures sont comparées aux résultats d'une simulation préliminaire réalisée avec EPX utilisant un modèle filaire de la tuyauterie. On s'intéresse aux phénomènes prépondérants sur la durée complète de la vidange et seuls des coefficients de perte de charge sont utilisés au niveau des singularités géométriques (diaphragme et élargissement brusque à la jonction entre la conduite principale et l'embout inférieur).



(a) Pression au capteur C1 (au-dessus du diaphragme)

(b) Pression au capteur C2 (en dessous du diaphragme)



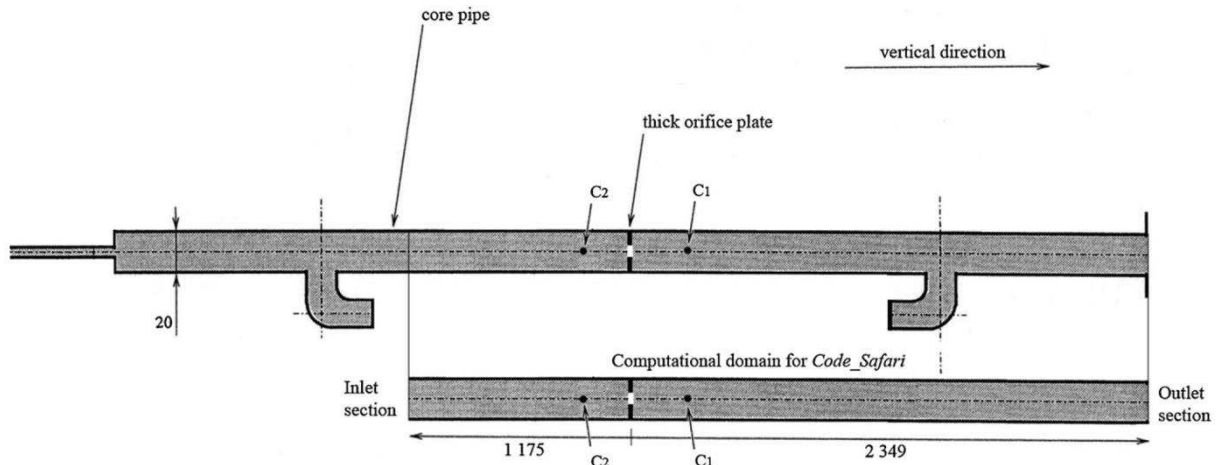
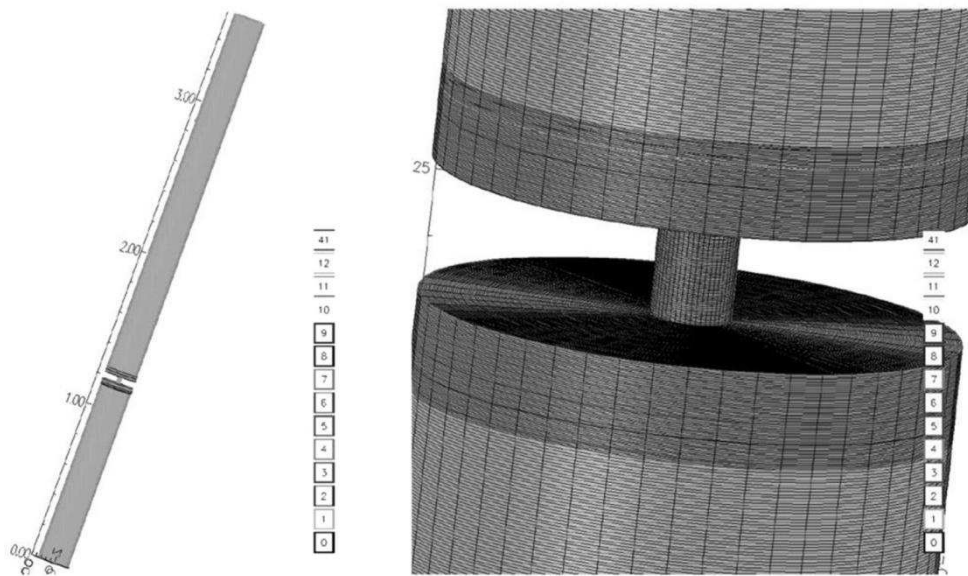
(c) Pression au capteur C3 (dans l'embout inférieur) dans les premières millisecondes

Figure 104 : Mesures de pression dans l'expérience comparées à une simulation préliminaire avec EPX

On vérifie que l'accord entre l'expérience et la simulation préliminaire est satisfaisant, même si la loi d'état utilisée pour l'eau ne permet pas de rendre compte avec précision de la vidange rapide sous le diaphragme, l'air n'étant pas représenté, de même que les phénomènes éventuels de cavitation. La vitesse du son mesurée, et utilisée par la suite dans les calculs, est de 1300 m.s^{-1} , contre 1500 m.s^{-1} pour de l'eau liquide dans les conditions classiques, ce qui provient de la présence d'air dans l'eau et de la flexibilité de la tuyauterie [Allievi, 1902].

Qualification de Code_Safari pour la propagation d'une onde de dépressurisation à travers un diaphragme

Pour cette tâche, on s'intéresse uniquement au signal de pression qui traverse le diaphragme et on construit un modèle de calcul pour Code_Safari dédié uniquement à ce point (le programme n'est pas en mesure de représenter l'intégralité de la maquette), présenté sur la Figure 105. Code_Safari utilisant des grilles cartésiennes pour sa résolution (avec des transformations géométriques possibles pour représenter des cylindres par exemple), le maillage est l'assemblage de plusieurs grilles avec recouvrement entre elles.

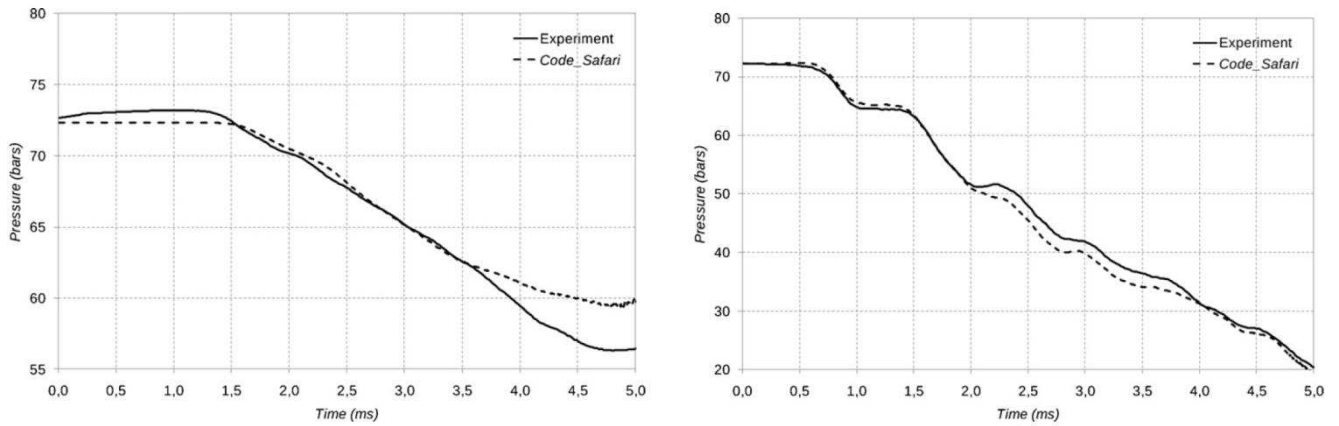
(a) Section de tuyauterie représentée avec *Code_Safari*

(b) Maillage multi-domaines avec recouvrement

Figure 105 : Modèle de calcul pour *Code_Safari*

La pression imposée à l'entrée du modèle de calcul est issue de l'essai. La pression en sortie est imposée à la pression atmosphérique. Cette condition n'est pas conforme à l'expérience et limite le domaine de validité du calcul, qui restera correct tant que les ondes réfléchies sur les conditions aux limites ne perturbent pas les mesures aux points d'intérêt (i.e. les capteurs C1 et C2).

On donne sur la Figure 106 la pression mesurée au niveau des deux capteurs et la pression calculée par *Code_Safari*. Le temps considéré est logiquement beaucoup plus court que pour les courbes de la Figure 104, puisqu'on s'intéresse à l'effet instantané du diaphragme sur la propagation d'onde.



(a) Pression au capteur C1 (au-dessus du diaphragme)

(b) Pression au capteur C2 (en dessous du diaphragme)

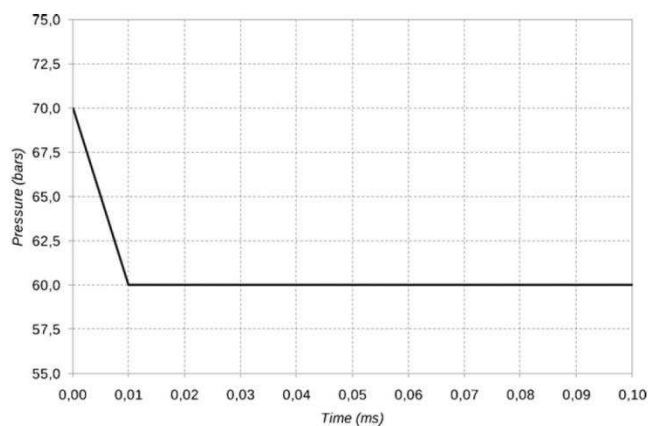
Figure 106 : Comparaison entre *Code_Safari* et l'expérience pour la propagation d'une onde à travers un diaphragme

L'accord entre le calcul et l'expérience est satisfaisant et on peut considérer *Code_Safari* comme qualifié pour la gamme de simulation considérée.

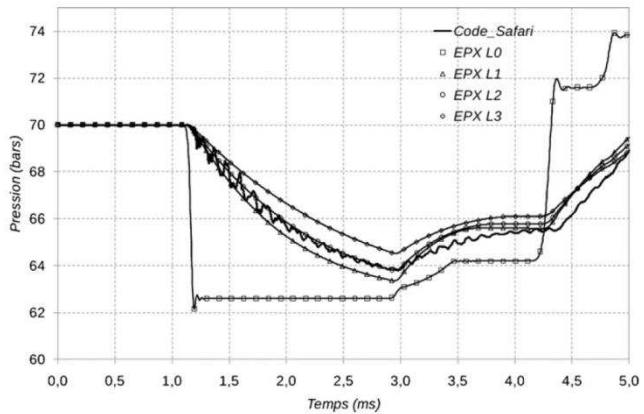
Validation et calibration des modèles d'impédance pour le diaphragme de l'expérience

Pour définir une procédure de calibration générique des modèles d'impédance, on se dote d'une solution numérique de référence correspondant à un signal d'entrée analytique, à savoir un demi-triangle chutant de 70 bars à 60 bars en 0.01 ms (voir Figure 107). On calcule alors la pression au-dessus et en dessous du diaphragme avec *Code_Safari* et on utilise ces courbes de pression pour trouver la meilleure valeur de la longueur caractéristique L à utiliser dans le modèle d'impédance (le coefficient de perte de charge étant déterminé par ailleurs pour la représentation de la vidange de la maquette), via une simple analyse de Monte-Carlo.

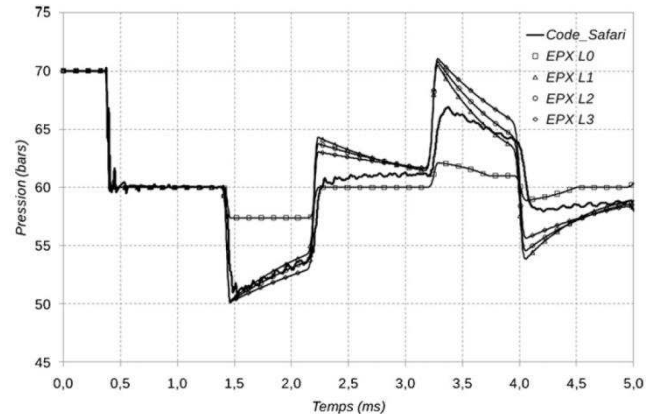
On donne sur la Figure 107 les courbes de pression issues de *Code_Safari* et EPX au niveau des capteurs C1 et C2 pour 4 valeurs significatives de la longueur caractéristique : $L_0=0$ m, $L_1=7.11$ cm (i.e. la longueur analytique calculée avec les formules de [Gibert, 1988]), $L_2=8.78$ cm (la longueur optimale issue du processus de calibration) et $L_3=11.7$ cm (servant d'extremum supérieur parmi les valeurs testées).



(a) Signal d'entrée analytique pour la calibration



(b) Pression au capteur C1 (au-dessus du diaphragme)

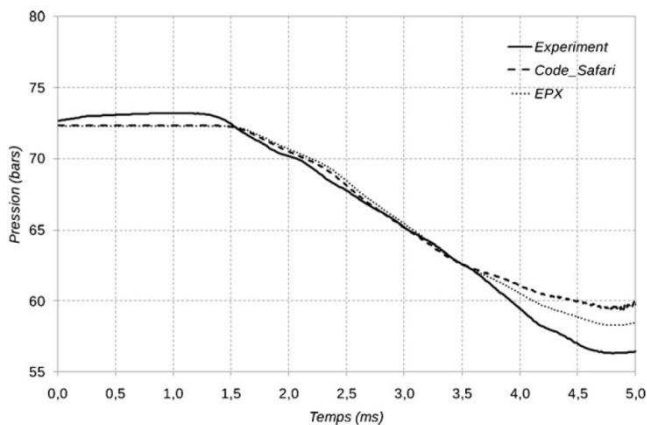


(c) Pression au capteur C2 (en dessous du diaphragme)

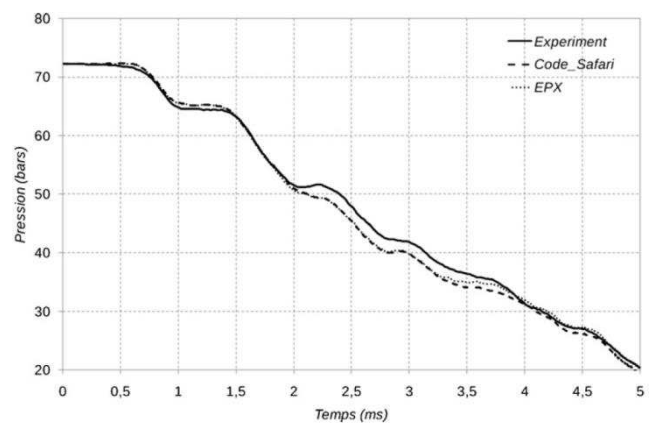
Figure 107 : Mesures de pression pour la calibration de la longueur caractéristique du modèle d'impédance

Les résultats obtenus valident la capacité du modèle d'impédance choisi à reproduire les phénomènes prépondérants souhaités : la vidange correcte d'une tuyauterie et l'effet d'une singularité sur la propagation d'une onde acoustique.

Comme dernière vérification, on donne sur la Figure 108 les pressions simulées avec EPX muni du modèle d'impédance en réponse au signal entrant expérimental.



(b) Pression au capteur C1 (au-dessus du diaphragme)



(c) Pression au capteur C2 (en dessous du diaphragme)

Figure 108 : Réponse du modèle d'impédance pour le signal expérimental après calibration

L'accord entre l'expérience, *Code_Safari* et EPX est très satisfaisant après la procédure de calibration proposée.

2.2.3.2 Procédure de calibration généralisée et modèle de calcul à l'échelle industrielle

Pour proposer une démarche de calcul pleinement opérationnelle pour des analyses en environnement industriel, il est nécessaire d'étendre la démarche de calibration des paramètres de la relation d'impédance pour les singularités géométriques. Si *Code_Safari* reste la référence numérique en vertu de ses schémas d'ordre élevé, EPX est plus aisé à mettre en œuvre sur des modèles tridimensionnels en géométrie quelconque, du fait de l'utilisation de maillages non-structurés.

On commence donc par qualifier EPX pour des simulations de propagation tridimensionnelle à travers un diaphragme, par comparaison avec *Code_Safari* sur la configuration de calcul de la Figure 105. La Figure 109 présente le modèle de calcul pour EPX et la pression simulée par les deux programmes au-dessus du diaphragme en réponse au signal analytique de la Figure 107.

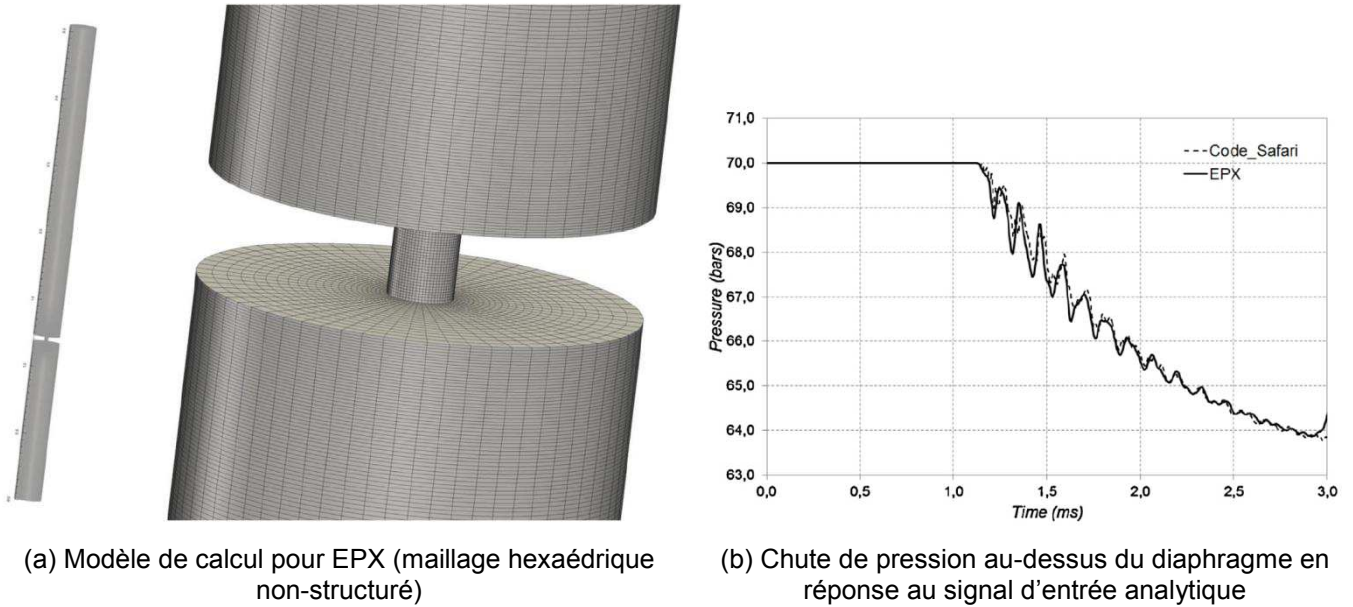


Figure 109 : Qualification d'EPX par comparaison avec *Code_Safari* pour la propagation d'onde à travers un diaphragme

L'accord entre les deux codes est tout à fait satisfaisant et EPX est utilisé dans la suite pour obtenir des solutions de référence dans des géométries quelconques. Une démonstration de la procédure de calibration correspondante dans 3 configurations d'intérêt figurant dans [Faucher et al. (1), 2014] est donnée sur la Table 36.

Calibration des relations d'impédance en géométrie quelconque

Configurations de calcul

On se place dans une configuration de type *plaque perforée* avec une géométrie pleinement tridimensionnelle (alors que la calibration précédente correspondait à un diaphragme inséré dans une tuyauterie, soit une géométrie axisymétrique). On considère les cas d'une plaque simplement perforée, d'une plaque doublement perforée et de l'enchaînement de plaques simplement perforées. Chaque modèle compte entre 2 et 3 millions de mailles. Le point S désigne pour la chaque modèle le point de mesure de la pression de référence. Le signal d'entrée, appliqué sur la face inférieure de chaque modèle, est le signal analytique introduit précédemment.



Figure 110 : Configuration de calcul pour la calibration d'impédances pour les plaques perforées

Calibration pour une plaque simplement perforée

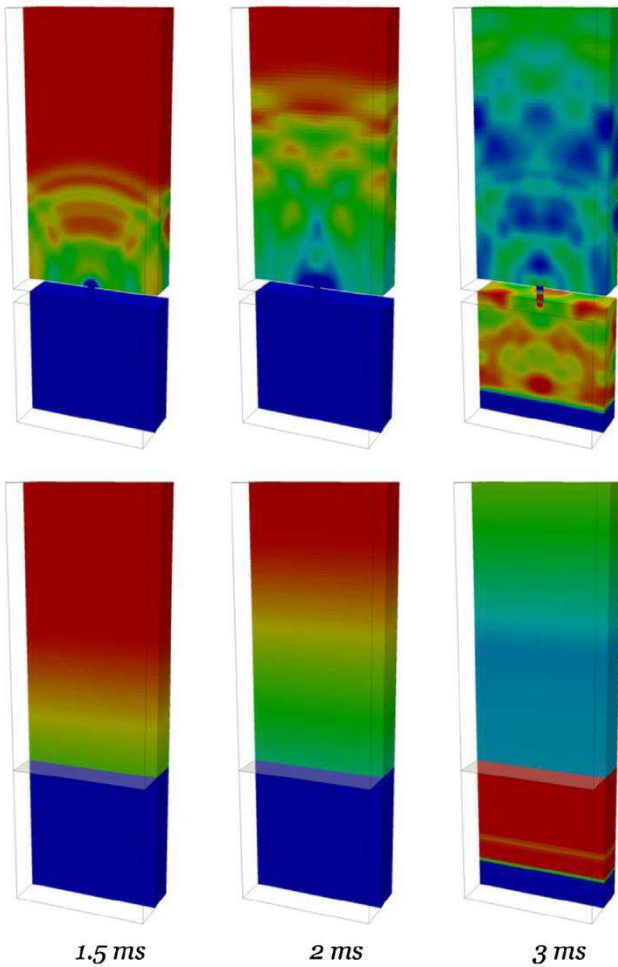


Figure 111 : Visualisation des champs de pression de référence (en haut) et avec une relation d'impédance (en bas) entre 69 et 70 bars

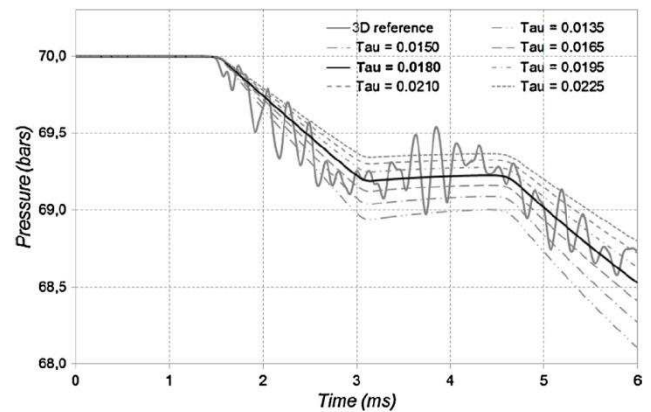


Figure 112 : Pression au point S pour la référence et pour différentes valeurs du temps caractéristique (en trait plein, la valeur optimale)

Commentaires

La calibration sur la Figure 112 est faite pour le temps caractéristique, qui est le paramètre effectif dans la relation d'impédance, sans que cela diffère notablement la procédure de celle du paragraphe précédent.

Pour le temps caractéristique optimal, le signal de pression est logiquement très peu dépendant du coefficient de perte de charge utilisé dans la relation d'impédance. Ce dernier est déterminé par des considérations liées à une situation stationnaire (vidange complète ou écoulement nominal, voir ci-dessous).

La contribution acoustique du modèle d'impédance permet de reproduire avec précision le retard induit par la singularité dans la propagation d'une onde supposée plane.

On compare la valeur du temps caractéristique obtenu à la valeur analytique dans cette configuration (0.0180 s contre 0.0135 s). On retrouve l'ordre de grandeur, mais l'écart significatif justifie la mise en œuvre d'une méthode de calibration *ad hoc*.

Calibration pour une plaque doublement perforée

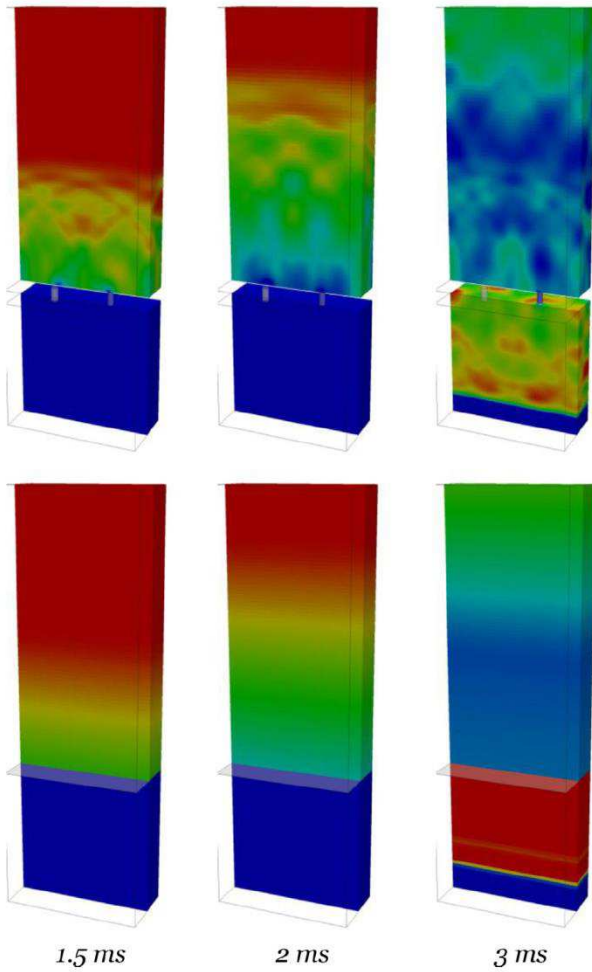


Figure 113 : Visualisation des champs de pression de référence (en haut) et avec une relation d'impédance (en bas) entre 68.5 et 70 bars

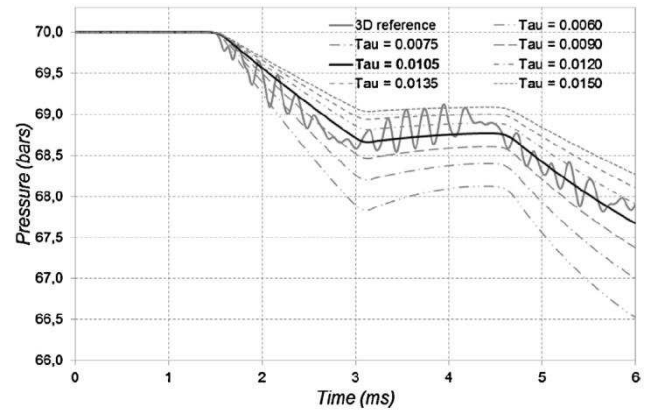


Figure 114 : Pression au point S pour la référence et pour différentes valeurs du temps caractéristique (en trait plein, la valeur optimale)

Commentaires

La configuration doublement perforée est pertinente en raison de la disposition des orifices dans les plaques de renfort du cloisonnement (cf. Figure 98). Il n'est pas souhaitable de contraindre inutilement le maillage en imposant de n'avoir au plus qu'une perforation par face de cellule, pour laisser la latitude nécessaire à une unité d'ingénierie pour construire des modèles correspondants à ses besoins avec le plus de souplesse possible.

Comme précédemment, l'ordre de grandeur de la valeur analytique est retrouvé (0.0105 s pour le temps optimal contre 0.0080s pour la valeur analytique), avec un écart justifiant la calibration *a posteriori*.

Vérification de la calibration pour l'enchaînement de 2 plaques simplement perforées

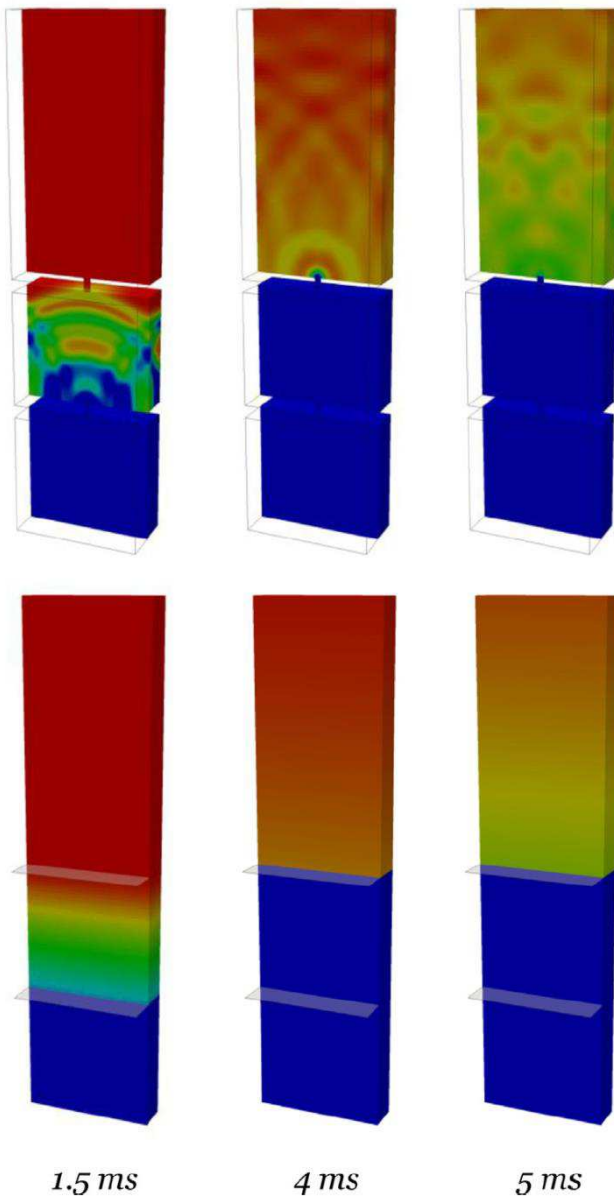


Figure 115 : Visualisation des champs de pression de référence (en haut) et avec une relation d'impédance identique pour chaque plaque (en bas) entre 69.5 et 70 bars

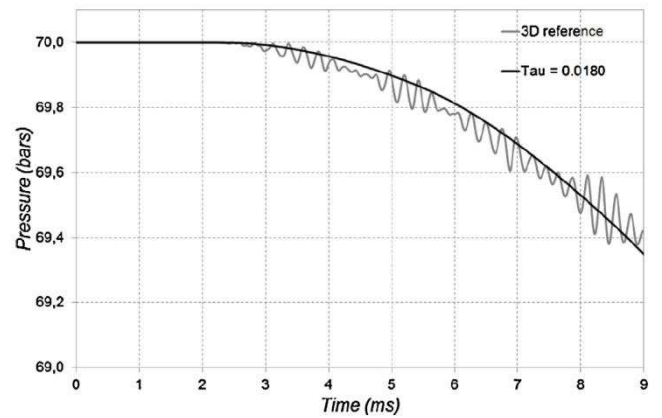


Figure 116 : Pression au point S pour la référence et pour la valeur optimale du temps caractéristique identifiée pour une plaque seule

Commentaires

La gestion de cette situation est fondamentale pour la généralisation des méthodes proposées aux situations industrielles réelles.

On vérifie par ce test que la calibration individuelle de chaque plaque conduit à la solution correcte pour l'enchaînement de plaques, en supposant que la distance entre elles est suffisante (voir [Faucher et al., 2012] pour une discussion sur la dimension de la zone d'influence des effets tridimensionnels après une singularité).

Table 36 : Procédure de calibration des relations d'impédance pour des géométries tridimensionnelles quelconques

On décrit finalement sur la Table 37 le processus complet pour la simulation des conséquences mécaniques de l'APRP dans un REP.

Compléments sur le modèle de calcul

Une vue du modèle complet est donnée par la Figure 99. La Figure 117 présente une illustration de la modélisation du domaine tridimensionnel pour la cuve et les structures internes.

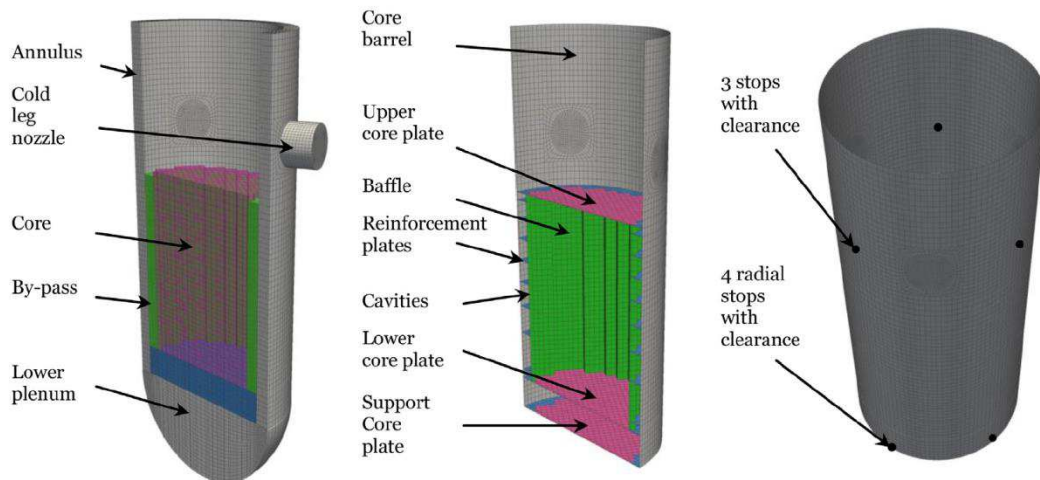


Figure 117 : Maillage de la cuve (domaine fluide à gauche, structures au centre, position des points d'arrêt de l'enveloppe de cœur à droite)

Simulation du régime nominal stationnaire

Motivations et méthodologie

La simulation du régime nominal permet :

- ❖ d'initialiser le modèle pour le calcul du transitoire accidentel, même si des études complémentaires montrent que l'influence de l'écoulement initial sur les efforts sur les structures durant l'accident est relativement faible,
- ❖ de calibrer les pertes de charge dans le circuit (cf. termes correspondants dans les relations d'impédance) pour respecter le point de fonctionnement au niveau des pompes.

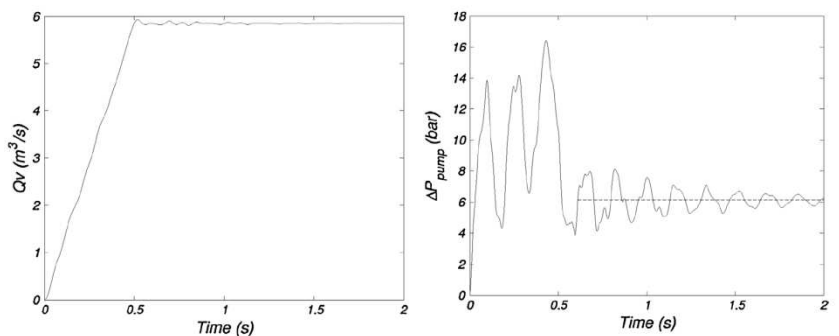


Figure 118 : Historique de débit et d'effort au niveau des pompes durant le transitoire fictif conduisant au régime nominal stationnaire

Le méthodologie mise en œuvre pour éviter de recourir à un outil dédié pour le calcul de l'écoulement stationnaire et permettre un enchaînement aisé avec le transitoire de dépressurisation, consiste à partir du repos et de considérer un transitoire fictif au cours duquel la vitesse de l'écoulement au niveau des pompes (une par branche) est forcée progressivement jusqu'à sa valeur de référence. En pratique, une rampe sur 0.5 s est utilisée pour une simulation sur un temps physique de l'ordre de 2 s, le critère étant de parvenir à une stationnarité de la vitesse et de l'effort au niveau des pompes (cf. Figure 118). Il est notable que le recours au calcul parallèle est primordial pour faire face à des temps de simulation inhabituellement longs pour un code destiné à des transitoires brutaux.

Le couple (débit, effort) à convergence donne le point de fonctionnement simulé, à confronter à la courbe caractéristique des pompes, fournie par le constructeur.

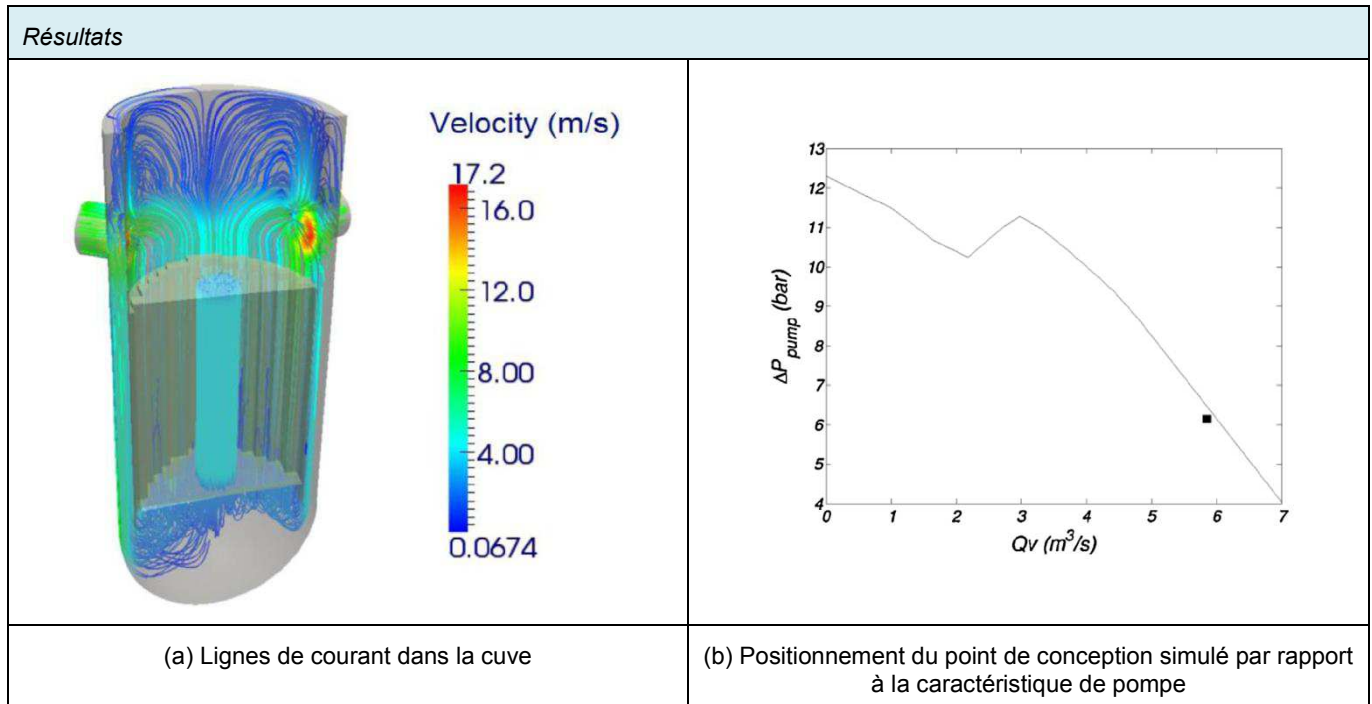


Figure 119 : Résultats du calcul du régime nominal

Le point de fonctionnement est bien conforme à la caractéristique des pompes, ce qui valide globalement les pertes de charge stationnaires dans le circuit.

Simulation du transitoire accidentel

Parmi les analyses détaillées disponibles dans [Faucher et al. (1), 2014], on s'intéresse à titre d'illustration au cas de l'ouverture d'une brèche avec double débattement des tuyauteries en 1 ms. On donne l'évolution du champ de pression dans la cuve, la déformation des structures internes et la mesure des différentiels de pression sur le cloisonnement dus au retard dans la propagation des ondes induits par les plaques de renfort dans la dérivation.

Champ de pression dans le circuit

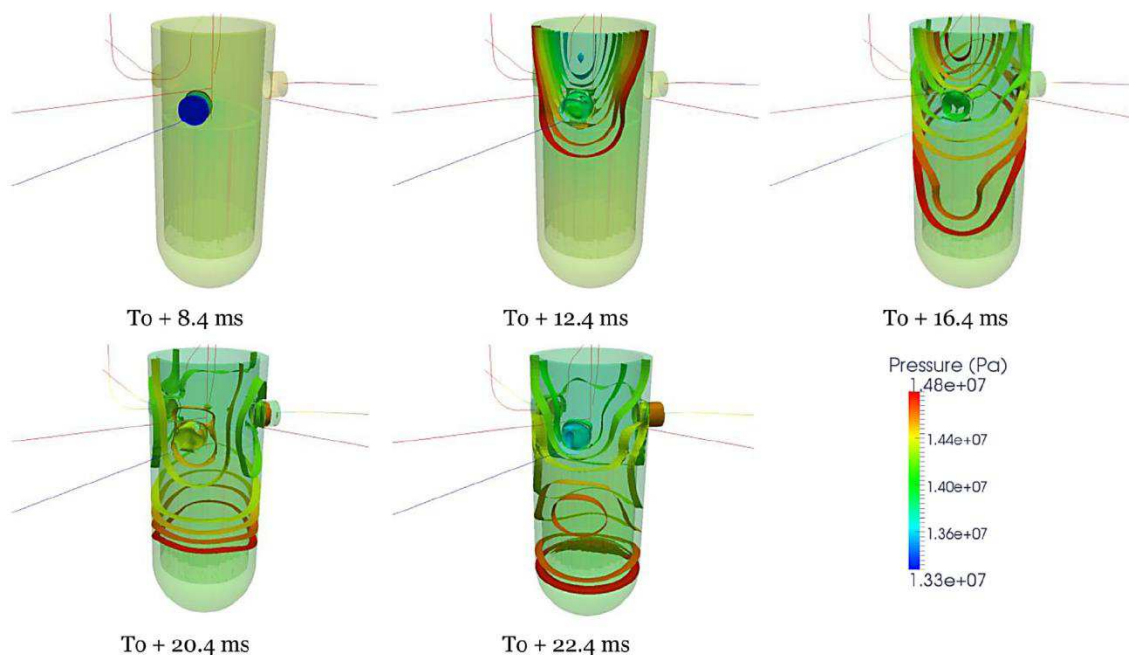


Figure 120 : Champ de pression au cours du transitoire de dépressurisation

Déformation de l'enveloppe de cœur

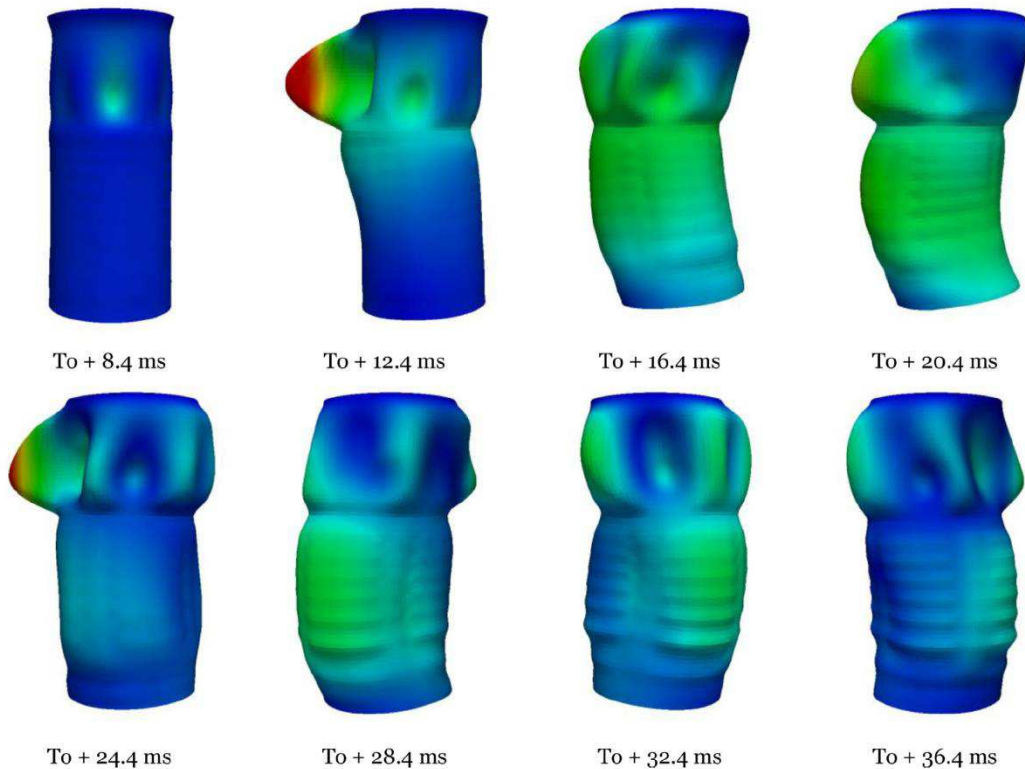


Figure 121 : Déformation de l'enveloppe de cœur (déplacement amplifié par 1000)

On observe une *aspiration* logique de la structure du côté de la branche dépressurisée, puis un mouvement de vibration de l'ensemble des structures internes.

Différentiels de pression sur les planches du cloisonnement



(a) Identification de cavités dans la dérivation entre les plaques de renfort du cloisonnement

(b) Différentiel de pression maximal mesuré dans chaque cavité (moyenne circonférentielle sur le cloisonnement)

Figure 122 : Mesure des différentiels de pression maximaux sur le cloisonnement

Table 37 : Simulation des conséquences mécaniques d'un transitoire de dépressurisation dans un REP

2.2.4 Bibliographie et publications spécifiques (surlignées)

[Allievi, 1902]

L. Allievi, Teoria generale del moto perturbato dell'acqua nei tubi in pression (colpo d'ariete) (General theory of the variable motion of water in pressure conduits), Annali delle Società degli Ingegneri ed Architetti Italiani, vol. 17(5): 285-325, 1902.

[Baylac et al., 1971]

G. Baylac, R.J. Gibert, M. Livolant, Calcul de l'amplification acoustique dans les circuits complexes : application au vibrations des échangeurs du réacteur Chinon III, La Houille Blanche, vol. 5, 1971.

[Ben Dhia et Rateau, 2004]

H. Ben Dhia, G. Rateau, The Arlequin method as a flexible engineering design tool, Int. J. for Num. Meth. in Engrg., vol. 62: 1442-1462, 2004.

[Belytschko et O'Neal, 2005]

T. Belytschko, M. O'Neal, Contact-impact by the pinball algorithm with penalty and Lagrangian methods, Int. J. for Num. Meth. in Engrg., vol. 31(3): 547-572, 2005.

[Brandt et al., 2010]

T. Brandt, V. Lestinen, T. Toppila, J. Kähkönen, A. Timperi, T. Pättikangas, I. Karp-pinen, Fluid-structure interaction analysis of large-break loss of coolant accident, Nuclear Engineering and Design, vol. 240: 2365-2374, 2010.

[Caleyron et al., 2013 (2)]

F. Caleyron, A. Combescure, V. Faucher, S. Potapov, SPH modeling of fluid-solid interaction for dynamic failure analysis of fluid-filled thin shells, Journal of Fluids and Structures, vol. 39: 126-153, 2013.

[Casadei, 2002]

F. Casadei, A hierarchic pinball method for contact-impact in fast transient dynamics, SIMAI conference, Chia Laguna, Italie, mai 2002.

[Crouzet et al., 2011]

F. Crouzet, V. Faucher, P. Galon, P. Piteau, P. Izquierdo, LOCA simulation: analysis of rarefaction waves propagating through geometric singularities, Proceedings of the ASME 2011 Pressure Vessels and Piping Conference (PVP 2011), Baltimore, Maryland, USA, July 17-21, 2011.

[Daude et al., 2012]

F. Daude, J. Berland, T. Emmert, P. Lafon, F. Crouzet, C. Bailly, A high-order finite-difference algorithm for direct computation of aerodynamic sound, Computers and Fluids vol. 61: 46-63, 2012.

[Després et Lagoutière, 2007]

B. Després, F. Lagoutière, Resolution of a two-components compressible fluid model with interfaces, Progress in Computational Fluid Dynamics, vol. 7(6): 295-310, 2007.

[Després et al., 2011]

B. Després, F. Lagoutière, E. Labourasse, I. Marmajou, An anti-dissipative transport scheme on unstructured meshes for multicomponent flows, International Journal on Finite Volumes, vol. 7: 30-65, 2011.

[Faucher et al., 2012]

V. Faucher, F. Crouzet, P. Piteau, P. Galon, P. Izquierdo, Numerical and experimental analysis of transient wave propagation through perforated plates for application to the simulation of LOCA in PWR, Nuclear Engineering and Design, vol. 253: 1-11, 2012.

[Faucher et al. (1), 2014]

V. Faucher, F. Crouzet, F. Debaud, Mechanical consequences of LOCA in PWR: Full scale coupled 1D/3D simulations with fluid-structure interaction, Nuclear Engineering and Design, vol. 270: 359-378, 2014.

[Faucher et Kokh, 2010]

V. Faucher, S. Kokh, Explosive fluid structure interaction using multi-component flows with anti-dissipation, V. Faucher, S. Kokh, ECCM 2010, Paris (France), May, 16 - 21, 2010.

[Faucher et Kokh, 2013]

V. Faucher, S. Kokh, Extended Vofire algorithm for fast transient fluid-structure dynamics with liquid-gas flows and interfaces, Journal of Fluids and Structures, vol. 39: 102-125, 2013.

[Gibert, 1988]

R.J. Gibert, Vibrations des Structures-Interactions Avec les Fluides. Edition Eyrolles, France, 1988.

[Hermansky et Krajkovic, 2011]

P. Hermansky, M. Krajkovic, The numerical simulation of the WWER440/V213 reactor pressure vessel internals response to maximum hypothetical Large-break Loss of Coolant Accident, Nuclear Engineering and Design vol. 241: 1177-1183, 2011.

[Idel'Cik, 1969]

I.E. Idel'Cik, Vibrations des Structures–Interactions Avec les Fluides. Edition Eyrolles, France, 1969.

[Lafaurie et al., 1994]

B. Lafaurie, C. Nardone, R. Scardovelli, S. Zaleski, G. Zanetti, Modelling merging and fragmentation in multiphase flows with SURFER, Journal of Computational Physics, vol. 113: 134–147, 1994.

[Kokh et Lagoutière, 2010]

S. Kokh, F. Lagoutière, An anti-diffusive numerical scheme for the simulation of interfaces between compressible fluids by means of a five equation model, Journal of Computational Physics vol. 229: 2773-2809, 2010.

[Mosso et Cleancy, 1995]

S. Mosso, S. Cleancy, A Geometrical Derived Priority System for Young's Interface Reconstruction, LA-CP-95-0081, LANL report, 1995.

[Nakano et Iwamoto, 1988]

M. Nakano, T. Iwamoto. Analysis of the Behavior of Liquid in a Fuel Tank, SAE Technical Paper Series, Passenger Car Meeting and Exposition, October 31–November 3, Dearborn, MI, USA, 1988.

[Papini et al., 2011]

D. Papini, D. Grgic, A. Cammi, M.E. Ricotti, Analysis of different containment models for IRIS small break LOCA, using GOTHIC and RELAP5 codes, Nuclear Engineering and Design vol. 241(4): 1152–1164, 2011.

[Sussman et al., 1994]

M. Sussman, P. Smereka, S. Osher, A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow, Journal of Computational Physics, vol. 114 (1) : 146–159, 1994.

[Timm, 2003]

T. Timm, Beschuss von flüssigkeitsgefüllten Behältern. Thèse de doctorat de l'Université de Karlsruhe, Allemagne, 2003.

[Valette et al., 2011]

M. Valette, J. Pouvreau, D. Bestion, P. Emonot, Revisiting large break LOCA with the CATHARE-3 three-field model, Nuclear Engineering and Design, vol. 241(11): 4487-4496, 2011.

3. PASSAGE À L'ÉCHELLE DES MÉTHODES DE RÉOLUTION EN DYNAMIQUE RAPIDE EN PRÉSENCE DE CONTRAINTES CINÉMATIQUES COMPLEXES

Une contrainte portant sur l'ensemble des méthodes et algorithmes présentés dans les chapitres précédents du présent mémoire est le temps nécessaire à la résolution des problèmes couplés qu'elles permettent de mettre en œuvre pour la représentation de systèmes de complexité industrielle. Elles doivent logiquement être accompagnées d'une stratégie de résolution exploitant au mieux les capacités des calculateurs disponibles, en particulier en termes de résolution parallèle.

L'ordre des chapitres du mémoire représente une hiérarchie respectée dans la définition de tout solveur parallèle pour les équations couplées présentées : les méthodes numériques issues de la modélisation physique ont toujours la priorité et toute technique de résolution accélérée dégradant la qualité de la solution du problème écrit initialement en séquentiel est exclue. Ce raisonnement s'applique en particulier à la gestion des conditions cinématiques de toute nature et requiert de prendre en compte la complexité algorithmique introduite par le calcul dual des forces de réaction (cf. paragraphe B-1.2.5).

Sur la base des équations du mouvement couplées intégrant les inconnues spécifiques aux contraintes cinématiques, on peut distinguer les centres de coût numérique dans le processus de résolution à chaque pas de temps de l'intégration explicite :

1. Tâche Principale 1 : boucle sur les éléments et les faces, pour le calcul des vecteurs de force \mathbf{F}_{int} , \mathbf{F}_p et $\mathbf{F}_{\text{trans}}$, ainsi que les vecteurs de flux \mathbf{F}_p et \mathbf{F}_E .

Cette boucle est caractérisée par des itérations indépendantes, avec un coût par itération très hétérogène : il dépend de la nature de chaque cellule (élément de structure ou de fluide), de la formulation de l'approximation par élément fini ou volume fini, de la nature de la relation de comportement ou de l'équation d'état affectée à la cellule, ainsi que de l'état courant du système mécanique à l'intérieur de la cellule (par exemple, élastique ou plastique pour un élément de structure).

2. Tâche Principale 2 : écriture des contraintes cinématiques, produisant la matrice \mathbf{C}^{n+1} et le vecteur de second membre \mathbf{S}^{n+1} courants.

Les contraintes permanentes sont gérées aisément. Au contraire, la gestion des contraintes non-permanentes requiert un effort particulier.

Il correspond dans la majorité des cas à la détection des contacts entre éléments de structure, ainsi qu'à l'écriture des relations d'interaction fluide-structure pour les maillages non-coïncidents (voir Figure 8). En pratique, les sous-tâches à réaliser sont des tris spatiaux pour identifier les candidats et des tests d'intersection/inclusion pour écrire les contraintes effectivement actives.

3. Tâche Principale 3 : calcul des forces de couplage

Le système (30) est tout d'abord condensé sur les Multiplicateurs de Lagrange. Le calcul des accélérations nodales est ensuite trivial une fois toutes les forces connues, grâce à la structure de la matrice de masse pour la structure et le fluide.

La condensation s'écrit :

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{D}}^{n+1} \begin{bmatrix} \mathbf{M}_S \\ \mathbf{M}_F^{n+1} \end{bmatrix}^{-1} {}^t \tilde{\mathbf{D}}^{n+1} \boldsymbol{\Lambda} &= \tilde{\mathbf{D}}^{n+1} \begin{bmatrix} \mathbf{M}_S \\ \mathbf{M}_F^{n+1} \end{bmatrix}^{-1} \mathbf{F}^{n+1} - \tilde{\mathbf{S}}^{n+1} \\ \Leftrightarrow \mathbf{H}^{n+1} \boldsymbol{\Lambda} &= \mathbf{B}^{n+1} \\ \text{où } \mathbf{F}^{n+1} &= \begin{bmatrix} \mathbf{F}_{\text{vol}}^{\text{str}} + \mathbf{F}_{\text{surf}}^{\text{str}} \\ \mathbf{F}_{\text{vol}}^{\text{flu}} + \mathbf{F}_{\text{surf}}^{\text{flu}} \end{bmatrix}^{n+1} - \begin{bmatrix} \mathbf{F}_{\text{int}}(\mathbf{Q}^{n+1}) \\ \mathbf{F}_p(\mathbf{U}^{n+1}) + \mathbf{F}_{\text{trans}}(\mathbf{U}^{n+1}) \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (70)$$

La dimension du système condensé est le nombre de contraintes cinématiques et elle est ainsi classiquement plus petite que celle du système global de plusieurs ordres de grandeur. Si certaines des contraintes écrites sont redondantes, le problème condensé devient singulier, mais il reste semi-défini positif, si bien que la solution cinématique est toujours unique, supposant que le problème est bien posé et que toutes les contraintes sont compatibles.

3.1 PARALLELISME A MEMOIRE DISTRIBUEE EXTENSIBLE ET DYNAMIQUE

3.1.1 Motivations, stratégie globale et objectifs pour le parallélisme à mémoire distribuée

Pour répondre au besoin d'intégration de simulations complexes en dynamique rapide des fluides et des structures dans les processus de conception au niveau industriel, le recours au calcul parallèle est obligatoire pour respecter les contraintes temporelles des unités d'ingénierie. Les supercalculateurs centralisés offrent couramment des centaines voire des milliers de cœurs qui peuvent être sollicités simultanément pour réduire le temps nécessaire à ces simulations portant sur plusieurs millions d'inconnues, à condition que le processus de résolution soit rendu compatible avec une telle utilisation de ces cœurs (i. e. extensible, voir ci-dessous).

Les architectures visées sont les *clusters* de nœuds multi-processeurs, ayant l'avantage d'être relativement courants et pouvant être assemblées sous forme de supercalculateurs massivement parallèles tels que TGCC/Curie en France. Ces machines sont conçues pour un parallélisme hybride à deux niveaux, avec un fonctionnement à mémoire partagée (*Shared Memory Processing* ou *SMP*) à l'intérieur des nœuds, et un fonctionnement à mémoire distribuée entre les nœuds. Le présent chapitre traite de ce dernier, dans la mesure où, d'une part, il représente un point de passage obligatoire pour utiliser un grand nombre de cœurs appartenant à des nœuds différents, et, d'autre part, il présente des verrous algorithmiques plus complexes que le premier.

Il est notable que les accélérateurs spécifiques, tels que les processeurs graphiques (*Graphical Processing Units* ou *GPU*) et les processeurs massivement multicœurs (*Intel Xeon Phi* notamment) ne sont pas pris en compte dans le travail proposé, en raison des concepts de programmation particuliers nécessaires à leur utilisation optimale (à l'exception d'une action ponctuelle dans le projet RePDyn, voir le paragraphe B-3.1.3). Une action de veille et d'exploitation éventuelle et progressive de ces dispositifs, représentant un domaine d'innovation majeur de la communauté des concepteurs d'architecture pour le calcul à haute performance, est toutefois intégrée au projet de recherche envisagé à court et moyen termes (voir le paragraphe C-2).

Une approche complémentaire à mémoire partagée est proposée au paragraphe B-3.2.1, complétant ainsi la stratégie parallèle globale proposée.

En ce qui concerne les performances attendues, le nombre total de cœurs visé pour la classe de simulations fortement couplées considérées dans ce document va de 512 à 2048. En prenant en considération que les nœuds de *clusters* comptent classiquement entre 8 et 32 cœurs utilisables en *SMP*, cela signifie que le nombre de nœuds requis va de 32 à 128, ce qui positionne les attentes en termes d'extensibilité pour l'approche à mémoire distribuée décrite dans les paragraphes suivants. La Table 38 propose un court glossaire des termes courants utilisés pour l'analyse des performances d'un algorithme parallèle.

| | |
|----------------------|--|
| <i>Speed-up</i> | Rapport entre le temps requis pour une simulation séquentielle de référence et le temps requis pour la même simulation utilisant plusieurs cœurs |
| <i>Extensibilité</i> | Evolution du <i>speed-up</i> quand le nombre de cœurs augmente |
| <i>Extensible</i> | Qualification d'un algorithme présentant une extensibilité croissante |
| <i>Efficacité</i> | Rapport entre le <i>speed-up</i> et le nombre de cœurs (plus l'efficacité est proche de 1, meilleur est l'algorithme) |

Table 38 : Court glossaire des termes courants utilisés pour l'analyse des performances d'un algorithme parallèle

Remarque :

On considère uniquement dans ce document l'extensibilité *forte*, relative à l'évolution du *speed-up* pour un modèle donné. Ceci signifie que la charge de travail par cœur diminue au fur et à mesure que le nombre de cœurs augmente, au contraire des mesures d'extensibilité *faible*, faites à partir de modèles différents pour chaque exécution assurant que la charge par cœur reste identique quand on augmente leur nombre (impliquant de travailler ainsi avec des modèles de taille croissante). L'extensibilité *faible* est une notion délicate à approcher quand les modèles de référence mettent en œuvre des modélisations complexes et de nombreux couplages.

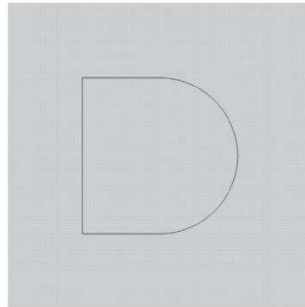
3.1.2 Solveur à mémoire distribuée pour la dynamique rapide des fluides et des structures

Le solveur proposé repose classiquement sur une décomposition de domaine, de telle sorte que le système global est séparé en systèmes plus petits portant sur des sous-domaines, chacun étant affecté à un processus exécuté sur un nœud du *cluster* de calcul utilisé. Pour obtenir efficacement la solution correcte pour le problème global, les tâches suivantes doivent être remplies par l'intermédiaire de communications additionnelles entre les

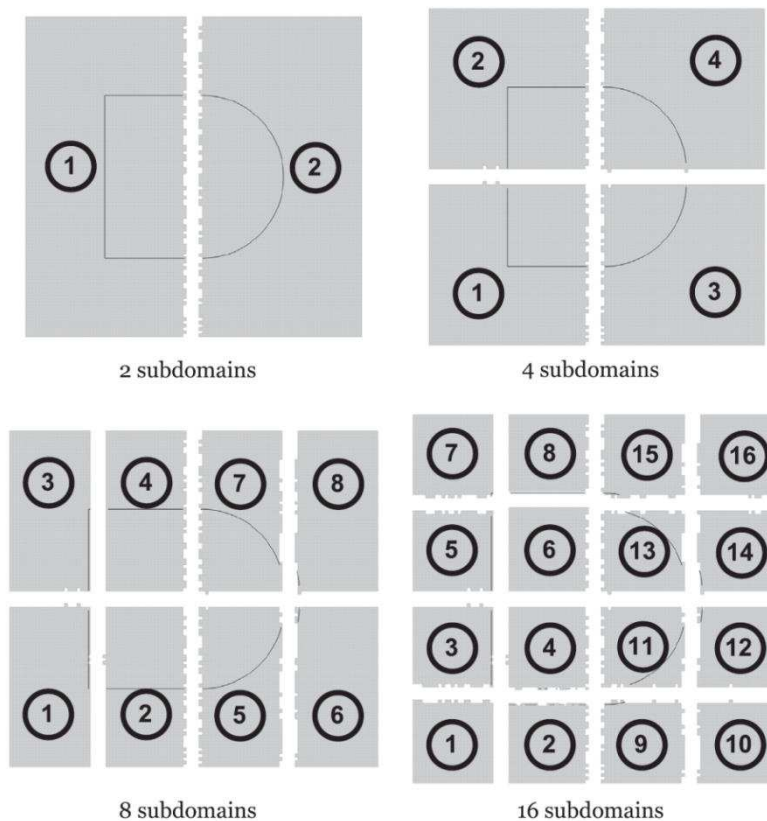
sous-domaines, réalisées à partir de la librairie de passage de messages *MPI* courante (pour *Message Passing Interface*) [Snir et al., 1996] :

1. transférer les informations entre les sous-domaines au niveau de leur frontière,
2. contrôler l'équilibrage de la charge pour la boucle sur les cellules et les faces,
3. écrire les contraintes cinématiques pour des degrés de liberté appartenant à des sous-domaines différents,
4. calculer les forces de couplage pour de telles contraintes cinématiques.

En ce qui concerne les contraintes cinématiques, aucune limitation portant sur la décomposition de domaine n'est autorisée, telle que par exemple forcer les contraintes à n'impliquer que des degrés de libertés internes à un unique sous-domaine. La définition des sous-domaines doit être totalement automatique et flexible pour répondre aux impératifs de robustesse et d'ergonomie imposés par l'utilisation industrielle des méthodes proposées. La technique utilisée repose sur une *Recursive Orthogonal Bisection* (voir par exemple [Reumann et al., 2011]), dont la caractéristique principale est de répartir les entités en fonction de leur proximité en espace, sans recourir à une éventuelle connectivité. Le processus de décomposition, dont la Figure 123 donne une illustration, est fondé sur des partitions successives du modèle le long des directions d'espace, utilisant le centre de gravité des entités pour les repérer.



(a) Maillage 2D d'un grille fluide avec une structure immergée sans connexion topologique entre les deux



(b) Construction récursive des sous-domaines

Figure 123 : Décomposition de domaine par *Recursive Orthogonal Bisection*

Remarque :

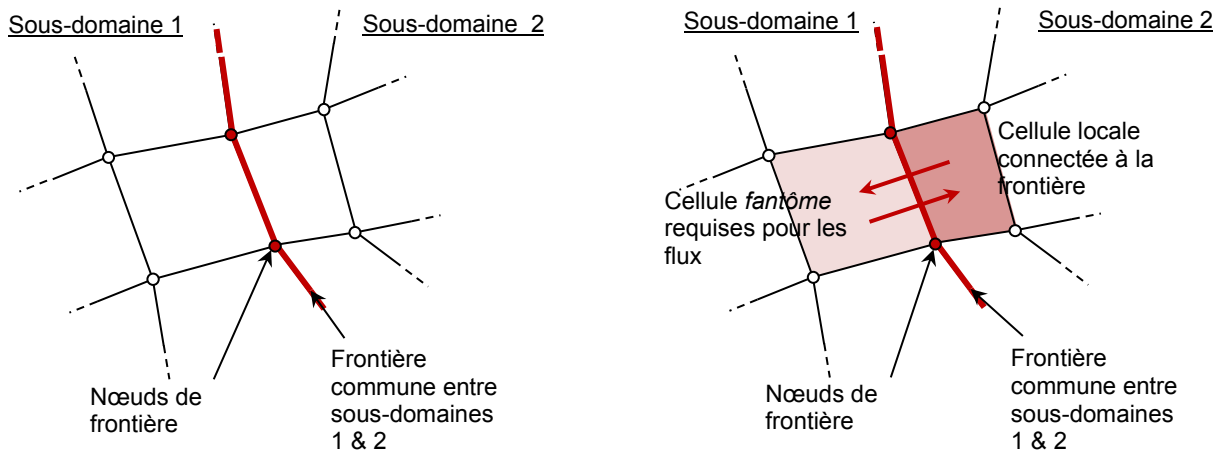
La gestion de la décomposition de domaine considérée dans la suite pour le calcul parallèle ne présente pas les contraintes pour l'écriture de la continuité des quantités cinématiques introduites dans la partie A du présent mémoire dédiée au travail doctoral.

Cela signifie aussi que le traitement des échelles de temps multiples avec un pas de temps par sous-domaine n'est pas fonctionnel dans le cas général. Il ne s'agit pas d'une régression, car de nombreux travaux resteraient à réaliser pour rendre cette approche compatible avec les contraintes cinématiques génériques fondamentales pour les systèmes fluide-structure d'intérêt, sans contraindre la décomposition de domaine (voir ci-dessus). Par ailleurs, la gestion des incompatibilités de maillage reste fonctionnelle, les équations de continuité correspondantes étant intégrées dans le formalisme générique des contraintes cinématiques : il s'agit alors de conditions permanentes à coefficients constants, dont l'écriture est découplée de la distribution des sous-domaines.

Pour conclure ce paragraphe introductif, en remplacement de la technique à plusieurs échelles de temps mise à l'écart, la question de l'hétérogénéité du pas de temps critique en fonction de la distribution de taille des entités de la discrétisation est traitée dans EPX via une approche dédiée reposant sur une intégration sélective des entités en fonction de leur pas critique propre [Casadei et Halleux, 2009]. Cette technique est pleinement compatible avec une décomposition de domaine standard et fait l'objet de travaux passés et en cours encore non publiés pour sa gestion parallèle. Elle n'est pas décrite plus avant dans ce document et on suppose ainsi que tous les sous-domaines de la décomposition ont le même pas de temps égal au minimum des pas de temps critiques sur l'ensemble des entités du problème. La gestion de la continuité cinématique entre les sous-domaines s'en trouve largement simplifiée et ne requiert pas l'introduction de multiplicateurs de Lagrange supplémentaires.

3.1.2.1 Frontières entre les sous-domaines

Deux classes de frontières sont considérées entre les sous-domaines, suivant qu'elles concernent des éléments de structure ou des éléments de fluide (voir Figure 124). Pour les éléments de fluide, les cellules *fantômes* sont mises à jour à l'aide de communications MPI avant de procéder à la *Tâche Principale 1* (voir le paragraphe introductif A-3), de telle sorte que les cellules locales ont toutes des voisins corrects pour le calcul des flux sur leurs faces.



(a) Eléments de structure : les forces calculées sur chaque sous-domaine sont sommées sur les nœuds de frontière

(b) Eléments fluides : les forces et les incréments de masse calculés sur chaque sous-domaine sont sommés sur les nœuds de frontière ; des cellules *fantômes* sont utilisées à travers la frontière pour permettre le calcul des flux corrects pour les cellules locales d'un sous-domaine connectées à la frontière

Figure 124 : Frontières entre les sous-domaines

3.1.2.2 Contrôle de l'équilibrage de la charge pour la boucle sur les cellules et les faces

Pour la *Tâche Principale 1*, l'équilibrage de la charge de calcul entre les sous-domaines (i.e. entre les processus MPI) est assurée par une pondération de la décomposition de domaine, prenant en compte le coût variable attaché à chaque cellule (voir à nouveau le paragraphe B-3). L'estimation *a priori* des poids optimaux est une opération difficile et ainsi, une stratégie *a posteriori* lui est préférée. Elle est fondée sur la remarque que l'intégration explicite en temps impose un grand nombre de pas de temps pour les simulations industrielles

courantes (de l'ordre de 100 000 par exemples pour un temps de simulation de 100 ms avec un pas de temps critique proche d'une microseconde).

Les premiers cycles en temps d'une simulation (classiquement de 100 à 1000, pour disposer d'un échantillon statistique pertinent) sont ainsi réalisés avec une décomposition de domaine reposant sur une pondération unitaire. L'équilibrage de la charge n'est pas optimal pour ces cycles, mais ils permettent de mesurer le coût de calcul réel associé à chaque cellule et de construire les poids adéquats pour une décomposition équilibrée. Les sous-domaines peuvent alors être reconstruits et la simulation peut être mise en œuvre pour sa majeure partie avec un équilibrage correct.

La mesure du coût numérique en cours de calcul est fréquemment entachée d'un bruit lié à l'environnement d'exécution du programme, si bien qu'il semble pertinent de filtrer les mesures au moment de générer la pondération à utiliser. Un seul filtre est actuellement mis en œuvre, qui consiste à grouper les entités en fonction du couple type d'éléments/type de matériau et à calculer un coût total par groupe, redistribué ensuite de manière égale sur tous les éléments concernés. Ce point est discuté au paragraphe B-3.1.3.3.

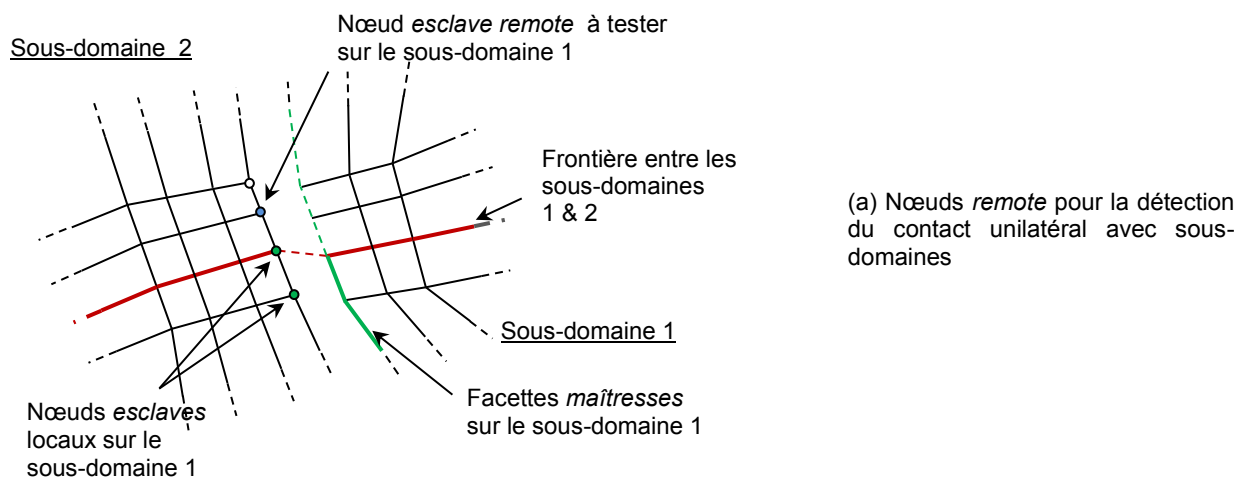
L'enchaînement entre la phase de mesure et la phase de calcul intensif peut être manuel (procédure de sauvegarde-reprise) ou automatique, en fonction de la capacité du programme à mettre à jour la décomposition de domaine en cours de calcul. Cette question est abordée au paragraphe B-3.1.4.2.

Pour les modèles où la *Tâche Principale 1* est dominante, on obtient un algorithme maîtrisé et extensible, comme le démontrent les exemples du paragraphe B-3.1.3.3 (calcul de structure uniquement) et du paragraphe B-3.1.4.3 (calcul fluide-structure).

3.1.2.3 Ecriture des contraintes non-permanentes à travers les frontières des sous-domaines

Les contraintes permanentes sont écrites au début de la simulation et sont réparties sur les sous-domaines au moment de la décomposition de domaine. Elles peuvent impliquer des degrés de liberté appartenant à des sous-domaines différents, ce qui doit être géré dans le processus de calcul des forces de couplage (voir ci-dessous).

Les contraintes non-permanentes sont écrites à chaque pas de temps et les degrés de liberté concernés sont inconnus. Classiquement, leur écriture implique des tests d'interaction entre des entités *maîtresses* attachées à des cellules du maillage (i. e. facettes *maîtresses* pour le contact ou éléments de structure immergée pour les contraintes décrites au paragraphe B-1.2.5) et des entités *esclaves* attachées à des nœuds (i. e. nœuds *esclaves* pour le contact ou nœuds fluides en interaction avec les structures immergées). Les entités *maîtresses* sont distribuées sur les sous-domaines comme les cellules, alors que les entités *esclaves* doivent être dupliquées pour assurer que tous les tests requis sont bien effectués et qu'aucune contrainte n'est omise. Les copies d'un nœud *esclave* donné sur des sous-domaines autres que son sous-domaine d'appartenance sont appelées nœuds *remote* (voir la Figure 125, dérivée de la Figure 8 avec sous-domaines).



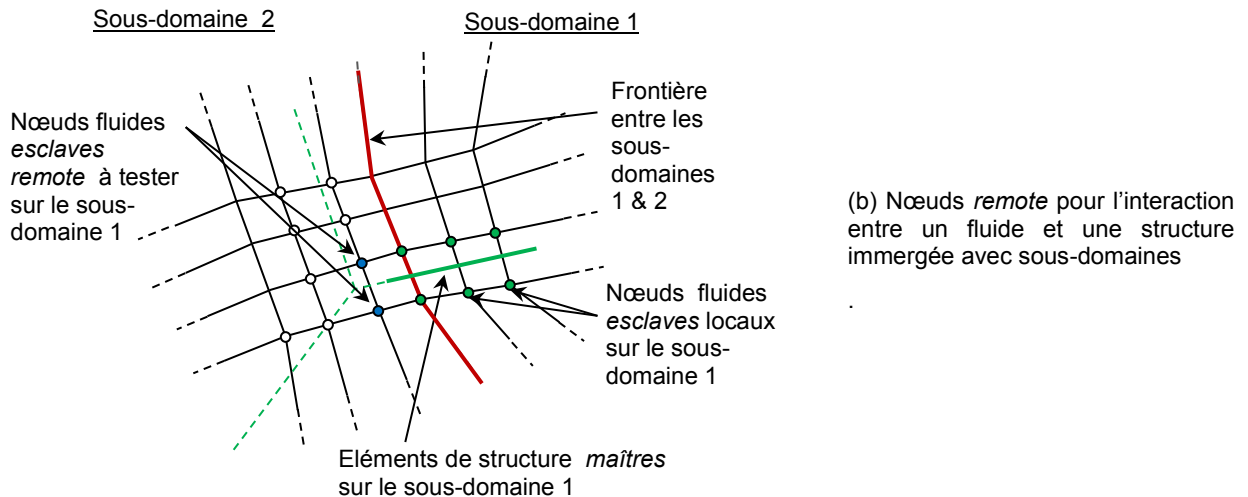


Figure 125 : Nœuds *remote* pour les contraintes non-permanentes avec sous-domaines

Les entités esclaves *remote* sont utilisées pour les tests d'interaction avec chaque entité *maîtresse* sur leur propre sous-domaine. Naturellement, comme ces tests reposent sur des techniques avancées de tri spatial par boîtes, certaines duplications (et les communications MPI associées) sont évitées sur la base de simples considérations géométriques. Par exemple, les entités *remote* à considérer potentiellement sur un sous-domaine et situées hors de la *bounding box* de ce sous-domaine sont ignorées.

Remarque :

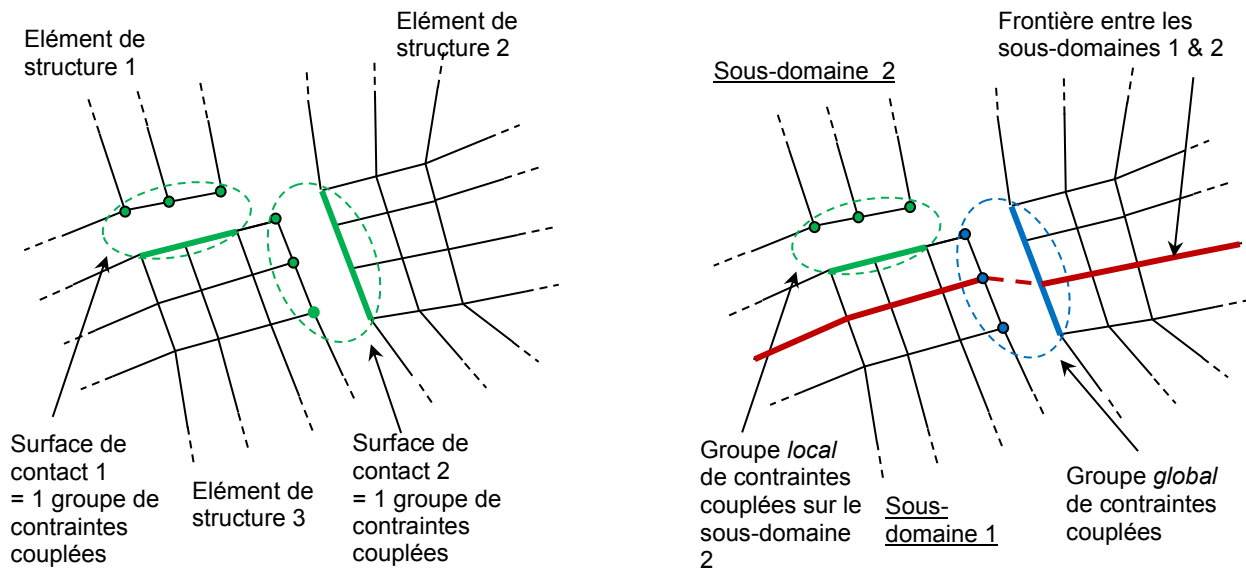
Le concept d'entité *remote* est étendu pour les interactions de voisinage entre entités particulières, pour le calcul correct des forces entre particules SPH, entre particules SPHC et entre éléments discrets à proximité des frontières entre les sous-domaines.

3.1.2.4 Calcul générique des forces de couplage

On décrit dans un premier temps la structure de l'opérateur de condensation \mathbf{H}^{n+1} . En vertu du caractère diagonal des matrices de masse dans l'expression de l'opérateur donnée par (70), les termes extra-diagonaux traduisent le couplage entre deux différentes contraintes cinématiques (i. e. elles partagent au moins un degré de liberté). Cela signifie que \mathbf{H}^{n+1} a une structure diagonale par blocs, chaque bloc correspondant à un groupe de contraintes couplées (voir Figure 126-a pour un exemple).

L'identification *a priori* des groupes de contraintes couplées représente un moyen efficace de résoudre le système condensé en traitant séparément les blocs indépendants.

La décomposition de domaine introduit une différenciation entre les groupes de contraintes couplés : certains ne concernent que des degrés de liberté locaux sur un sous-domaine (groupes *locaux*), alors que d'autres impliquent des degrés de liberté appartenant à des sous-domaines différents et sont appelés groupes *globaux* (voir Figure 126-b). Les groupes *locaux* peuvent être traités indépendamment par les processus MPI attachés aux sous-domaines. Au contraire, les groupes *globaux* représentent le problème-clé pour la gestion des contraintes cinématiques, puisqu'ils requièrent de considérer le problème condensé correspondant au niveau global, dégradant l'extensibilité de la stratégie parallèle proposée par des communications supplémentaires et des tâches de résolution spécifiques.



(a) Groupes de contraintes couplées dans le cas de 3 éléments de structure en contact sur 2 surfaces

(b) Même situation que (a) avec une décomposition en 2 sous-domaines et l'apparition d'un groupe *global* de contraintes couplées

Figure 126 : Groupes de contraintes cinématiques couplées

L'approche basique pour prendre en compte les groupes de contraintes *globaux* consiste à rassembler sur un unique processus MPI les données nécessaires pour construire et résoudre le système condensé correspondant, à partir de tous les sous-domaines impliqués par chaque groupe. On calcule ensuite séquentiellement les Multiplicateurs de Lagrange associés et on redistribue les forces de couplages sur les sous-domaines. La Table 39 donne les avantages et les inconvénients d'une telle stratégie.

| Avantages | Inconvénients |
|---|--|
| Procédure générique et robuste sans contrainte sur la définition des sous-domaines (voir le paragraphe B-3.1.2) | Communications supplémentaires pour le rassemblement des données associées aux groupes <i>globaux</i> et la redistribution des forces de couplages Goulet d'étranglement séquentiel pour le calcul des Multiplicateurs de Lagrange associés à ces groupes |

Table 39 : Avantages et inconvénients de la stratégie de gestion centralisée des groupes *globaux* de liaisons couplées

Les inconvénients sont à l'origine d'une perte d'extensibilité dramatique de la stratégie parallèle globale à chaque fois que le nombre et la taille des groupes *globaux* augmentent, ce qui intervient fréquemment lorsque le système mécanique considéré subit de fortes modifications durant la simulation (voir l'exemple rotor/stator au paragraphe B-3.1.3.5 par exemple). Cette approche est néanmoins la première implémentée dans EPX en raison de son caractère générique et on y fait référence dans la suite sous le nom d'*approche originale* à des fins de comparaison pour les approches avancées mises au point par la suite (cf. paragraphe B-3.1.4).

3.1.3 Projet ANR RePDyn : présentation et première phase d'identification des verrous parallèles

3.1.3.1 Contexte collaboratif

Le projet RePDyn est construit comme la suite logique des actions du CEA pour la mise en œuvre de l'approche parallèle à mémoire distribuée originale, répondant aux besoins suivants :

- ❖ impliquer les partenaires majeurs du Consortium pour faire coïncider les capacités parallèles d'EPX avec les attentes correspondant aux spécificités algorithmiques propres à leur contexte industriel,
- ❖ étendre le lien avec les partenaires académiques habituels et y intégrer des considérations relatives au calcul intensif,
- ❖ permettre le rapprochement entre le Consortium EPX et l'INRIA, acteur majeur de l'innovation en matière d'algorithmes parallèles, d'outils logiciels à haute performance et d'adaptation aux architectures de pointe.

Le soutien de l'Agence Nationale de Recherche pour ces actions est pleinement pertinent, d'une part pour afficher et mettre en valeur dans la communauté française les investissements de recherche et développement réalisés autour d'EPX, et d'autre part pour fortifier et étendre le réseau de partenaires autour des méthodes numériques en dynamique, ce qui représente une fonction majeure de l'agence.

Le projet comporte une part d'objectifs clairement définis, figurant dans le document de soumission accepté par l'ANR en réponse à l'appel à projets COSINUS 2009 [Faucher et al., 2009]. Il comporte également des objectifs plus ambitieux, dont la portée est conditionnée par la qualité de l'interaction entre les partenaires existants du Consortium et les nouveaux intervenants. La Table 40 propose une synthèse de ces objectifs.

| | Description | Attentes et évaluation | Partenaires impliqués |
|------------------------------|--|--|---------------------------------|
| Objectifs initiaux du projet | Mise en œuvre de la version parallèle à mémoire distribuée d'EPX sur des modèles industriels fortement couplés. Intégration de nouveaux algorithmes de couplage et portage dans le formalisme parallèle existant. | Examen détaillé du déroulement des simulations. Identification des verrous pour la performance parallèle et pour l'utilisation générique de la version parallèle d'EPX en environnement industriel. | CEA, EDF, ONERA, LaMSID, LaMCoS |
| | Optimisation de la stratégie parallèle à mémoire distribuée. | Levée des verrous identifiés. Passage d'une stratégie extensible jusqu'à 16 processus MPI à une stratégie extensible jusqu'à plus de 100 processus. | CEA, INRIA |
| | Evaluation des stratégies parallèles hybrides et multi-niveaux (GPU, MPI+SMP). | Analyse de faisabilité et production de démonstrateurs pertinents au niveau industriel. | CEA, INRIA |
| Objectifs étendus | Elaboration et implémentation d'une stratégie parallèle hybride de portée industrielle. | Méthode d'implémentation robuste, générique et pérenne. Intégration dans la gestion de configuration d'EPX. | CEA, INRIA |
| | Mise en œuvre effective du passage à l'échelle sur un supercalculateur centralisé. | Mobilisation de 512 à 1024 cœurs. Modèle de démonstration pleinement industriel sans simplification. | CEA, INRIA |

Table 40 : Objectifs initiaux et étendus du projet RePDyn

La première phase du projet est destinée à profiter pleinement du potentiel industriel du partenariat pour construire une base de connaissance à même de valider certains des choix algorithmiques antérieurs et d'orienter avec pertinence les travaux d'innovation prévus dans la seconde phase.

3.1.3.2 Méthodologie d'évaluation : autodiagnostic intégré à EPX

Pour identifier les sources effectives de coûts numériques dans EPX, deux voies sont envisagées : l'utilisation d'un outil externe de *profiling*, tel l'outil *vtune* associé au compilateur *Intel Fortran* utilisé pour le programme, ou l'instrumentation interne du programme. La définition d'une méthode de diagnostic robuste est un prérequis fondamental pour l'interprétation des résultats dans le cadre des tâches d'évaluation inscrites dans le projet, ainsi que pour la définition de stratégies d'optimisation dans le cadre des tâches de développement.

Dans un premier temps, seule la seconde voie est mise en œuvre, car elle permet d'obtenir des mesures sans modifier l'environnement d'exécution du programme, ce qui simplifie son utilisation générique par les utilisateurs impliqués dans le projet. Cela se fait au prix d'un effort de programmation des outils de mesure interne. La voie interne présente également l'avantage de profiter de l'expérience des programmeurs pour orienter les mesures et faciliter leur interprétation, là où un outil générique produit une grande quantité d'informations non-spécifiques.

Ce dernier point peut toutefois également représenter un avantage de la voie externe, permettant d'identifier des anomalies sans le biais de l'intuition des développeurs, une fois fourni l'effort d'analyse supérieur que requiert la généralité des mesures obtenues. Elle n'est donc pas écartée pour des actions futures en poursuite du projet.

Concrètement, sous leur forme actuelle, les mesures se présentent sous la forme suivante : une série d'appel dans le programme à une nouvelle routine (nommée **GET_WALLCLOCK_TIME**), avec comme arguments principaux un nom de tâche (chaîne de caractères) et un type de tâche (calcul ou communication). Chaque appel

déclenche sur chaque processus une mesure du temps effectif écoulé depuis l'appel précédent et l'ajoute à un temps total associé à chaque tâche.

A la fin du calcul, figurent dans le fichier *listing* (i.e le fichier contenant les impressions détaillées pour une simulation donnée) deux tableaux récapitulatifs du temps passé pour chaque tâche par chaque processus, pour les tâches de calcul d'une part et pour les tâches de communication d'autre part, dont un exemple est donné par la Table 41. Cela permet d'identifier les tâches consommatrices et les déséquilibres entre processus pour une tâche donnée.

Le modèle de programmation est tel que l'ajout d'une tâche est automatique dès que le programmeur intègre un appel supplémentaire à la routine `GET_WALLCLOCK_TIME`, ce qui a pour but de simplifier l'analyse détaillée d'une tâche consommatrice, demandant un découpage affiné des actions effectuées par le programme. Des courbes d'évolution du coût de chaque tâche au cours de la simulation peuvent être tracées via le traceur intégré à EPX.

| INFORMATIONS GLOBALES (HORS INITIALISATION) | | | | | | | | | | |
|---|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|--------|--------|
| TEMPS INITIAL : | 117547.5 | | | | | | | | | |
| TEMPS FINAL : | 117862.0 | | | | | | | | | |
| TEMPS ECOULE : | 314.5 | | | | | | | | | |
| TEMPS PRIS POUR LE CALCUL | | | | | | | | | | |
| | PROC 1 | PROC 2 | PROC 3 | PROC 4 | PROC 5 | PROC 6 | PROC 7 | PROC 8 | | |
| UPDATE VELOCITIES | 0.0 0% | 0.0 0% | 0.0 0% | 0.0 0% | 0.0 0% | 0.0 0% | 0.0 0% | 0.0 0% | 0.0 0% | 0.0 0% |
| UPDATE CONFIG AND GRID | 0.2 0% | 0.3 0% | 0.3 0% | 0.3 0% | 0.3 0% | 0.2 0% | 0.1 0% | 0.1 0% | 0.3 0% | 0.3 0% |
| REMOTE SLAVES FILTERING | 0.0 0% | 0.0 0% | 0.0 0% | 0.0 0% | 0.0 0% | 0.0 0% | 0.0 0% | 0.0 0% | 0.0 0% | 0.0 0% |
| COMPUTE ELEMENTARY FORCES | 301.8 96% | 71.7 23% | 237.6 76% | 66.3 21% | 13.8 4% | 11.5 4% | 27.6 9% | 24.0 8% | | |
| COMPUTE EXTERNAL FORCES | 0.2 0% | 0.1 0% | 0.2 0% | 0.0 0% | 0.1 0% | 0.0 0% | 0.1 0% | 0.1 0% | 0.1 0% | 0.1 0% |
| COMPUTE LOCAL LINK FORCES | 0.1 0% | 0.1 0% | 0.1 0% | 0.1 0% | 0.0 0% | 0.0 0% | 0.0 0% | 0.0 0% | 0.1 0% | 0.1 0% |
| SUM UNCOUPLED LINK FORCES | 0.3 0% | 0.5 0% | 0.4 0% | 0.5 0% | 0.3 0% | 0.3 0% | 0.3 0% | 0.3 0% | 0.5 0% | 0.5 0% |
| COMPUTE LOCAL ACCELERATIONS | 0.5 0% | 0.7 0% | 0.7 0% | 0.8 0% | 0.3 0% | 0.4 0% | 0.5 0% | 0.7 0% | | |
| COMPUTE GLOBAL LINK FORCES | 0.4 0% | 0.0 0% | 0.0 0% | 0.0 0% | 0.0 0% | 0.0 0% | 0.0 0% | 0.0 0% | 0.0 0% | 0.0 0% |
| COMPUTE NEXT VELOCITIES | 0.0 0% | 0.1 0% | 0.0 0% | 0.1 0% | 0.1 0% | 0.1 0% | 0.0 0% | 0.0 0% | 0.0 0% | 0.0 0% |
| PRINT AND FINISH CYCLE | 5.8 2% | 5.8 2% | 5.8 2% | 5.8 2% | 5.9 2% | 5.8 2% | 5.8 2% | 5.8 2% | 5.8 2% | 5.8 2% |
| TOTAL | 309.3 98% | 79.2 25% | 245.0 78% | 73.8 23% | 20.6 7% | 18.2 6% | 34.4 11% | 31.5 10% | | |
| TEMPS PRIS POUR LES COMMUNICATIONS | | | | | | | | | | |
| | PROC 1 | PROC 2 | PROC 3 | PROC 4 | PROC 5 | PROC 6 | PROC 7 | PROC 8 | | |
| UPDATE ALE DATA - 1 | 0.0 0% | 0.0 0% | 0.0 0% | 0.0 0% | 0.0 0% | 0.0 0% | 0.0 0% | 0.0 0% | 0.0 0% | 0.0 0% |
| UPDATE ALE DATA - 2 | 0.0 0% | 0.0 0% | 0.0 0% | 0.0 0% | 0.0 0% | 0.0 0% | 0.0 0% | 0.0 0% | 0.0 0% | 0.0 0% |
| UPDATE ALE DATA - 3 | 0.0 0% | 0.0 0% | 0.0 0% | 0.0 0% | 0.0 0% | 0.0 0% | 0.0 0% | 0.0 0% | 0.0 0% | 0.0 0% |
| SUM INTERFACE FORCES & MASSES | 0.7 0% | 230.8 73% | 64.9 21% | 236.3 75% | 288.8 92% | 291.4 93% | 275.1 87% | 278.4 89% | | |
| UPDATE FAILED ELEM DATA | 0.0 0% | 0.0 0% | 0.0 0% | 0.0 0% | 0.0 0% | 0.0 0% | 0.0 0% | 0.0 0% | 0.0 0% | 0.0 0% |
| COMPUTE NEXT TIME STEP | 0.4 0% | 0.4 0% | 0.4 0% | 0.4 0% | 0.4 0% | 0.4 0% | 0.4 0% | 0.4 0% | 0.4 0% | 0.4 0% |
| TREAT COMPATIBLE LINKS | 0.7 0% | 0.4 0% | 0.5 0% | 0.3 0% | 1.1 0% | 0.9 0% | 0.9 0% | 0.5 0% | | |
| BUILD GLOBAL LINKS STRUCTURE | 0.0 0% | 0.0 0% | 0.1 0% | 0.1 0% | 0.0 0% | 0.0 0% | 0.1 0% | 0.0 0% | 0.0 0% | 0.0 0% |
| FILL GLOBAL LINKS STRUCTURE | 1.8 1% | 0.4 0% | 0.6 0% | 0.8 0% | 0.9 0% | 1.2 0% | 1.3 0% | 1.5 0% | | |
| CORRECT LINKED ACCELERATIONS | 0.5 0% | 2.1 1% | 2.0 1% | 1.8 1% | 1.5 0% | 1.4 0% | 1.2 0% | 1.0 0% | | |
| TOTAL | 4.1 1% | 234.2 74% | 68.4 22% | 239.6 76% | 292.8 93% | 295.2 94% | 278.9 89% | 281.9 90% | | |

Table 41 : Exemple de sortie sur le fichier *listing* pour l'autodiagnostic d'EPX

On propose dans les sous-paragraphes suivants la description des cas de calcul menés par EDF, ONERA et CEA, répondant aux tâches d'évaluation prévues dans le projet. Contrairement au rapport d'avancement à T0+18 mois du projet [Faucher, 2011], les tests sont réorganisés en fonction de leur impact sur l'orientation des actions de développement postérieures.

Pour des raisons de confidentialité, le contenu physique des tests mis en œuvre par EDF n'est pas explicité. Ces tests sont nommés de manière générique Test EDF 1, Test EDF 2 et Test EDF 3, comme dans le rapport d'avancement. D'une manière générale, la taille de ces tests ne les rend pas significatifs pour une utilisation sur un grand nombre de processus, si bien qu'ils ne font pas l'objet d'une analyse d'extensibilité systématique. Ils sont néanmoins représentatifs de la physique mise en œuvre au niveau industriel par EDF R&D et présentent des spécificités riches d'enseignement pour l'optimisation parallèle des méthodes proposées en dynamique rapide des fluides et des structures.

3.1.3.3 Situations de calcul maîtrisées

D'une manière générale, les cas produisant une extensibilité satisfaisante avec le formalisme parallèle initial dans EPX sont ceux qui ne présentent pas, ou peu, de contraintes cinématiques non-permanentes. Cette observation

est cohérente avec la description de l'algorithme de calcul original des forces de liaisons couplant plusieurs processus (cf. paragraphe B-3.1.2.4).

Les modèles considérés présentent toutefois des caractéristiques différentes. Parmi les simulations figurant dans [Faucher, 2011], on sélectionne les plus représentatives, reportées sur la Table 44.

Simulation de l'instabilité de Richtmeyer-Meshkov consécutive à l'interaction entre une inclusion gazeuse et une onde de choc (mise en œuvre par le CEA)

Description et visualisations

Il s'agit d'un test faisant intervenir uniquement un domaine fluide représenté à l'aide de volumes finis *Cell-Centered*, avec un schéma d'ordre 2 en espace et en temps. Dans un canal bidimensionnel, une bulle de gaz circulaire est incluse dans un autre gaz, de densité et de rapport γ différents. Une onde de choc parcourt le canal et déstabilise la bulle.

La Figure 127 présente le champ de masse volumique dans le canal en fonction du temps, ainsi que les lignes isovaleurs de la norme du gradient de pression, permettant de localiser les chocs.

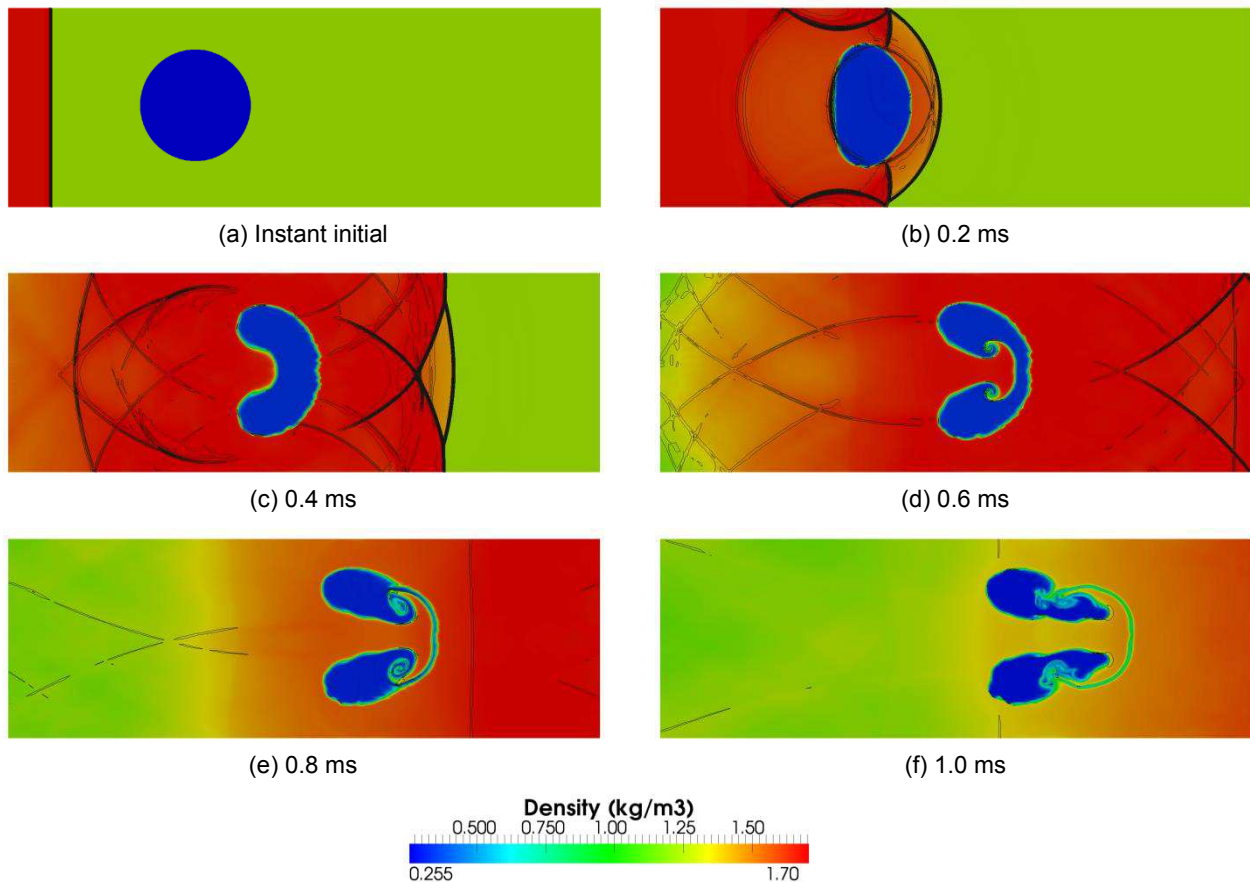


Figure 127 : Instabilité de Richtmeyer-Meshkov – Evolution du champ de masse volumique dans le fluide au cours du temps et localisation des chocs

La configuration du calcul est très favorable pour un solveur à mémoire distribuée : toutes les entités (cellules et faces pour le calcul des flux entre volumes finis) ont la même formulation et aucun couplage transitoire ne perturbe l'équilibrage de la charge entre les différents processus.

Mesures d'extensibilité et commentaires

La Table 42 donne les mesures d'extensibilité pour ce test, comprenant environ 1 300 000 volumes finis, de 4 à 80 processus MPI. On obtient des résultats très satisfaisants qui permettent d'envisager des simulations de cette nature sur des supercalculateurs massivement parallèles.

| | Temps écoulé pour 1000 cycles | Speed-up / 4 proc | Efficacité |
|---------------------|----------------------------------|-------------------|------------|
| 4 processus | 2841 s | | |
| 8 processus | 1447 s | 1.96 | 0.98 |
| 16 processus | 669 s | 4.25 | 1.06 |
| 32 processus | 368 s | 7.72 | 0.97 |
| 48 processus | 252 s | 11.3 | 0.94 |
| 64 processus | 211 s | 13.5 | 0.84 |
| 80 processus | 173 s | 16.4 | 0.82 |

Table 42 : Instabilité de Richtmeyer-Meshkov - Extensibilité entre 4 et 80 processus

A partir de 64 processus, on commence à remplir presque en totalité la mémoire locale des nœuds sur le *cluster* de développement utilisé pour les calculs (nœuds à 8 cœurs et 24 Go de mémoire au moment des tests), ce qui explique la baisse d'efficacité, à cause des accès concurrents à la mémoire locale.

Test EDF 1 (mise en œuvre par EDF, soutien du CEA)

Description

La particularité de ce jeu de données, uniquement structurel, est de mettre en œuvre des modèles de comportement aux coûts très différents dans différentes parties du modèle. Il est donc particulièrement adapté pour la qualification de la procédure de pondération de la décomposition de domaine, à partir de la mesure de l'équilibrage du calcul des forces internes élément par élément. Les mesures dans les paragraphes suivants sont effectuées avec une décomposition de domaine sur 8 processus.

Simulation avec une décomposition de domaine avec pondération homogène

Conformément à la procédure présentée au paragraphe B-3.1.2.2, une première simulation est effectuée sur un nombre réduit de cycles, avec pour objectif de proposer une cartographie du coût numérique par élément. Les résultats sont donnés par la Figure 128, avec et sans le filtrage du coût mesuré selon le critère cité au paragraphe B-3.1.2.2.

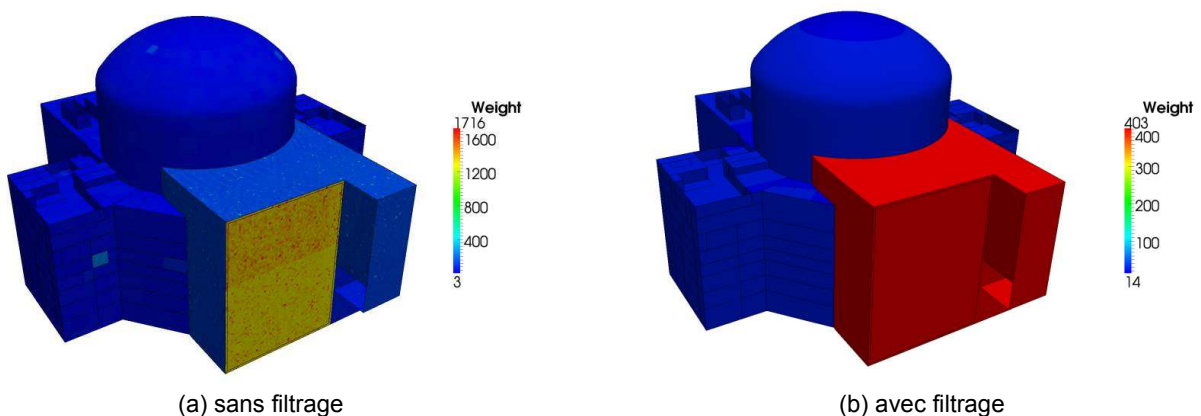


Figure 128 : Test EDF 1 - Cartographie du coût numérique

En raison des fortes disparités de coût, l'équilibrage entre les processus pour le calcul des forces internes élémentaires est mauvais (de 96% du temps du temps pour le sous-domaine 1 à 4% pour le sous-domaine 6, voir [Faucher, 2011] pour les mesures d'autodiagnostic détaillées). L'impact important (et relativement inattendu) du filtrage du coût vient de paramètres internes du modèle matériau (voir ci-dessous).

A des fins de comparaisons avec les autres configurations de calcul, le temps total nécessaire pour la simulation est de 315 s.

Simulation avec une décomposition de domaine avec pondération mesurée filtrée

A partir de la pondération filtrée extraite de la cartographie obtenue avec la décomposition de domaine initiale, on procède à une deuxième décomposition de domaine. La Figure 129 montre l'évolution des sous-domaines, réduisant logiquement le nombre d'éléments dans les zones identifiées comme les plus coûteuses.

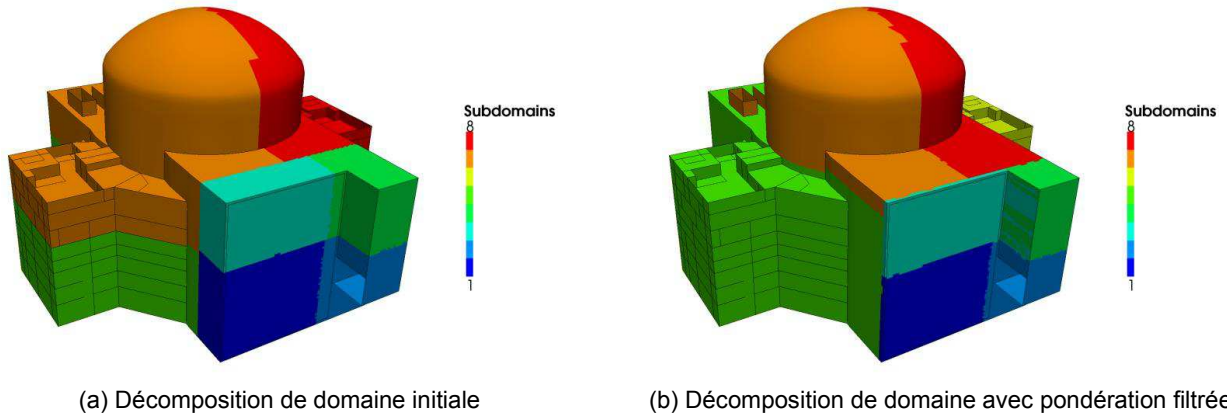


Figure 129 : Test EDF 1 - Evolution de décomposition de domaine avec l'utilisation de la pondération

A nouveau, les résultats sont mauvais pour l'équilibrage du calcul des forces internes, avec une faible amélioration apportée par la pondération proposée (représentant à présent 96% du temps total pour le sous-domaine 1 et 6% pour le sous-domaine 6).

L'explication se situe au niveau de la procédure de filtrage mise en œuvre, ce qu'illustre la comparaison entre la cartographie du coût filtré et la cartographie du coût brut (cf. Figure 128). Le filtrage fait disparaître une localisation forte du coût sur une zone d'éléments réduite, ce qui n'avait pas été anticipé au moment de la définition des critères de filtrage, dans la mesure où cette localisation intervient au sein d'une zone composée du même type d'éléments affectés du même modèle de matériau. Simplement, les paramètres internes du modèle de matériau sont différents sur certains éléments, introduisant une disparité de coût mettant en défaut le filtrage proposé.

Le temps total nécessaire à la simulation est alors de 308 s, soit un gain minime par rapport au cas précédent.

Simulation avec une décomposition de domaine avec pondération mesurée brute

Pour vérifier la conclusion précédente et tester un traitement palliatif, une décomposition de domaine est réalisée en utilisant comme pondération les coûts bruts mesurés, au lieu des coûts filtrés. La nouvelle décomposition de domaine, donnée par la Figure 130, montre l'importance accordée à la zone à fort coût identifiée au paragraphe précédent. On constate à ce titre que l'algorithme de décomposition de domaine par *Recursive Orthogonal Bisection* produit une décomposition non-optimale au niveau de la taille des interfaces dans cette configuration à cause de la planéité de la zone de concentration du poids.

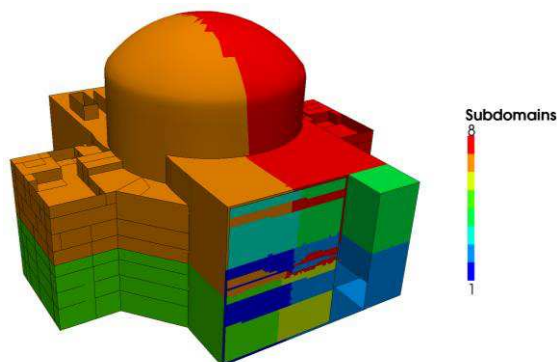


Figure 130 : Test EDF 1 - Décomposition de domaine avec pondération brute

Les résultats sont à présent satisfaisants, avec un équilibrage correct entre les processus (entre 83% et 75% du temps total pour tous les sous-domaines et un temps de résolution pour 8 processus divisé environ par 3 (119 s désormais), malgré les imperfections résiduelles dans la décomposition de domaine. Ceci oriente la recherche vers de nouveaux critères de filtrage du coût numérique et dans un premier temps, le filtrage devient optionnel dans la procédure standard de génération des poids pour la décomposition de domaine.

Commentaires

Une fois intégrée la spécificité du matériau utilisé dans ce test, ce cas valide la stratégie de pondération *a posteriori* de la décomposition de domaine pour l'équilibrage de la charge concernant la tâche de calcul des forces élémentaires.

Le test EDF 2 présente des résultats similaires en termes d'équilibrage de la charge, même s'il est notablement moins sensible à la pondération, qui n'apporte plus qu'un gain de 30% sur le temps de simulation total, en raison d'un déséquilibre moindre sans aucune pondération.

Impact balistique sur un réservoir par une approche couplée SPH/SPHC

Description et mesures d'extensibilité

Il s'agit d'un test représentatif de la thèse de F. Caleyron présenté au paragraphe B-2.1.1.5, dont la Figure 131 rappelle les principaux résultats. Ces résultats illustrent le support en développement parallèle apporté au doctorant en complément de l'encadrement méthodologique.

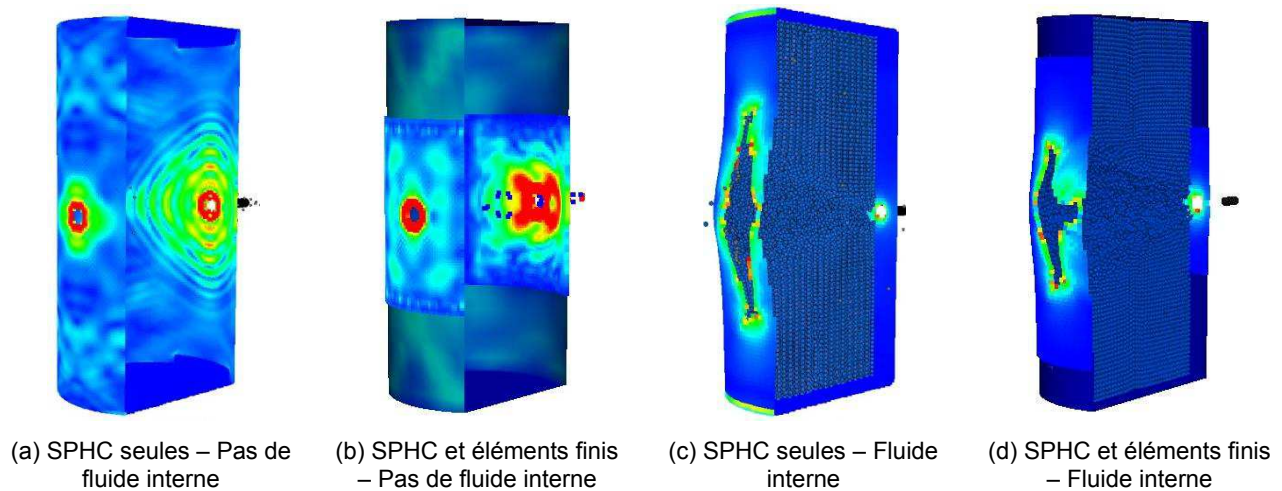


Figure 131 : Simulation de l'impact balistique sur un réservoir

Dans les cas avec particules SPHC seules pour le réservoir, les corrélations calcul-expérience sont satisfaisantes. Les cas avec couplage entre éléments finis et SPHC ont été mis en œuvre à la fin du travail doctoral et demandent encore une analyse approfondie, non portée par le projet. Ils attestent toutefois des travaux de développement réalisés pendant la thèse.

Pour le cas sans couplage avec les éléments finis et avec fluide interne, la Table 43 donne les mesures d'extensibilité préliminaire entre 4 et 32 processus MPI.

| | Temps écoulé pour 1000 cycles | Speed-up / 4 proc | Efficacité |
|---------------------|-------------------------------|-------------------|------------|
| 4 processus | 8687 s | | |
| 8 processus | 3723 s | 2.33 | 1.17 |
| 16 processus | 1917 s | 4.53 | 1.13 |
| 32 processus | 1199 s | 7.24 | 0.91 |

Table 43 : Couplage SPH et SPHC – Extensibilité entre 4 et 32 processus

Les efficacités supérieures à 1 sont le signe d'un effet de la structure de données, avec une mauvaise utilisation de la mémoire cache quand le nombre de particules augmente. La décomposition de domaine modère positivement cette situation sous-optimale, en réduisant les listes de particules sur les sous-domaines.

Commentaires

Les performances obtenues sont satisfaisantes, compte tenu de la faible maturité des méthodes au moment de la mise en œuvre des mesures d'extensibilité.

Table 44 : Situations de calcul représentatives du comportement satisfaisant du solveur à mémoire distribuée

3.1.3.4 Situations de calcul évaluées positivement avec réserves

On classe dans cette catégorie les simulations proposant une accélération parallèle correcte sur un nombre réduit de processus (jusqu'à 16), mais dont l'extensibilité pour des nombres de processus conformes aux attentes du projet n'est pas assurée. Les deux cas correspondants figurant dans [Faucher, 2011] sont décrits sur la Table 46.

Simulation de l'essai MARA10 (mise en œuvre par le CEA)

Mesures d'extensibilité

Le test est présenté au paragraphe B-2.2.2.3 dans le cadre de la validation du schéma VOFIRE. Les mesures d'extensibilité correspondantes de 4 à 32 processus sont présentées sur la Table 45. Il n'est pas pertinent de mobiliser un nombre supérieur d'unités de calcul compte tenu du faible nombre d'éléments du modèle (environ 250 000).

| | Temps écoulé pour 2500 cycles | Speed-up / 4 proc | Efficacité |
|---------------------|----------------------------------|-------------------|------------|
| 4 processus | 13939 s | | |
| 8 processus | 5703 s | 2.44 | 1.22 |
| 16 processus | 4035 s | 3.45 | 0.86 |
| 32 processus | 2963 s | 4.70 | 0.59 |

Table 45 : Simulation de l'essai MARA 10 - Extensibilité entre 4 et 32 processus

Commentaires

Les mesures d'autodiagnostic montrent que le coût de la simulation est progressivement dominé par la construction des connexions entre fluide et structure et l'identification des contraintes globales, avec un équilibrage médiocre dans le cas de 16 processus (de 0% du temps total pour des sous-domaines ne comptant aucune de ces connexions à 60% pour certains autres...). On obtient tout de même une efficacité relativement satisfaisante compte-tenu de la taille réduite du test. L'efficacité supérieure à 1 entre 4 et 8 processus (indiquée en rouge sur la Table 45) est attribuable comme précédemment à des questions de structures de données et de localité en cache connues par ailleurs.

La saturation du *speed-up* au-delà de 16 processus suggère tout de même que le traitement des contraintes cinématiques généralisées, telles que l'interaction fluide-structure avec frontières immergées dans le cas présent, doit être optimisé pour assurer le passage à l'échelle attendu.

Simulation de l'essai Meppen (mise en œuvre par EDF, soutien du CEA)

Description et visualisations

Cette simulation met en œuvre un missile métallique cylindrique modélisé à l'aide d'éléments finis de coque, projeté à grande vitesse contre une dalle en béton armé de section carrée, encastrée sur son contour et représentée à l'aide d'éléments discrets. Les phénomènes physiques prépondérants sont :

- ❖ la grande déformation du missile, avec la nécessité d'utiliser une loi de comportement sensible à la vitesse de déformation et de gérer l'auto-contact entre les plis formés lors du flambage dynamique du projectile,
- ❖ l'endommagement et la ruine de la cible en béton armé.

La Figure 132 présente les résultats de la simulation, en termes de déformation du projectile et d'endommagement dans la dalle (mesuré à partir du nombre de liaisons cohésives cassées entre éléments discrets), avec pour chaque instant une vue globale sur la gauche et un zoom sur la droite avec une coupe du maillage éléments discrets, pour bien visualiser le flambage dynamique du missile.

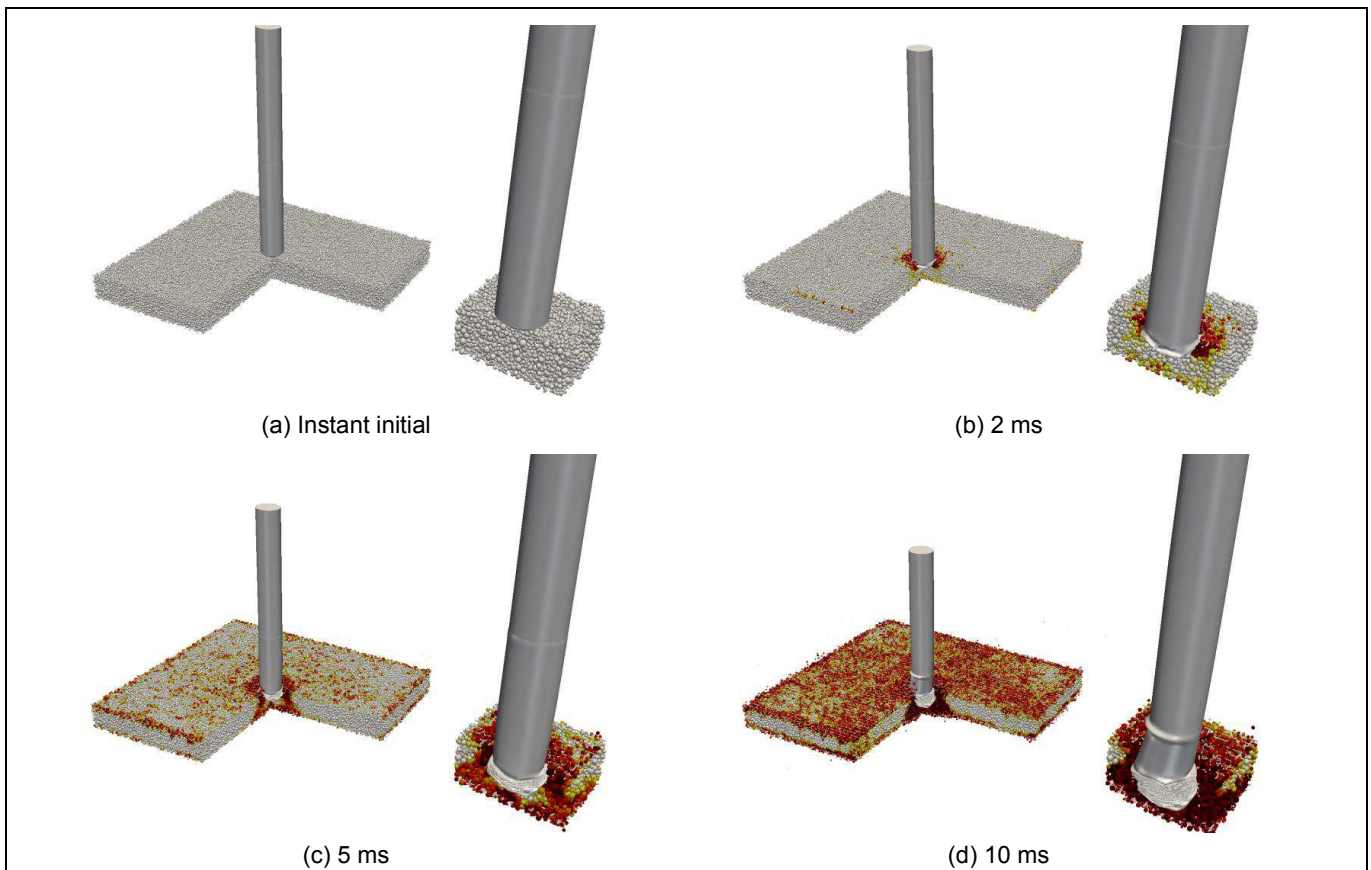
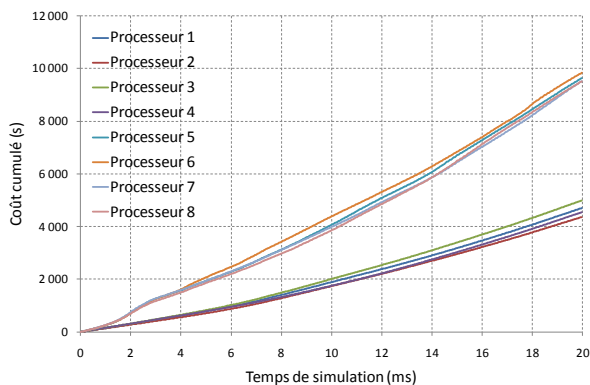


Figure 132 : Simulation de l'essai Meppen

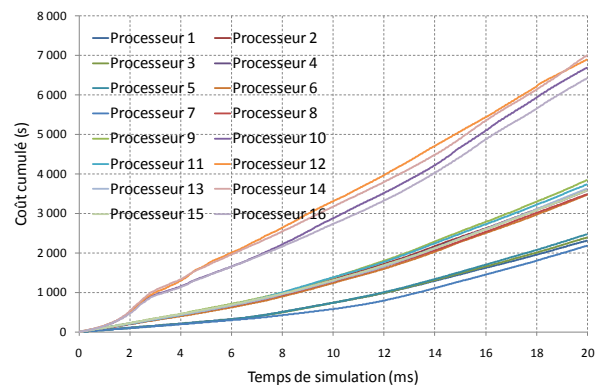
Le test présente un comportement anormal au niveau de la liaison entre l'acier de renforcement et le béton quand la flexion globale de la plaque devient importante, ce qui explique l'endommagement excessif en faces supérieure et inférieure de la plaque à partir de 10 ms. Il s'agit d'un problème de formulation connu, faisant partie du programme de R&D EDF/CEA en cours sur le sujet au moment de l'évaluation.

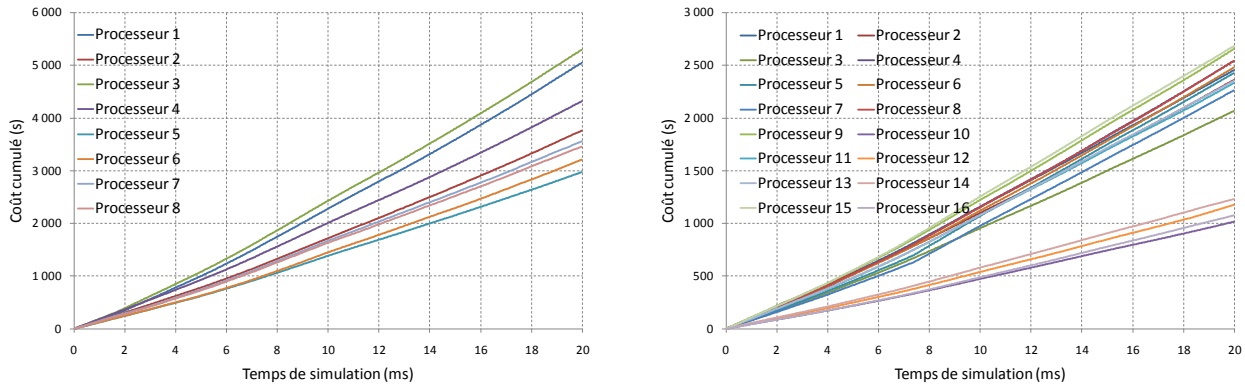
Mesures d'extensibilité

Au niveau de l'efficacité parallèle, un aspect majeur de cette simulation est la variation des sources de coût au cours du calcul, avec notamment une augmentation locale des communications liées à l'identification des connexions globales à proximité de la zone d'impact. La Figure 133 illustre cette situation à l'aide de courbes tracées par l'intermédiaire des outils d'autodiagnostic du programme. On trace donc en fonction du temps de simulation le temps de résolution cumulé sur chaque processus en fonction du temps de simulation pour les trois tâches les plus consommatrices du calcul : le calcul des forces internes élémentaires (contenant également la tâche d'identification des liaisons entre éléments discrets), le calcul des forces entre éléments discrets et la tâche d'identification des connexions globales. Deux cas sont considérés pour chaque jeu de courbes : un cas avec 8 processeurs (à gauche) et un autre pour 16 processeurs (à droite).

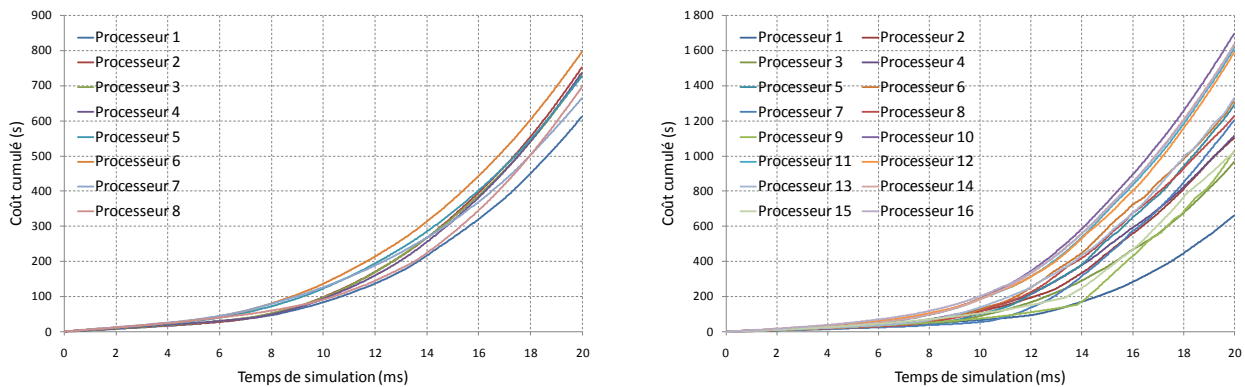


(a) Coût du calcul des forces élémentaires et identification des liaisons entre éléments discrets





(b) Coût du calcul des forces entre éléments discrets



(c) Coût de l'identification des connexions globales

Figure 133 : Simulation de l'essai Meppen - Courbes d'évolution du coût par tâche et par processus

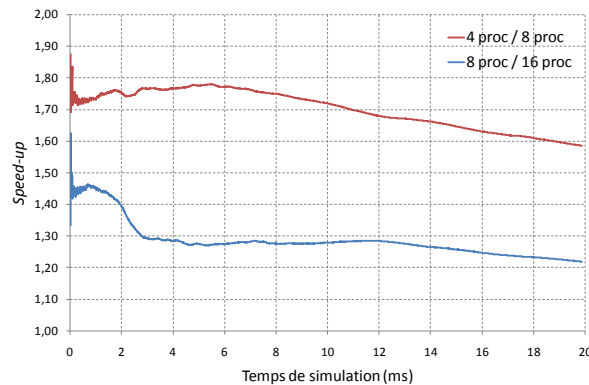
Sur les courbes précédentes, un équilibrage correct est montré par des courbes confondues pour tous les processus. Un coût constant durant la simulation pour un processus se traduit par une courbe proche d'une droite.

On observe ainsi un mauvais équilibrage pour le calcul des forces élémentaires, avec plusieurs faisceaux de droites, pour les deux nombres de processus, ce qui correspond à une mauvaise répartition des différents modèles sur les processus, avec un coût par élément différent pour un élément discret et pour un élément fini. On a un faisceau supplémentaire avec 16 processus, ce qui correspond à un ensemble de sous-domaines avec un mélange identique d'éléments finis et d'éléments discrets. La question de la distribution des éléments en fonction de la formulation, conformément aux techniques de pondération, est déjà évoquée en détail aux paragraphes B-3.1.2.2 et B-3.1.3.3.

En ce qui concerne le calcul des forces entre éléments discrets, on obtient des coûts fixes à nouveau relativement mal équilibrés, mais le passage de 8 à 16 processus reste satisfaisant au niveau de la diminution du temps passé pour cette tâche.

Enfin, l'identification des connexions globales, tâche de communication spécifique au calcul parallèle, constitue le point le plus problématique, en raison d'une augmentation exponentielle du coût au fur et à mesure que le modèle éléments discrets perd sa structure, avec un mélange des entités qui multiplie les liaisons de contact entre sous-domaines. Une solution palliative serait de reconstruire la décomposition de domaine pour tenir compte de la nouvelle distribution spatiale des éléments (cf. paragraphe B-3.1.4.2).

Pour une vision plus globale de l'extensibilité et de sa variation en fonction du temps, la Figure 134 propose l'évolution du *speed-up* en fonction du temps de simulation, entre 4 et 8 processus d'une part et entre 8 et 16 processus d'autre part.

Figure 134 : Simulation de l'essai Meppen - Evolution du *speed-up*

On observe une dégradation progressive attendue du *speed-up*, en particulier entre 8 et 16 processus, pour les raisons citées précédemment.

Commentaires

En l'état, ce modèle démontre que le parallélisme à mémoire distribuée est fonctionnel avec les éléments discrets et leur interaction avec les éléments finis pour des phénomènes fortement non-linéaires, mais les limitations mises en évidence ne permettent pas à l'issue la première phase du projet d'envisager le passage à l'échelle pour de tels modèles dont la topologie évolue très fortement en cours de calcul.

Table 46 : Situations de calcul fonctionnelles mais soulevant des limites du solveur à mémoire distribuée

3.1.3.5 Situations de calcul évaluées négativement

Deux tests du projet figurant dans [Faucher, 2011] sont classés dans cette catégorie, mais seul celui décrit sur la Table 47 présente un niveau de maturité suffisant pour être significatif. Le second, nommé Test EDF 3, met en œuvre la technique de couplage entre éléments finis et éléments discrets, évoquée au paragraphe B-2.1.3, à un niveau industriel pour lequel elle n'est pas encore qualifiée.

Perte d'aubes sur un rotor (mise en œuvre par ONERA)

Description

Ce test correspond à un lâcher d'aubes de turbine dans un turbocompresseur aéronautique, selon un scénario de libération des aubes imposé. Le rotor est représenté, ainsi que le stator, sous la forme d'un carter destiné à retenir les aubes rompues. Il est caractérisé par une importance majeure de la gestion du contact, entre les aubes entre elles et entre les aubes et le carter. La Figure 135 présente une partie du modèle. Le contexte et les résultats ne sont pas détaillés compte-tenu de contraintes de confidentialité.



Figure 135 : Perte de pales sur un rotor – Etat initial

Extensibilité

Malgré une accélération satisfaisante proposée par le traitement parallèle sur les premiers cycles de la simulation, l'efficacité parallèle est très mauvaise sur l'intégralité du calcul, dès un faible nombre de processus impliqués, avec un temps passé sur 8 processus supérieur à celui sur un seul processus.

En séparant les coûts par tâche (cf. [Faucher, 2011]) pour la simulation à 8 processus, on observe que le calcul élémentaire des forces internes et l'identification des liaisons de contact sont correctement distribués. Au contraire, la décomposition de domaine entraîne un surcoût majeur pour le filtrage et le transfert des informations pour les nœuds *remote* candidats au contact et la résolution séquentielle du problème sur les connexions globales représente également une surcharge considérable dans cette configuration.

La Figure 136 illustre la problématique, liée à décomposition de domaine effectuée au pas initial pour une simulation avec de grands mouvements d'éléments de structure les uns par rapport aux autres.

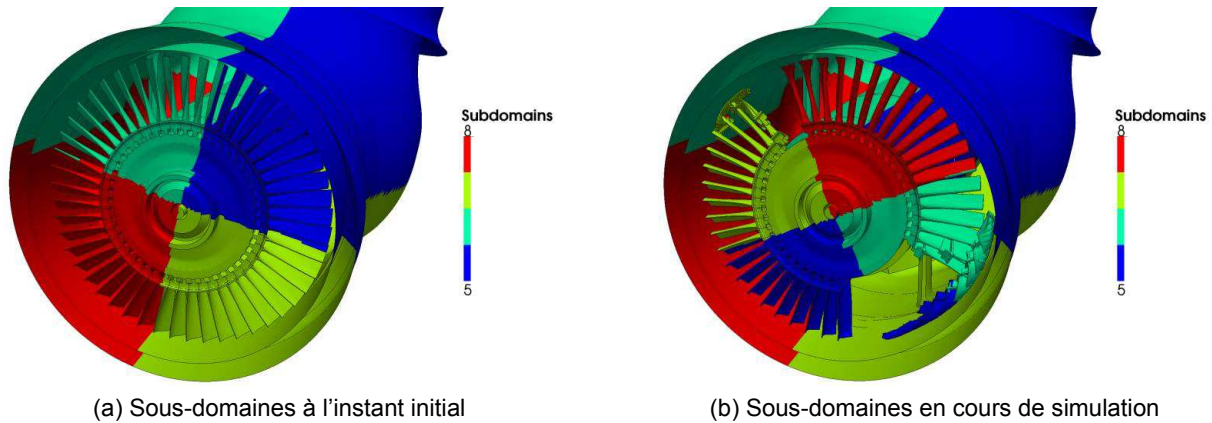


Figure 136 : Perte de pales - Evolution des sous-domaines en cours de simulation, avec la rotation du rotor par rapport au stator

La partie du modèle représentée ne concerne que les sous-domaines numérotés de 5 à 8. Le déplacement relatif de grande amplitude du rotor par rapport au stator entraîne une perte de localité pour les liaisons de contact entre les deux entités. De plus, la *bounding box* de chaque sous-domaine devient très étendue, ce qui multiplie les informations à transférer sur la frontière pour les nœuds candidats au contact (voir le paragraphe B-3.1.2.3).

Commentaires

Cette situation met ainsi en défaut l'approche parallèle existante sur deux points fondamentaux :

- ❖ le filtrage des entités *remote* pour limiter les communications entre sous-domaines au moment de l'écriture des connexions,
- ❖ la prédominance d'une résolution séquentielle du problème posé sur les connexions au niveau global.

Table 47 : Situation de calcul mettant en échec le solveur à mémoire distribuée

3.1.3.6 Conclusion partielle à mi-parcours du projet RePDyn

On reporte sur la Table 48 les conclusions des paragraphes précédents, mises en relation avec la démarche de recherche proposée pour le projet complet, afin de dégager clairement les directions de recherche pour sa seconde phase. Y sont intégrées les recommandations les plus significatives formulées lors de la revue à mi-parcours du projet.

| | Description | Attentes et évaluation | Degré de réalisation |
|------------------------------|--|--|---|
| Objectifs initiaux du projet | Mise en œuvre de la version parallèle à mémoire distribuée d'EPX sur des modèles industriels fortement couplés. Intégration de nouveaux algorithmes de couplage et portage dans le formalisme parallèle existant. | Examen détaillé du déroulement des simulations. Identification des verrous pour la performance parallèle et pour l'utilisation générique de la version parallèle d'EPX en environnement industriel. | Atteint |
| | Optimisation de la stratégie parallèle à mémoire distribuée. | Levée des verrous identifiés. Passage d'une stratégie extensible jusqu'à 16 processus MPI à une stratégie extensible jusqu'à plus de 100 processus. | Partiellement atteint : - validation de la pondération de la décomposition de domaine - optimisation algorithmique pour les contraintes cinématiques en cours |
| | Evaluation des stratégies parallèles hybrides et multi-niveaux (GPU, MPI+SMP). | Analyse de faisabilité et production de démonstrateurs pertinents au niveau industriel. | Partiellement atteint : - faisabilité sur GPU réalisée pour l'approche par éléments discrets, mais abandonnée par manque de robustesse - travaux préliminaires pour l'intégration d'une nouvelle approche MPI+ SMP initiés |
| Objectifs étendus | Elaboration et implémentation d'une stratégie parallèle hybride de portée industrielle. | Méthode d'implémentation robuste, générique et pérenne. Intégration dans la gestion de configuration d'EPX. | A réaliser |
| | Mise en œuvre effective du passage à l'échelle sur un supercalculateur centralisé. | Mobilisation de 512 à 1024 cœurs. Modèle de démonstration pleinement industriel sans simplification. | A réaliser – Enjeu majeur soulevé lors la revue à mi-parcours du projet |

Table 48 : Suivi de la réalisation des objectifs au terme de la première phase du projet

La deuxième phase du projet est ainsi consacrée d'une part à l'optimisation en profondeur de la stratégie parallèle à mémoire distribuée, en définissant et en implémentant une stratégie innovante pour le calcul des forces associées aux contraintes cinématiques globales, et d'autre part à la mise en œuvre complète d'une stratégie hybride à mémoire distribuée et partagée, de sa définition à son exécution sur un supercalculateur centralisé (voir la section B-3.2).

3.1.4 Projet ANR RePDyn : décomposition de domaine dynamique et solveur extensible pour les contraintes cinématiques inter-domaines

Pour parvenir à l'extensibilité attendue pour le solveur à mémoire distribuée, une approche innovante est indispensable pour le calcul des forces de couplage impliquant plusieurs processus MPI, en se fondant sur les remarques suivantes :

1. mettre en œuvre un solveur distribué pour le problème condensé *global*, une fois construit après l'étape de centralisation des données, est sans intérêt : en raison de la taille réduite du système linéaire à résoudre (voir le paragraphe B-3.1.2.4), le coût de la redistribution des données avant la solution parallèle compense aisément toute accélération potentielle du solveur,
2. un nombre croissant de contraintes cinématiques *globales* peut être vu comme un indicateur d'une décomposition de domaine devenue inappropriée et qu'il serait judicieux de reconstruire pour *relocaliser* les contraintes cinématiques.

Les développements méthodologiques et les illustrations des paragraphes suivants sont extraits de [Faucher, 2014].

3.1.4.1 Solveur distribué extensible pour les contraintes cinématiques inter-domaines

Pour éviter la centralisation des données pour la construction effective de l'opérateur condensé *global*, une stratégie de résolution itérative est conçue, en remplacement de la solution directe existante. Compte tenu de la nature semi-définie positive de l'opérateur, l'algorithme retenu est un Gradient Conjugué Préconditionné [Ciarlet, 1990].

La Table 49 détaille une itération de l'algorithme (de l'indice interne k à l'indice interne $k+1$).

| Solution estimée Λ^k , résidu R^k , direction de recherche P^k et vecteur interne Z^k connus | |
|--|---|
| Calcul du 1 ^e paramètre de recherche | $\alpha_k = \frac{{}^t R_k Z_k}{{}^t P_k H^{n+1} P_k} \quad (71-a)$ |
| Mise à jour de la solution estimée | $\Lambda_{k+1} = \Lambda_k + \alpha_k P_k \quad (71-b)$ |
| Calcul du résidu courant | $R_{k+1} = B^{n+1} - H^{n+1} \Lambda_{k+1} = R_k - \alpha_k H^{n+1} P_k \quad (71-c)$ |
| Si convergence selon un critère d'arrêt portant sur la norme du résidu, fin de la résolution | |
| Inversion du préconditionneur | $Q^{n+1} Z_{k+1} = R_{k+1} \quad (71-d)$ |
| Calcul du 2 ^e paramètre de recherche | $\beta_{k+1} = \frac{{}^t R_{k+1} Z_{k+1}}{{}^t R_k Z_k} \quad (71-e)$ |
| Mise à jour de la direction de recherche | $P_{k+1} = Z_{k+1} + \beta_{k+1} P_k \quad (71-f)$ |

Table 49 : Itération de l'algorithme de Gradient Conjugué Préconditionné

Q^{n+1} est le préconditionneur, construit à partir de H^{n+1} (voir ci-dessous). Les deux tâches de calcul principales sont l'évaluation du vecteur $H^{n+1} P_k$ dans la formule (71-a) et l'inversion du préconditionneur (71-d).

Pour décrire l'exécution parallèle de ces tâches, on donne sur la Figure 137 la structure typique d'une matrice de contraintes impliquant des degrés de liberté *remote*, dans le cas illustratif de trois contraintes et trois sous-domaines. Le sous-domaine où la contrainte est écrite est celui sur lequel sont réalisés les tests géométriques associés à la création de la contrainte (i.e. par exemple pour le contact, le sous-domaine possédant la facette *maîtresse* concernée). Dans le cas général, toute contrainte peut impliquer des degrés de liberté locaux ou *remote*.

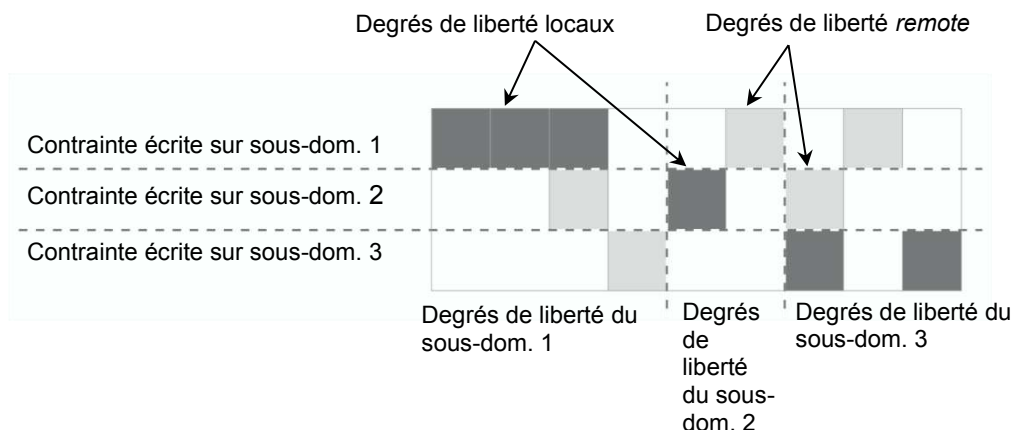


Figure 137 : Structure typique d'une matrice de contraintes impliquant des degrés de liberté *remote*

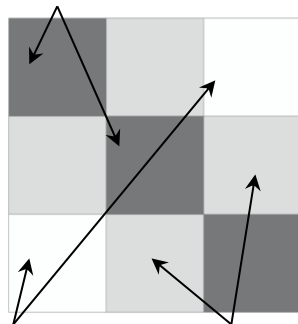
L'évaluation du vecteur $H^{n+1} P_k = \tilde{D}^{n+1} [M^{n+1}]^{-1} [{}^t \tilde{D}^{n+1}] P_k$ est effectuée en deux étapes, pour isoler les calculs qui peuvent être réalisés localement sur les sous-domaines, ce que présente la Table 50.

| | |
|--|--|
| <p><i>Etape 1 : Calcul de $\mathbf{F}_k = {}^t \tilde{\mathbf{D}}^{n+1} \mathbf{P}_k$</i></p> | <p>Les produits scalaires entre les colonnes de $\tilde{\mathbf{D}}^{n+1}$ et les directions de recherche \mathbf{P}_k sont calculés sur le sous-domaine sur lequel chaque contrainte est écrite.</p> |
| | <p><i>Communications</i></p> |
| | <p>Les contributions au vecteur \mathbf{F}_k sont sommées pour les degrés de liberté impliqués à la fois localement et en tant que <i>remote</i> dans des contraintes cinématiques couplées, par l'intermédiaire de communications MPI réduites et peu coûteuses.</p> |
| <p><i>Etape 2 : Calcul de $\mathbf{H}^{n+1} \mathbf{P}_k = \tilde{\mathbf{D}}^{n+1} [\mathbf{M}^{n+1}]^{-1} \mathbf{F}_k$</i></p> | <p>$\mathbf{M}^{n+1}$ est la matrice diagonale contenant les masses associées à tous les degrés de liberté contraints, avec duplication des valeurs pour les degrés de liberté <i>remote</i>, de telle sorte que les composantes du vecteur $\mathbf{H}^{n+1} \mathbf{P}_k$ peuvent à nouveau être calculées localement sur le sous-domaine sur lequel chaque contrainte est écrite.</p> |

Table 50 : Séparation de l'évaluation du vecteur $\mathbf{H}^{n+1} \mathbf{P}_k$ pour faire apparaître des contributions locales

En ce qui concerne le préconditionneur, un choix satisfaisant doit d'une part permettre une solution distribuée du système (71-d) et d'autre part assurer une convergence rapide de l'algorithme en un nombre réduit d'itérations. La stratégie de construction du préconditionneur \mathbf{Q}^{n+1} est illustrée sur la Figure 138, sur la base de la structure de l'opérateur \mathbf{H}^{n+1} correspondant à la matrice $\tilde{\mathbf{D}}^{n+1}$ présentée sur la Figure 137.

Terme diagonal, calculé exactement sur le sous-domaine sur lequel est écrite la contrainte correspondante

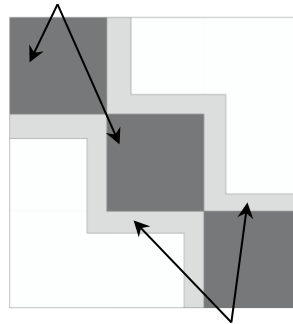


Terme extra-diagonal nul en l'absence de couplage entre les contraintes

Terme extra-diagonal non-nul, calculé à partir de données appartenant à plusieurs sous-domaines

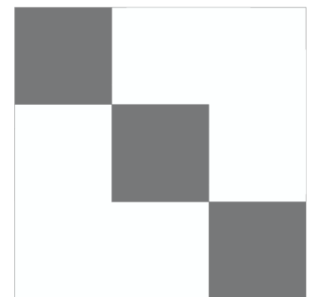
(a) Structure de l'opérateur \mathbf{H}^{n+1} correspondant exactement à la structure de la matrice $\tilde{\mathbf{D}}^{n+1}$ donnée par la Figure 137

Blocs diagonaux, calculés exactement sur les sous-domaines sur lesquels sont écrites les contraintes correspondantes



Blocs extra-diagonaux de taille réduite si les couplages inter-domaines entre contraintes sont limités

(b) Identique à (a), en considérant la structure de $\tilde{\mathbf{D}}^{n+1}$ en termes de blocs au lieu de scalaires



(c) Préconditionneur \mathbf{Q}^{n+1} obtenu en négligeant les couplages inter-domaines

Figure 138 : Structure de l'opérateur \mathbf{H}^{n+1} , en séparant les termes calculables localement des termes de couplage entre les sous-domaines

Une décomposition de domaine appropriée doit limiter le nombre des couplages inter-domaines entre les contraintes cinématiques, de telle sorte que les blocs locaux soient dominants dans l'opérateur \mathbf{H}^{n+1} . Le préconditionneur \mathbf{Q}^{n+1} est ainsi obtenu en ignorant les blocs *gris clair* sur la Figure 138-b, conduisant à une série de système locaux à résoudre pour calculer le vecteur interne \mathbf{Z}^{n+1} . Ce choix présente un caractère optimal puisque la quantité maximale de données de l'opérateur \mathbf{H}^{n+1} est conservée pour assurer le meilleur taux de

convergence, tout en assurant une résolution du système (71-d) totalement locale. Il établit également un lien entre la performance du solveur distribué proposé et la qualité de la décomposition de domaine (voir notamment le paragraphe B-3.1.4.3).

Il est notable que le choix d'un algorithme de Gradient Conjugué Préconditionné pour le calcul des forces de couplage à l'aide de Multiplicateurs de Lagrange dans une approche multi-domaines rapproche à nouveau la méthode numérique globale proposée de la méthode FETI (voir notamment [Fahrat et Roux, 1994][Fahrat et al., 2001][Boubendir et al., 2007]). Des différences et des spécificités importantes en lien avec la dynamique rapide et le traitement générique des contraintes cinématiques non-permanentes empêchent toutefois la reprise des principes les plus significatifs de la méthode pour les problématiques présentées dans ce paragraphe.

3.1.4.2 Décomposition de domaine actualisée

Principe

Les systèmes physiques soumis à des chargements à haute énergie, tels que des explosions ou des impacts, ou animés à l'instant initial d'un mouvement à grande vitesse, sont sujets à de grandes évolutions de leur topologie. En ce qui concerne les contraintes cinématiques et leur interaction avec la décomposition de domaine, deux de ces changements sont principalement rencontrés :

1. les changements majeurs dans la localisation des contacts, qui ne sont pas pris en compte par la décomposition de domaine réalisée au début de la simulation (voir l'exemple rotor/stator au paragraphe B-3.1.4.3),
2. les fragments de structure flottant dans le fluide environnant, ce qui conduit à des contraintes d'interaction fluide-structure impliquant plusieurs sous-domaines (voir l'exemple d'explosion dans une rame de métro au paragraphe B-3.1.4.3 également).

On rappelle que l'algorithme de décomposition de domaine automatique par *Recursive Orthogonal Bisection* utilisé dans EPX distribue les éléments sur les sous-domaines en fonction de leur proximité spatiale, sans recours à la connectivité du maillage. Reconstruire la décomposition de domaine en utilisant les coordonnées courantes des nœuds est alors un moyen de *relocaliser* à l'intérieur d'un sous-domaine la plupart des contraintes cinématiques non-permanentes, dont l'écriture repose également majoritairement sur des critères de proximité spatiale (voir la Figure 8).

La définition de critères robustes pour l'identification des instants de la simulation où la décomposition de domaine doit être actualisée est encore un sujet de recherche en cours (voir les perspectives au chapitre C). Pour valider les options stratégiques mises au point dans le cadre du projet, la fréquence d'actualisation est imposée. Cela conduit potentiellement à des actualisations inutiles dans les exemples proposés, sans que cela ne perturbe les conclusions sur l'efficacité de la stratégie.

Contraintes d'implémentation

Les objectifs pratiques pour l'actualisation de la décomposition de domaine sont les suivants :

1. ne pas avoir à centraliser les données complètes du modèle sur un unique processus MPI lors de l'actualisation pour éviter la saturation de la mémoire locale d'un nœud de calcul,
2. proposer un processus transparent pour l'utilisateur (différent de la procédure de sauvegarde/reprise manuelle),
3. assurer que le coût d'actualisation de la décomposition de domaine reste faible devant le coût de calcul effectif entre deux décompositions successives.

La stratégie retenue repose sur la cohabitation transitoire de deux décompositions de domaine différentes, en exploitant la structure de données FORTRAN 90 orientée objet dédiée à l'approche multi-domaines dans EPX, selon laquelle l'intégralité des données associées à une décomposition de domaine est attachée à un objet de type **DOMAINE**, dont une instance de nom **DOMAIN** sur chaque processus MPI rassemble les données locales à ce processus. La procédure est décrite sur la Figure 139.

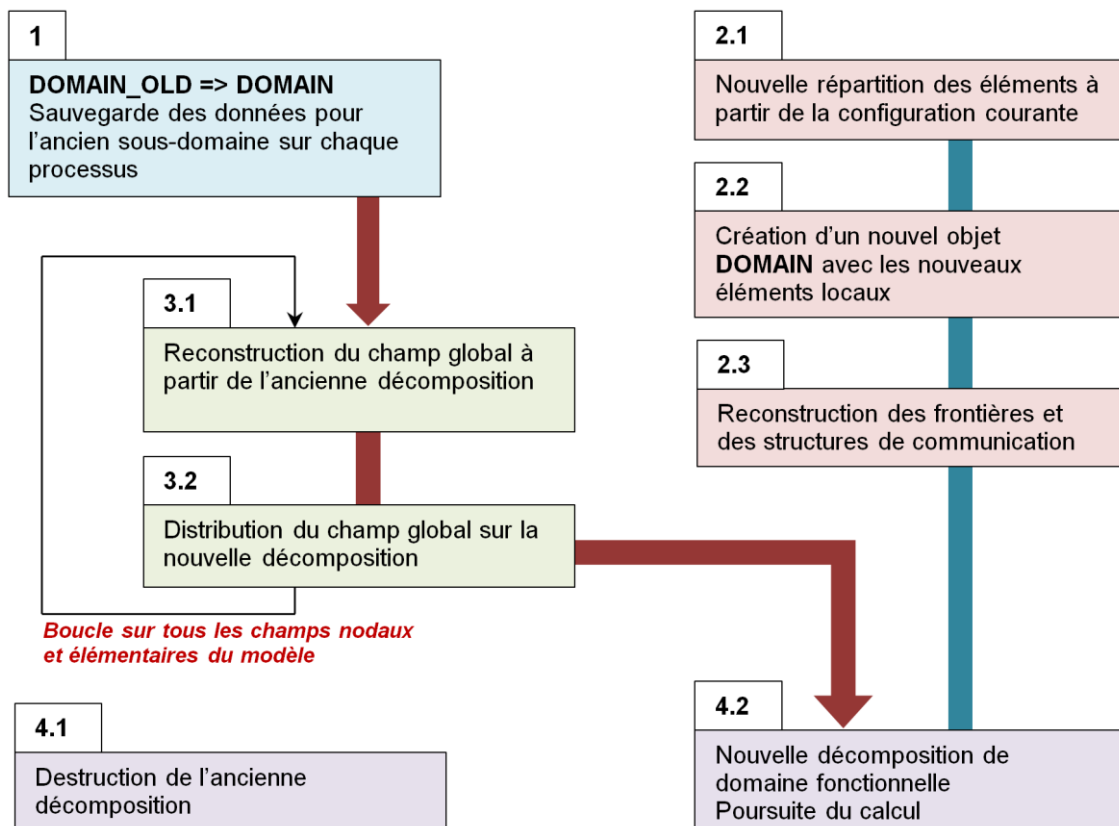


Figure 139 : Procédure d'actualisation de la décomposition de domaine

La surcharge temporaire de la mémoire est limitée, comme attendu, pendant la procédure d'actualisation à :

1. la cohabitation sur chaque processus MPI de l'ancien et du nouveau sous-domaine (avec un volume de données réduit correspondant à une fraction du modèle complet),
2. la taille d'un seul champ nodal ou élémentaire global sur le processus dédié à la reconstruction (tâche 3.1).

Le transfert des champs entre l'ancienne et la nouvelle décomposition de domaine repose sur des communications collectives de la librairie MPI (**MPI_ALLREDUCE** notamment) pour profiter de l'optimisation de l'utilisation de l'interconnexion entre les processus par rapport à des requêtes individuelles. On vérifie dans les exemples que le temps associé à l'actualisation des sous-domaines est effectivement faible devant celui nécessaire au calcul proprement dit.

3.1.4.3 Démonstration des capacités du solveur MPI optimisé

On reporte les cas de démonstration des capacités du solveur à mémoire distribué figurant dans [Faucher, 2014] sur la Table 51.

Pour les trois cas de calcul considérés, le matériel utilisé est un *cluster* local de 20 nœuds, chaque nœud étant composé de deux processeurs Intel Xeon E5630 (4 cœurs chacun, fréquence de 2.53 Ghz), partageant 48 Go de mémoire vive, soit un total de 160 cœurs et 960 Go de mémoire. Les nœuds sont interconnectés dans la configuration de test par un réseau Gigabit standard. Cette architecture réseau pénalise les performances, comparée aux réseaux d'interconnexion à haute performance disponibles notamment sur les supercalculateurs centralisés. Néanmoins, une machine locale à l'accès exclusif est indispensable pour effectuer toutes les analyses détaillées d'extensibilité souhaitées. Ce choix force également un niveau d'optimisation maximal pour l'implémentation de la stratégie parallèle proposée.

Onde de choc dans un tunnel avec obstacles

Description et motivations

Ce premier exemple sert à démontrer les capacités du solveur MPI optimisé dans un cas favorable, avec interaction fluide-structure mais sans contrainte non-permanente. Il valide définitivement la stratégie de pondération de la décomposition de domaine et la gestion des contraintes permanentes.

Le modèle consiste en un tunnel en représentation 2D-déformations planes, contenant un gaz parfait et parcouru par une onde de choc (voir la Figure 140 pour le dispositif complet). Deux configurations sont considérées, la seconde présentant des obstacles cylindriques flexibles, pour tester l'utilisation de formulations élémentaires et de matériaux hétérogènes, ainsi que de contraintes d'interaction fluide-structure permanentes avec coefficients variables (voir Figure 7).

La frontière du domaine fluide est imperméable, sauf pour la sortie dotée d'éléments absorbants. Dans le cas avec obstacles, la grille fluide ALE est automatiquement mise à jour pour suivre le mouvement des structures. Les obstacles sont encastrés sur leur axe, de telle sorte qu'ils ne sont pas soufflés par l'onde de choc.

La configuration sans obstacle compte 110 466 éléments fluides quadrangulaires, alors que celle avec obstacles compte 59 904 éléments fluides quadrangulaires et 44 386 éléments de structures triangulaires.

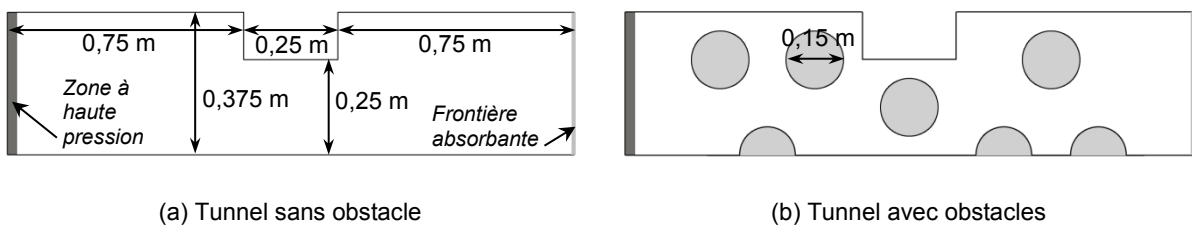
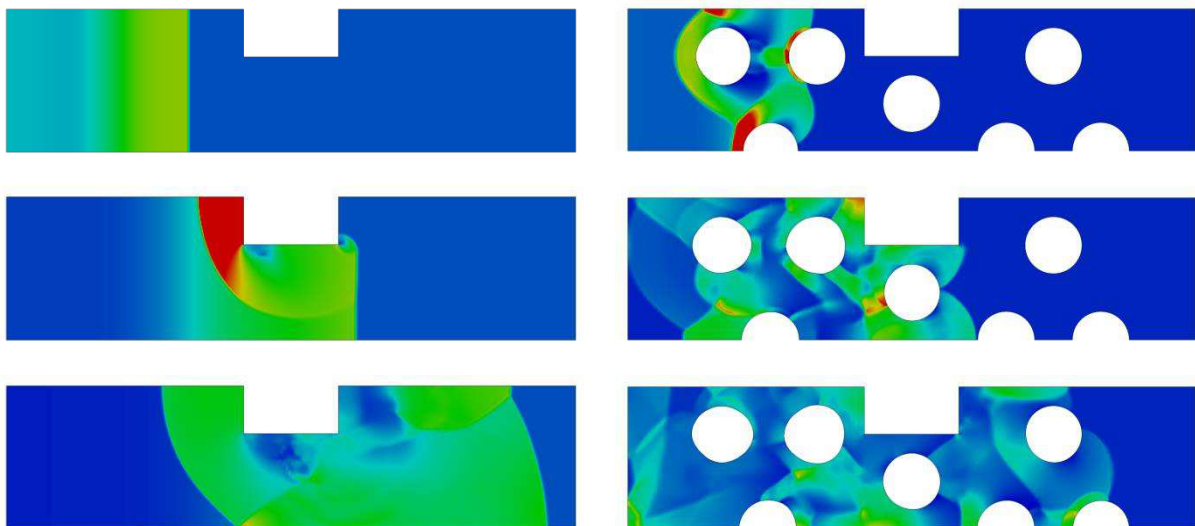


Figure 140 : Onde de choc dans un tunnel – Dispositif

Le fluide est un gaz parfait. Les conditions initiales sont ($1 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$, 1 bar, 20°C) dans le volume courant et ($100 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$, 100 bars, 20°C) dans la zone à haute pression. Les obstacles sont élastiques et volontairement très souples.

Visualisation des résultats

Le champ de pression dans les deux configurations, aux instants respectifs 0.5 ms, 1 ms, 1.5 ms et 2 ms, est donné sur la Figure 141. Dans le cas avec obstacles, le déplacement des structures est amplifié d'un facteur 5, pour mettre en évidence l'interaction fluide-structure.



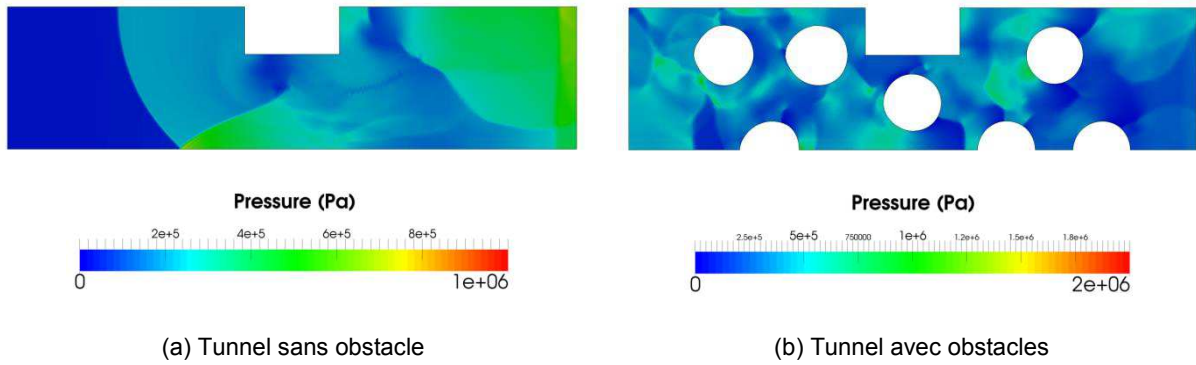


Figure 141 : Onde de choc dans un tunnel – Champ de pression pendant la simulation

Mesure d'extensibilité et commentaires

La Figure 142 montre les *speed-ups* obtenus pour les deux simulations (pour un temps final de 5 ms) de 1 à 32 processus MPI. Pour le cas avec obstacles, les résultats avec et sans pondération de la décomposition de domaine sont donnés.

En raison de la taille réduite de ces tests, l'efficacité parallèle sature logiquement pour plus de 16 processus. La pondération de la décomposition de domaine permet un gain de 13% environ dans le cas avec interaction fluide-structure.

Les résultats obtenus confirment le comportement satisfaisant du programme pour des cas de cette nature, sans contrainte cinématique non-permanente.

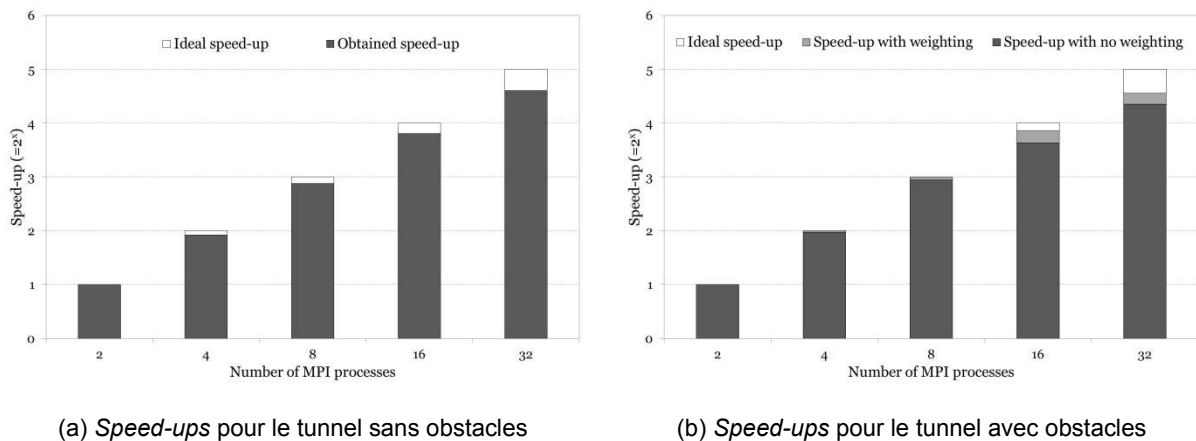
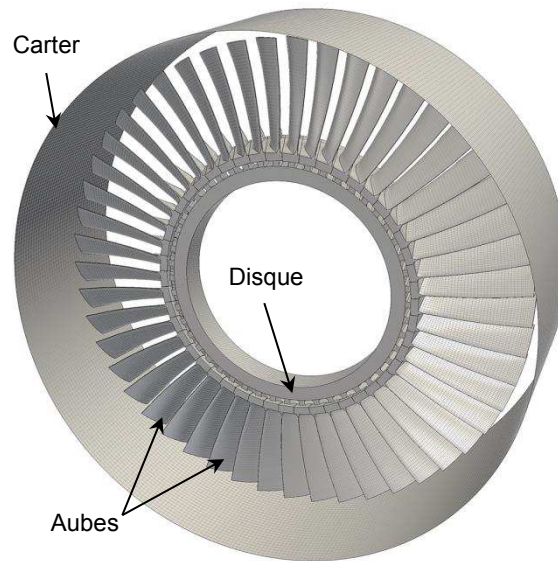


Figure 142 : Onde de choc dans un tunnel – Efficacité parallèle

Pertes d'aubes sur un rotor à l'intérieur d'un stator

Description et motivations

Le modèle est dérivé du cas proposé par ONERA au paragraphe B-3.1.3.5. La géométrie est simplifiée pour ne garder qu'un disque aubagé et un carter raccourci. Le maillage est raffiné, pour solliciter plus fortement le solveur parallèle d'EPX. Le scénario de libération des aubes est inchangé par rapport au test initial.



Diamètre du carter: 40 cm

Figure 143 : Pertes d'aubes sur un rotor – Dispositif

Le disque et le carter sont composés d'un acier élastique linéaire. Les aubes sont composées d'un acier élasto-plastique sensible à la vitesse de déformation (modèle de Johnson-Cook), avec un critère de rupture à 80% de déformation plastique.

Tous les déplacements sont bloqués le long de la frontière du carter. La surface intérieure du disque est en rotation forcée autour de son axe à la vitesse de $3.27 \times 10^3 \text{ rad.s}^{-1}$. Une rotation complète du rotor est ainsi réalisée en approximativement 2 ms.

Le modèle comprend 342 608 éléments hexaédriques pour le disque et les aubes, ainsi que 16 000 éléments de plaque quadrangulaires pour le carter. Une première simulation est effectuée pour calculer l'état stationnaire initial du rotor sous l'effet des forces centrifuges. Il n'est pas détaillé dans l'analyse de performance, car il ne présente aucune difficulté pour le solveur parallèle.

Visualisation des résultats

Les résultats de la simulation transitoire pour un temps de final de 2 ms (soit environ 270 000 cycles en temps) sont donnés sur la Figure 144 et la Figure 145. Comme attendu, les aubes lâchées impactent d'une part le carter et d'autre part les aubes suivantes sur le disque. Elles subissent de nombreuses ruptures et fragmentations dans le processus. Les vues rapprochées de la Figure 145 accèdent à la pertinence d'un solveur robuste et précis pour le contact, en raison de la complexité de la géométrie et des grandes vitesses, ce qu'assure l'approche duale proposée sans aucun paramètre additionnel. Seule la déclaration générale des entités en contact est requise. Le contact intervient dès le début de la simulation, initialement entre les pieds d'aubes.

Ce cas de calcul représente un *challenge* majeur pour la stratégie parallèle d'EPX, d'une part en raison des grands déplacements relatifs entre le rotor et le stator, et d'autre part en raison du grand nombre de contraintes cinématiques de contact apparaissant en cours de simulation.



(a) 0.25 ms



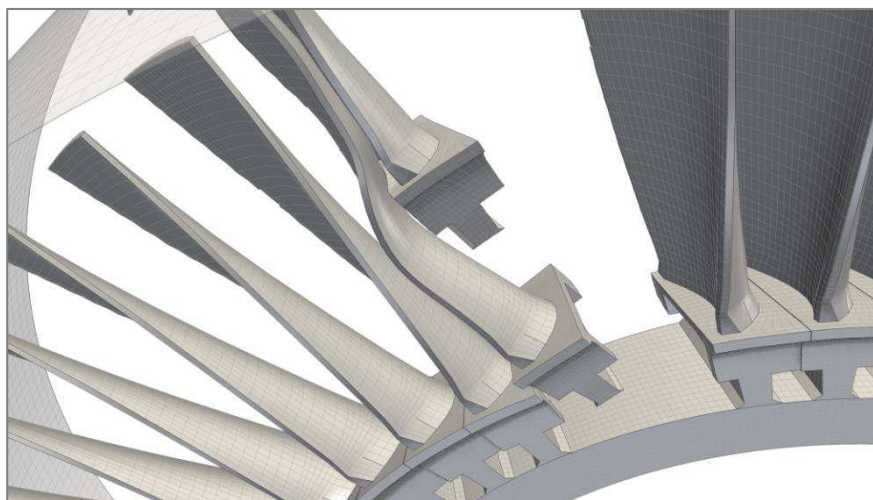
(b) 0.50 ms



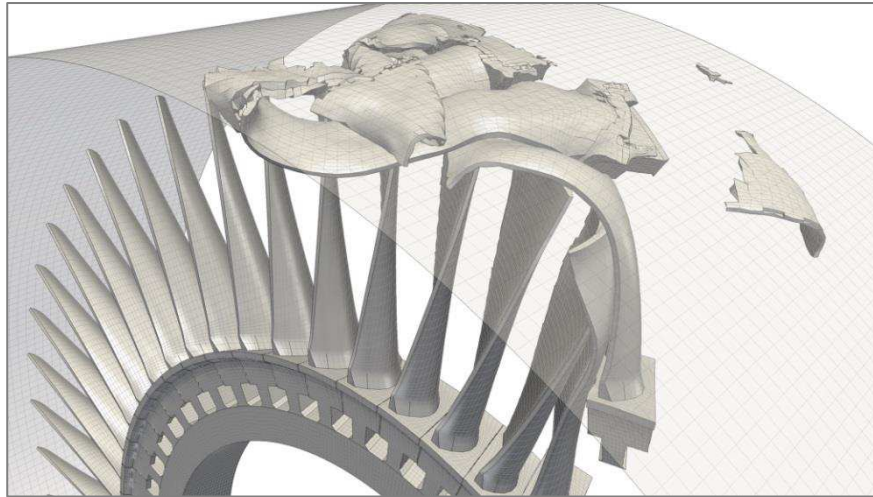
(c) 0.75 ms



Figure 144 : Rotor/Stator – Evolution du système au cours du temps



(a) Impact de la première aube lâchée sur la suivante (0.20 ms)



(b) Contact étroit entre les fragments d'aubes (1.00 ms)

Figure 145 : Rotor/stator – Haute précision pour des situations de contact complexes

Mesures d'extensibilité et commentaires

Les performances parallèles sont données sur la Figure 146-a pour des simulations de 4 à 32 processus MPI. L'ordre de grandeur du temps nécessaire pour la simulation séquentielle de référence est de 330 heures (soit approximativement deux semaines), alors que le temps requis pour la même simulation avec 32 processus est d'environ 20 heures.

Les *speed-ups* obtenus avec l'approche originale combinant une décomposition de domaine statique et une résolution centralisée pour les forces associées aux contraintes globales sont comparés à ceux issus de la stratégie alternative proposée, i. e. une décomposition de domaine actualisée et un solveur distribué pour les contraintes cinématiques globales. Pour le cas particulier de 16 processus MPI, une combinaison intermédiaire est considérée, utilisant uniquement la réactualisation de la décomposition de domaine et conservant le solveur centralisé. Le temps physique entre deux actualisations de la décomposition de domaine est de 0.05 ms.

Comme attendu, l'extensibilité sature très rapidement avec l'approche originale, le *speed-up* avec 16 processus étant plus faible que celui pour 8 processus, qui présente déjà une faible efficacité, pour une valeur pour 32 processus plus faible que pour 4. Au contraire, la nouvelle stratégie proposée produit une extensibilité satisfaisantes jusqu'à 16 processus. Pour 32 processus, le *speed-up* croît toujours avec l'approche optimisée, mais l'efficacité chute, en particulier en raison d'un mauvais équilibrage de la charge pour les tâches de détection des contacts. Avec la diminution du temps alloué aux opérations élémentaires, cette tâche de calcul devient dominante. Elle n'est pas actuellement prise en compte dans la pondération de la décomposition de domaine.

Le cas avec 16 processus MPI montre que la réactualisation de la décomposition de domaine est à l'origine de l'accélération principale de la résolution, l'utilisation du solveur distribué pour les contraintes globales assurant tout de même un gain significatif de 35% en efficacité. Ces résultats sont illustrés par la Figure 146-b, sur laquelle est portée l'évolution du temps de calcul écoulé pour 100 cycles de la simulation en fonction du temps physique simulé. L'augmentation dramatique du coût par cycle avec la décomposition de domaine statique est expliquée par la Figure 147, représentant la forme d'un sous-domaine à l'instant initial et après 1 ms, ainsi que la *bounding box* utilisée pour sélectionner les nœuds *remote* à considérer sur ce sous-domaine. La majorité des contacts impliquant ce sous-domaine après 1 ms sont globaux, générant des communications massives, pour le transfert des quantités cinématiques associées aux candidates *remote* et pour le calcul centralisé des forces de couplage. Logiquement, une légère amélioration de cette situation est observée quand le disque a fait un tour complet. Les performances avec la décomposition de domaine statique restent tout de même mauvaises en raison de l'état de dégradation avancé du rotor.

Au contraire, la décomposition de domaine actualisée conduit au contrôle attendu sur le coût par cycle pendant la simulation entière. Les sauts dans les courbes de la Figure 146-b correspondent aux instants d'actualisation des sous-domaines. A chaque fois, la quantité de données à transférer pour le contact entre les entités *remote* et locales s'en trouve réduite, expliquant la légère diminution du coût par cycle. Le choix de la fréquence d'actualisation est arbitraire dans le cas présent. Elle devrait être déterminée automatiquement comme un optimum entre le coût effectif d'une mise à jour et le gain de performance qu'elle entraîne (voir le chapitre C-2). A titre d'exemple, le nombre moyen de cycles en temps effectués entre deux actualisations est ici de 5 000, soit un temps écoulé de l'ordre de 1 000 secondes. En comparant ce temps aux 15 secondes demandées par la procédure d'actualisation de la décomposition de domaine pour ce modèle, cela suggère qu'une fréquence d'actualisation plus importante pourrait être pertinente, réduisant les sauts dans les courbes. Cela ne modifie en rien les conclusions de la présente démonstration.

Pour conclure, il convient de remarquer que l'utilisation du solveur distribué pour les contraintes cinématiques globales est de plus en plus bénéfique à mesure que la simulation progresse, remplissant complètement l'objectif du contrôle robuste du coût par cycle, même lorsque la structure atteint un niveau de ruine avancé

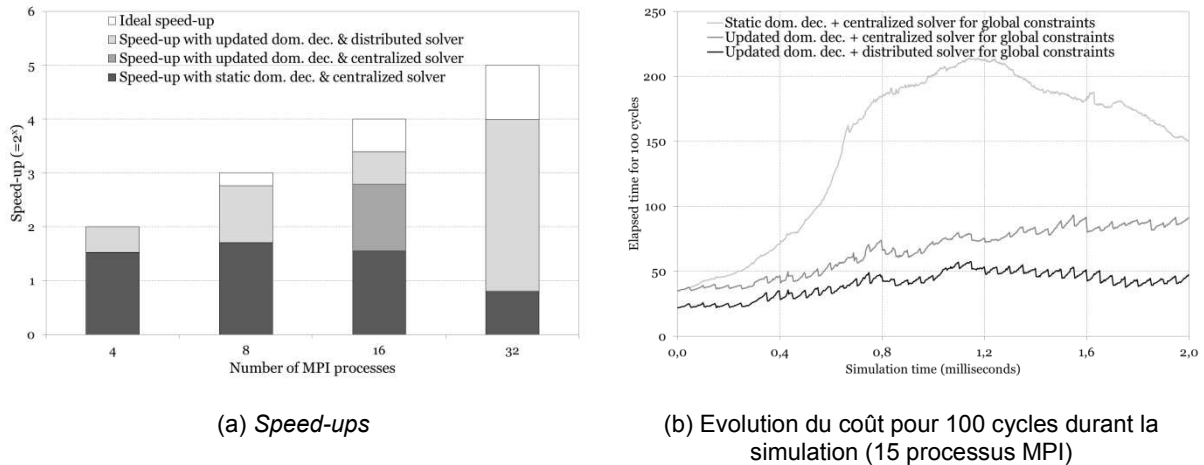


Figure 146 : Rotor/stator – Performances parallèles

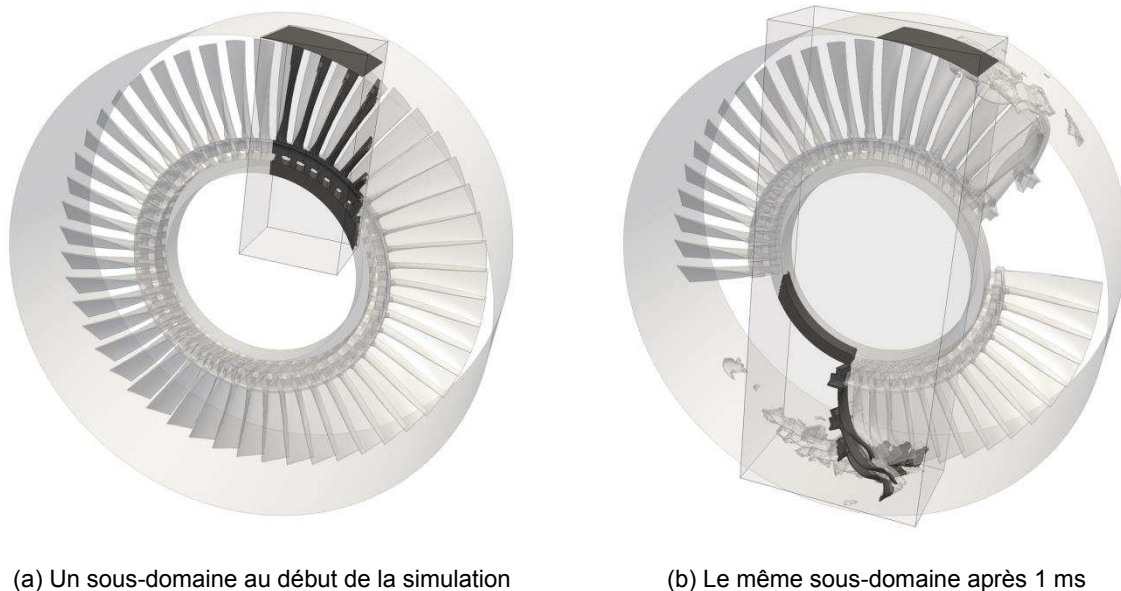


Figure 147 : Rotor/Stator – Evolution d'un sous-domaine donné avec une décomposition de domaine statique

Simulation fortement couplée en interaction fluide-structure : explosion dans une rame de métro

Description et motivations

Parmi les nombreuses applications industrielles des méthodes proposées via l'utilisation d'EPX, on s'intéresse ici au cas d'infrastructures publiques soumises à un chargement explosif, représentatif des activités de la Commission Européenne avec le programme. Des simulations mettant en jeu la méthodologie proposée dans le domaine des transitoires accidentels pour les réacteurs nucléaires figurent au paragraphe B-3.2.2.

Le modèle est composé d'une unique voiture d'une rame de métro, entourée de structures massives représentant une gare simplifiée (le quai, le plafond, un pilier et un mur de séparation partiellement ajouré). Le dessin de la gare est arbitraire, alors que le modèle de la voiture vient d'études antérieures menées par la Commission Européenne. Comme pour les simulations de rotors ou les tests fournis par EDF, des questions de confidentialité imposent des changements dans les caractéristiques mécaniques de la voiture. Les résultats quantitatifs des simulations ne sont pas donnés pour les mêmes raisons.

La sollicitation correspond à une charge de TNT, représentée par une bulle de gaz comprimé équivalente, positionnée au centre de la voiture. A nouveau, pour des questions de confidentialité, l'état exact de la bulle n'est pas donné.

La charpente métallique de la voiture est composée d'un matériau multi-couches élasto-plastique (3 couches). Les fenêtres sont aussi modélisées avec un matériau multi-couches (3 couches également). Les deux couches externes sont constituées d'un matériau spécifique reproduisant le comportement fragile du verre laminé. La couche interne est constituée d'un matériau élasto-plastique très souple, capable de supporter de hauts niveaux de déformation et empêchant les fenêtres de se fragmenter totalement sous l'effet du souffle de l'explosion.

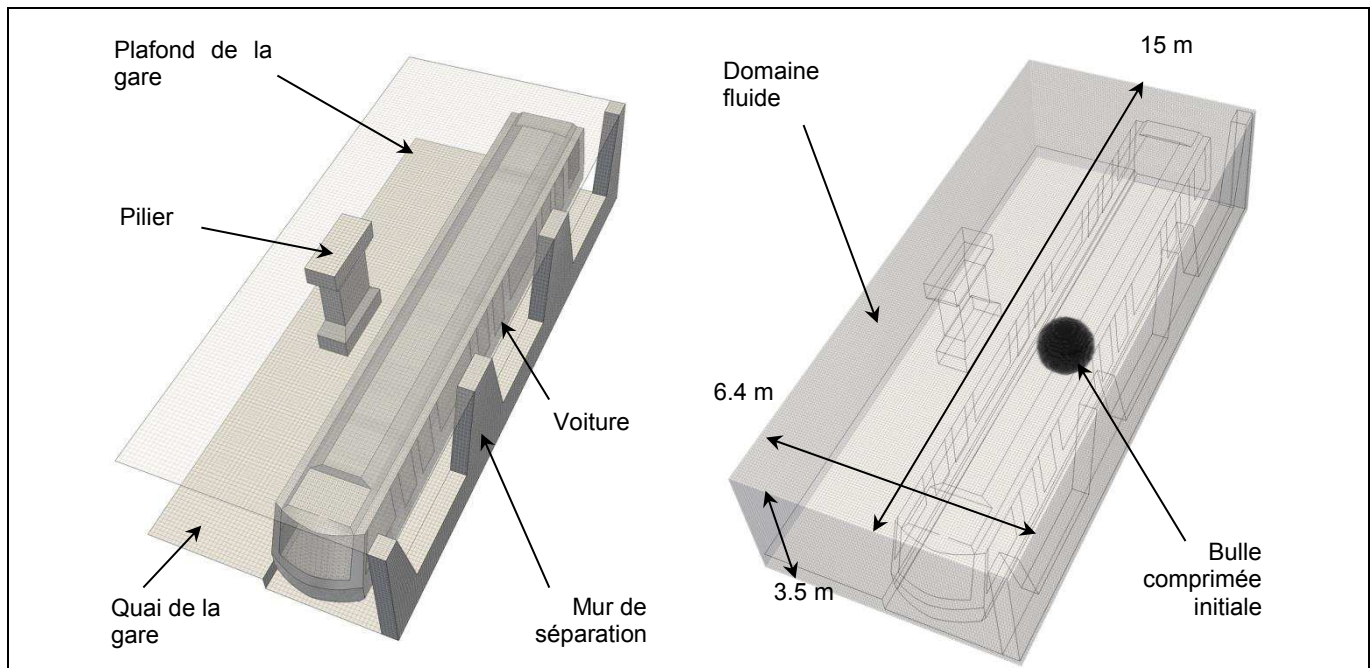


Figure 148 : Explosion dans une rame de métro – Dispositif

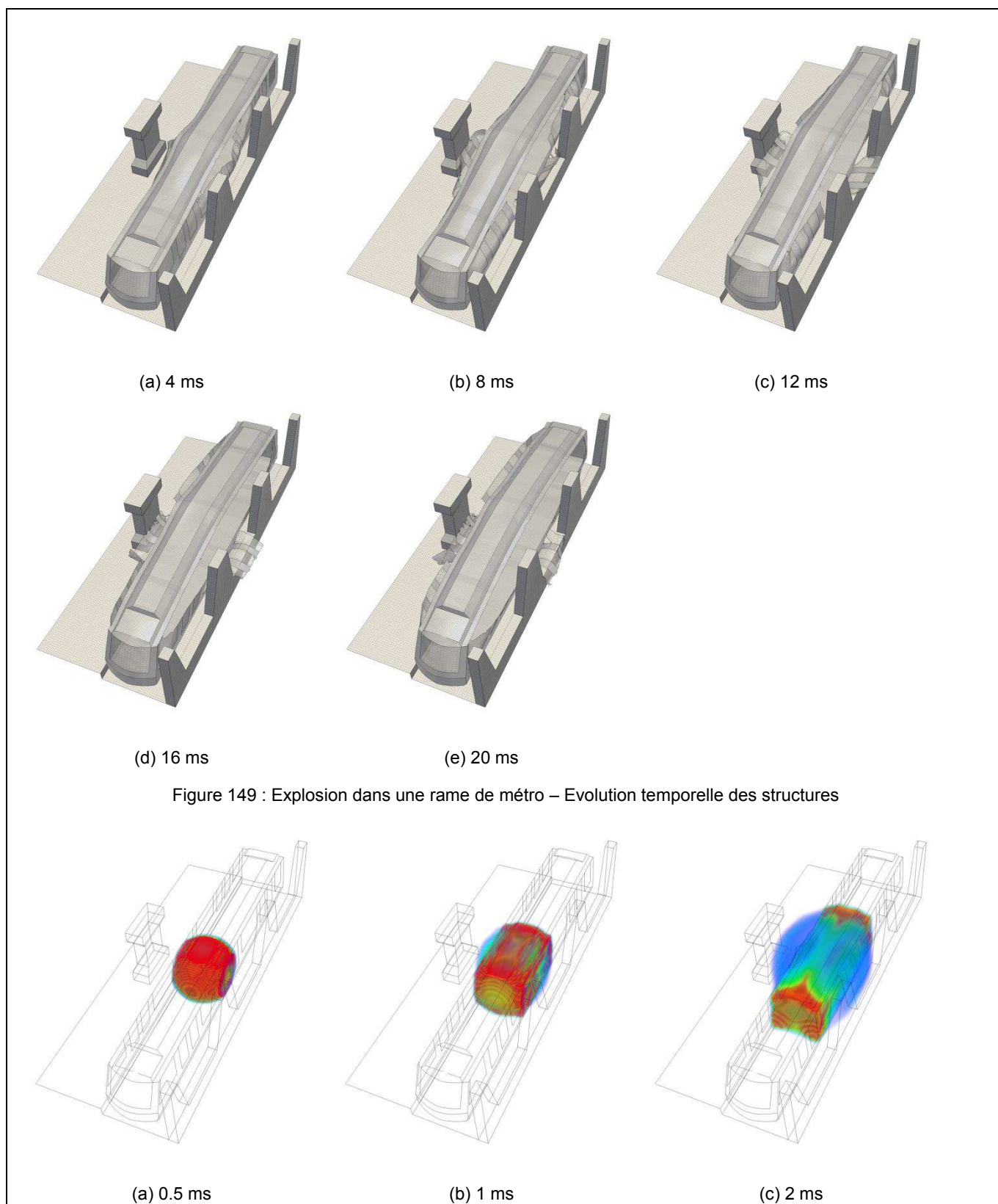
Le modèle comprend 1 185 252 éléments hexaédriques pour le fluide (pour une taille de maille de l'ordre de 6.5 cm), 119 160 éléments de plaque triangulaires pour la voiture (charpente et fenêtres) et 19 730 éléments hexaédriques pour le pilier et le mur de séparation. Le plafond et le quai sont représentés avec 18 648 éléments de plaque quadrangulaires : ces éléments sont ignorés pour les opérations élémentaires, car ces structures sont considérées comme rigides dans ce calcul, mais ils sont pris en compte dans le contact entre la voiture et la gare, ainsi que pour l'interaction fluide-structure.

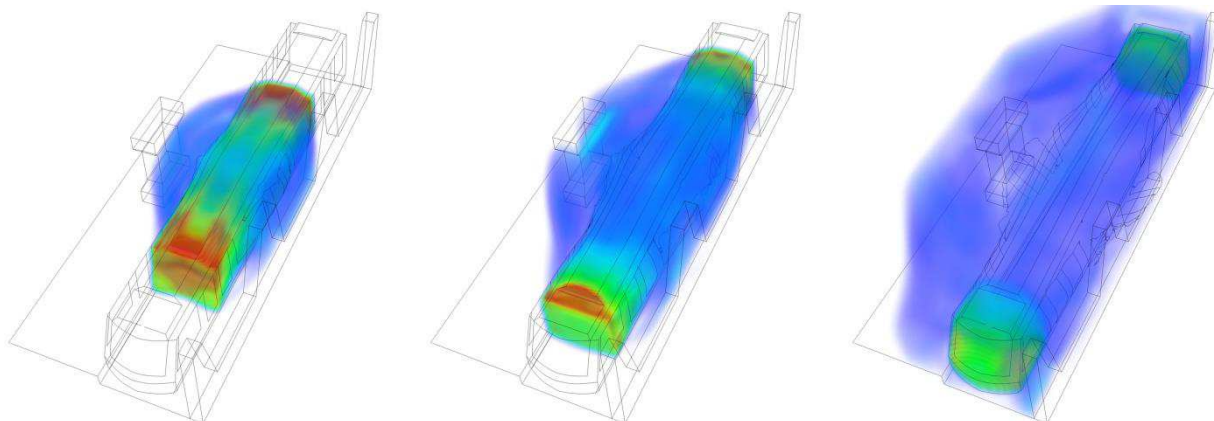
Visualisation des résultats

La Figure 149 présente tout d'abord la déformée des structures au cours de la simulation (pour un temps final de 20 ms). Le plafond rigide de la gare est masqué pour une meilleure visibilité de la voiture. En raison de la surpression, cette dernière se rompt au niveau de la jonction entre ses parois latérales et son toit. Les fenêtres sont partiellement séparées de la charpente métallique au voisinage de la bulle de gaz d'explosif initiale. Quand le temps avance, des éléments de structure viennent en contact avec le pilier d'un côté de la voiture et avec le mur de séparation de l'autre côté. Dans ce dernier cas, les fragments s'enroulent autour du rebord du mur, ce qui est rendu possible par la rupture complète des couches de verres des fenêtres, laissant seulement la couche élasto-plastique interne maintenir les morceaux ensemble, sans aucune résistance à la flexion.

La Figure 150 montre la propagation de la surpression dans le système fluide-structure, utilisant un rendu volumétrique de la pression dans le domaine fluide. L'onde de pression est au départ majoritairement guidée par la charpente de la voiture avant sa rupture. Ensuite, elle se propage dans le volume entier, se réfléchissant en particulier sur le pilier après 5 ms.

Les vues rapprochées de la Figure 151 illustrent d'une part l'interaction entre le fluide et la structure sujette à la rupture (à l'aide d'une vue en section du domaine fluide) et d'autre part le contact intervenant entre les portes de la voiture expulsées par l'explosion et le mur de séparation. Comme pour le cas de rotor/stator précédent, on obtient une haute précision dans la gestion des contraintes cinématiques (aussi bien pour l'interaction fluide-structure que pour le contact) sans aucun paramètre non-physique et une mise en données très compacte dans EPX.



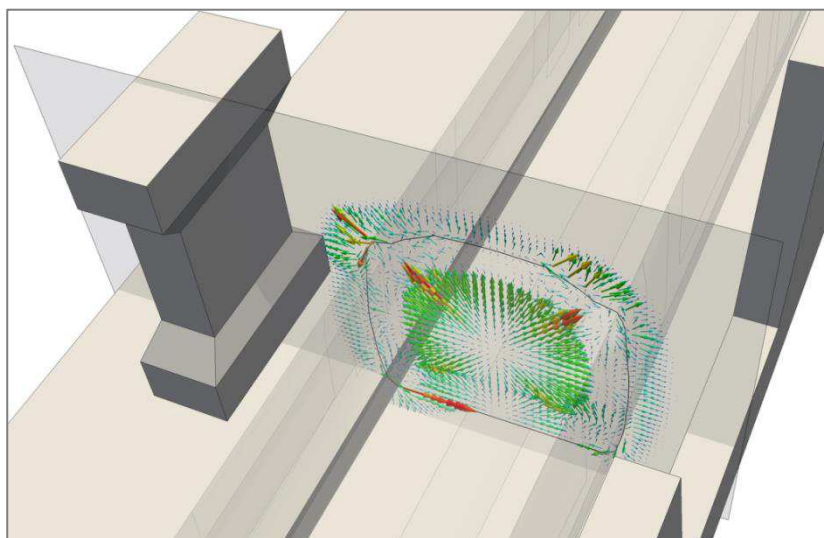


(d) 3 ms

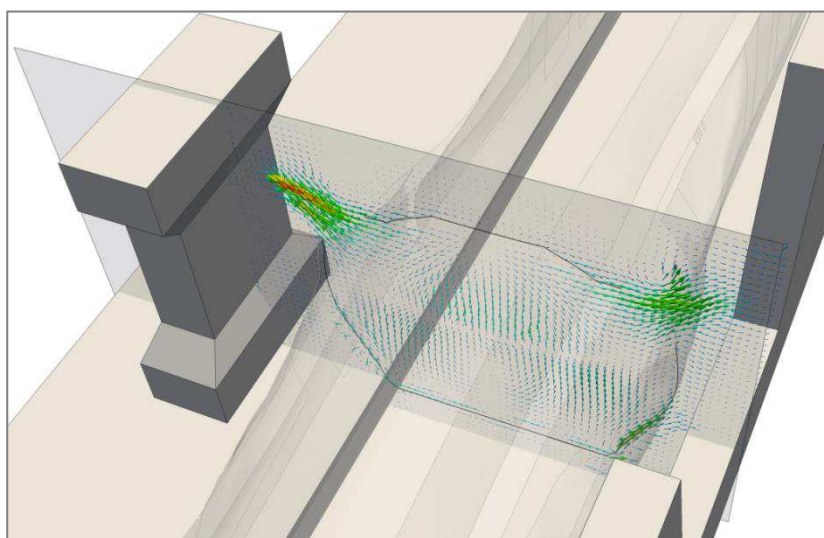
(e) 5 ms

(f) 10 ms

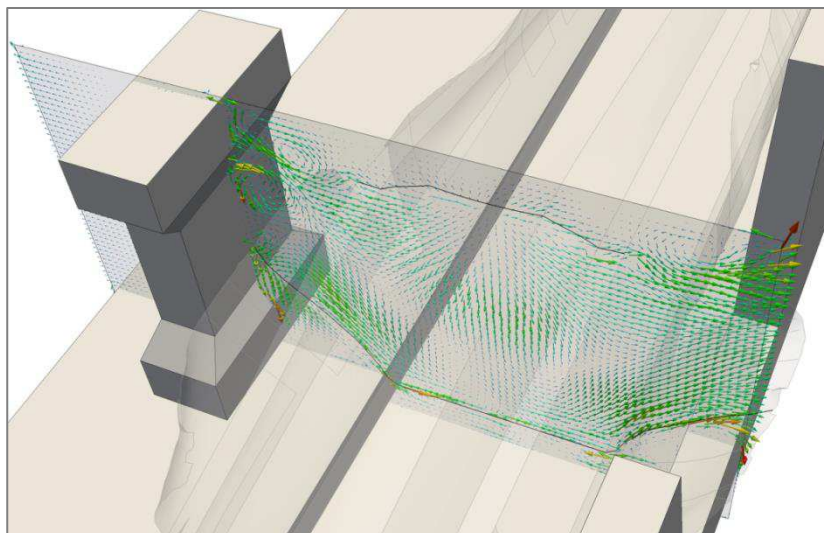
Figure 150 : Explosion dans une rame de métro – Evolution temporelle de la pression dans le fluide



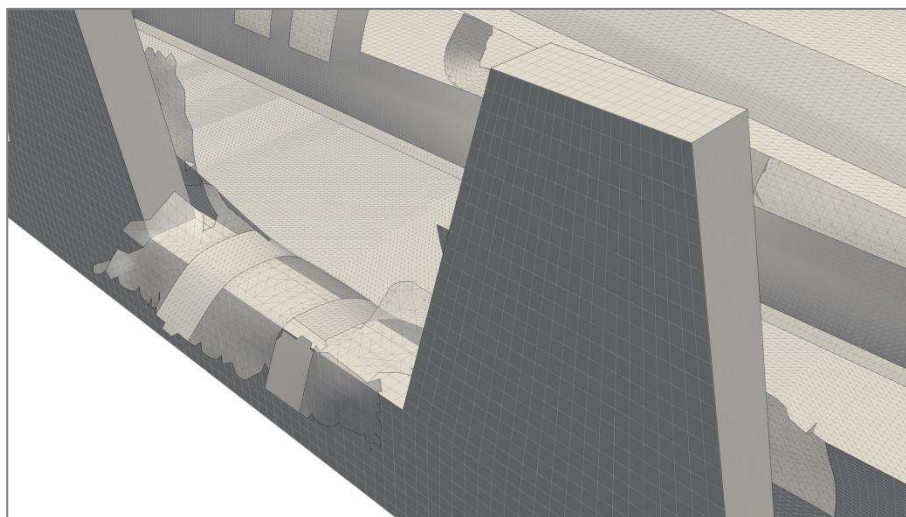
(a) 1 ms : la vitesse fluide est pleinement contrainte par la structure de la voiture



(b) 4 ms : le fluide s'écoule par les ouvertures après la rupture de la structure



(c) 10 ms : l'écoulement rencontre les obstacles environnants



(d) 20 ms : contact entre les portes de la voiture rompues et le mur de séparation

Figure 151 : Explosion dans une rame de métro – Section du champ de vitesse fluide soulignant l'interaction fluide-structure et vue rapprochée du contact entre les portes de la voiture et le mur de séparation

Mesures d'extensibilité et commentaires

Les performances parallèles de 4 à 96 processus MPI sont données sur la Figure 152. La simulation séquentielle de référence requiert environ 100 heures (soit approximativement 4 jours et demi). La même simulation avec 96 processus et la cadre parallèle proposé demande 4 heures environ.

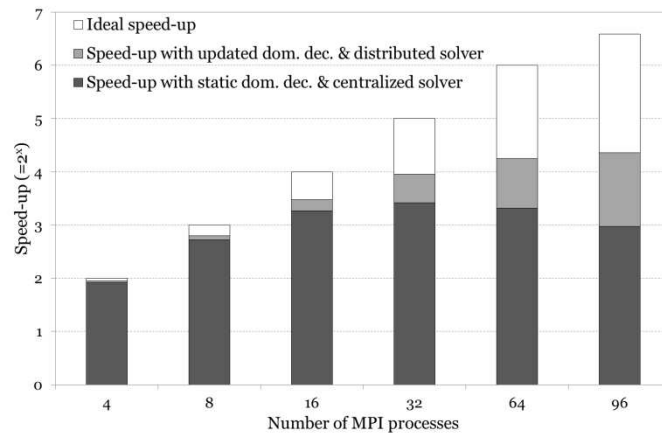


Figure 152 : Explosion dans une rame de métro – Performances parallèles

Comparé au test de rotor/stator du paragraphe précédent, ce cas est légèrement moins agressif pour l'approche centralisée de calcul des forces de couplage inter-domaines, dans la mesure où les structures bougent plus lentement et où la structure de l'opérateur de condensation peut être gardée constante pendant plusieurs cycles en temps successifs. Pour les mêmes raisons, le gain associé à l'actualisation de la décomposition de domaine est moindre et ainsi, on ne le sépare plus de celui issu du solveur distribué pour les contraintes cinématiques globales. Dans les simulations réalisées utilisant la nouvelle stratégie parallèle proposée, la décomposition de domaine est mise à jour toutes les 2 ms.

L'approche originale (i. e. décomposition de domaine statique et solveur centralisé) se comporte bien de 4 à 16 processus MPI, puisque pour 16 processus, le gain en *speed-up* avec la nouvelle approche n'est que de 15%, pour une efficacité respective de 60% et 70%.

Pour des nombres supérieurs de processus, deux phénomènes se manifestent simultanément. Tout d'abord, l'approche centralisée atteint sa limite et l'écart entre l'approche originale et la nouvelle croît jusqu'à 45% pour 32 processus et continue d'augmenter ensuite. Ensuite, le réseau Gigabit se met à saturer fortement, pénalisant le solveur distribué, qui échange des calculs centralisés contre des mises à jour des quantités attachées aux entités *remote* durant les itérations internes de l'algorithme de Gradient Conjugué Préconditionné. Un réseau à haute-performance est alors requis pour soutenir l'efficacité parallèle dans cette situation. Quoi qu'il en soit, l'approche proposée parvient à offrir une extensibilité croissante jusqu'à 96 processus MPI, en sollicitant le *cluster* de développement utilisé à sa limite.

Table 51 : Cas de démonstration des capacités du solveur à mémoire distribuée optimisé

3.1.5 Bibliographie et publications spécifiques (surlignées)

[Boubendir et al., 2007]

Y. Boubendir, A. Bendali, M'B. Farès, A FETI-like domain decomposition method for coupling finite elements and boundary elements in large-size problems of acoustic scattering, *Comput. Struct.*, vol. 85(9): 526-535, 2007.

[Casadei et Halleux, 2009]

F. Casadei, J.P. Halleux, Binary spatial partitioning of the central-difference time integration scheme for explicit fast transient dynamics, *Int. J. for Num. Meth. In Engrg.*, vol. 78(12): 1436-1473, 2009.

[Ciarlet, 1990]

P. G. Ciarlet, *Introduction à l'analyse numérique matricielle et à l'optimisation*, Ed. Masson, France, 1990.

[Fahrat et al., 2001]

C. Fahrat, M. Lesoinne, P. Le Tallec, K. Pierson, D. Rixen, FETI-DP: a dual-primal unified FETI method-part I: A faster alternative to the two-level FETI method, *Int. J. for Num. Meth. in Engrg.*, vol. 50:1523-1544, 2001.

[Faucher et al., 2009]

V. Faucher, S. Potapov, S. Moulin, R. Ortiz, A. Combrescure, B. Raffin, REPDYN – Document de soumission B, ANR – Programme COSINUS 2009, disponible sur <http://www.repdyn.fr>, 2009.

[Faucher, 2011]

V. Faucher, *Compte-rendu intermédiaire à T0+18 du projet REPDYN ANR COSI-09-011*, disponible sur <http://www.repdyn.fr>, 2011.

[Faucher, 2014]

V. Faucher, Advanced parallel strategy for strongly coupled fast transient fluid-structure dynamics with dual management of kinematic constraints, *Advances in Engineering Software*, vol. 67: 70-89, 2014.

[Reumann et al., 2011]

M. Reumann, B.G. Fitch, A. Rayshubskiy, M.C. Pitman, J.J. Rice, Orthogonal recursive bisection as data decomposition strategy for massively parallel cardiac simulations, *Biomed Tech (Berl)*, vol. 56(3): 129-145, 2011.

[Snir et al., 1996]

M. Snir, S. Otto, S. Huss-Lederman, D. Walker, J. Dongarra, *MPI: The Complete Reference*, MIT Press, 1996.

3.2 PARALLELISME HYBRIDE DYNAMIQUE ET COLLABORATIF

3.2.1 Parallélisme à mémoire partagée avec ordonnancement dynamique pour les transitoires rapides en interaction fluide-structure

Contrairement à l'approche à mémoire distribuée, le parallélisme à mémoire partagée (*SMP*) engendre des modifications relativement localisées dans le programme. La répartition du travail sur les ressources disponibles est faite au niveau des différentes tâches de calcul, toutes accédant à l'intégralité de la mémoire (ou à l'intégralité des données d'un sous-domaine dans le cas d'une association des deux sources de parallélisme).

L'implémentation faisant référence en *SMP* est le standard OpenMP (<http://openmp.org/wp>), qui se présente sous la forme de directives (*pragma*) à insérer dans le code séquentiel de référence pour commander des opérations parallèles, par exemple pour distribuer les itérations d'une boucle *FOR* sur les processus simultanés attribués au programme, ou *threads*.

Dans le cadre de la stratégie parallèle proposée dans le présent mémoire, l'approche *SMP* présente les avantages/limitations donnés par la Table 52, en complément de l'approche à mémoire distribuée présentée auparavant.

| Avantages | |
|---|---|
| Utilisation des cœurs à l'intérieur d'un nœud de calcul sans rencontrer les difficultés algorithmiques liées à la décomposition de domaine. | Utilisation économe de la mémoire centrale des machines, alors que la décomposition de domaine a tendance à demander un surcroît de mémoire due à la redondance partielle des données entre les processus MPI. |
| Limitations | |
| Un programme accéléré par cette méthode progresse par une succession de sections séquentielles et de sections parallèles, en fonction du degré de parallélisation du code. La loi d'Amdahl [Amdahl, 1967] exprime que l'extensibilité potentielle est directement limitée par ce degré, ce qui suggère un effort de programmation conséquent pour traiter l'ensemble des tâches significatives d'une application. | L'accélération repose sur une distribution des tâches de calcul sur les ressources disponibles. Dans certains cas, le temps nécessaire pour parcourir certaines sections de programme ne dépend pas des opérations arithmétiques à réaliser, mais du temps que met l'application à obtenir les données nécessaires à ces opérations. On parle alors de tâches <i>memory bound</i> et leur accélération par des méthodes <i>SMP</i> n'est pas garantie, d'autant plus qu'un nombre important de <i>threads</i> accédant à des zones mémoires communes ou voisines peut dégrader la performance des accès. Sur ce point, l'approche à mémoire distribuée, répartissant les données sur des nœuds différents, assure dans la majorité des cas la préservation des temps d'accès à la mémoire. |
| Si des tâches de calcul sont interdépendantes, leur répartition sur les <i>threads</i> peut devenir complexe et requérir la réécriture de certains algorithmes pour assurer la performance parallèle et l'ordre d'exécution correct des tâches. | L'équilibrage de la charge est délicat à obtenir avec une attribution <i>a priori</i> des tâches de calcul aux <i>threads</i> , ne prenant pas en compte leur coût effectif (qui peut de plus varier au cours du temps dans le cas de simulations fortement non-linéaires). |

Table 52 : Avantages et limitations d'une approche *SMP* classique

Utilisée en remplacement d'OpenMP, KAAPI est une librairie développée par l'équipe MOAIS de l'INRIA [Gautier et al., 2007] qui permet de s'affranchir d'une partie des limitations citées ci-dessus. Elle gère les dépendances entre tâches de calcul via un modèle de programmation DFG (*Data Flow Graph*) et permet d'assurer l'équilibrage dynamique de la charge entre les *threads* en autorisant le vol de travail. Ainsi, un *thread* inactif est autorisé à prendre du travail à un *thread* actif via des techniques avancées générant un surcoût minimal (négligeable en pratique).

Des développements récents de la librairie permettent une création adaptative des tâches sur les *threads*, pour limiter la contention sur les accès à la mémoire que provoquent classiquement les stratégies d'ordonnancement dynamique (voir [Gautier et al., 2007]). L'intégration de KAAPI dans EPX a été l'occasion d'étendre la collaboration entre le CEA et l'INRIA au-delà du cadre initial du projet RePDyn, pour aboutir notamment au lancement de la thèse de M. Sridi en février 2013 (bourse CEA, direction INRIA).

A titre d'illustration, la Figure 153 montre l'application de KAAPI avec EPX pour le crash du missile de l'essai Meppen contre un plan rigide (cf. paragraphe 3.1.3.4). 8 *threads* sont mobilisées et on isole les trois tâches les plus consommatrices en temps de calcul, à savoir les opérations élémentaires (avec un matériau élasto-plastique

de type Johnson-Cook), la recherche des candidats au contact et l'écriture des contraintes cinématiques correspondantes, soit environ 83% du temps total.

Les graphes proposés donnent le temps passé pour 1 000 cycles de la simulation par chaque *thread* pour chacune des tâches considérées, ainsi que le nombre d'itération pour chaque boucle effectivement effectuée par chaque *thread*. On observe comme attendu que le vol de travail assure l'équilibrage parfait de la charge entre les *threads*, alors que la répartition des itérations n'est pas uniforme due au coût hétérogène des opérations élémentaires et des opérations géométriques pour la gestion du contact.

Le *speed-up* obtenu sur ce cas est de 6 pour 8 *threads*, ce qui est conforme à la loi d'Amdahl d'une part et d'autre part au caractère *memory bound* de la boucle élémentaire d'EPX.

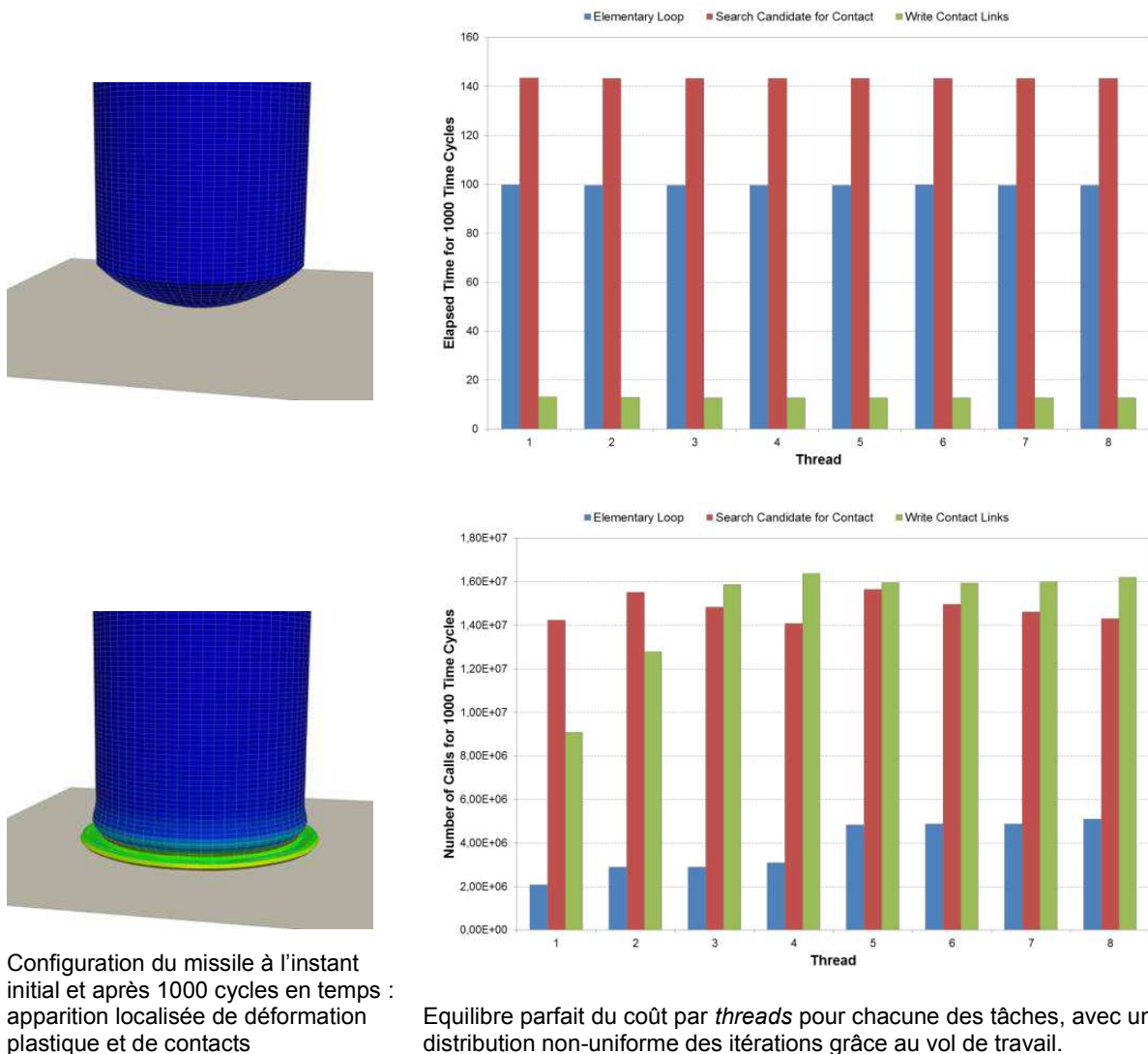


Figure 153 : Validation de l'implémentation de la librairie KAAPI dans EPX sur le cas du crash du missile Meppen

Les caractéristiques originales de l'implémentation de KAAPI dans un code de dynamique rapide de dimension industrielle font l'objet de la publication [Gautier et al., 2013]. Elles servent également de support à la thèse de M. Sridi, consacrée à la maîtrise *a posteriori* des paramètres influant sur la performance de la résolution parallèle, couramment nommée auto-paramétrage (*auto-tuning*). La réorganisation de la boucle sur les éléments pour maîtriser le placement des données dans le cache des processeurs, faisant l'objet des principaux travaux de première année [Sridi et al., 2014], introduit par exemple un tel paramètre. Le processus se présente sous la forme d'un groupage des entités, avec un nombre d'éléments par groupe à choisir automatiquement par le programme pour s'adapter de manière dynamique à l'architecture sur laquelle il est exécuté.

3.2.2 Formalisme hybride à grande échelle sur le supercalculateur TGCC/Curie

Conformément au paragraphe B-3.1.1, combiner les deux sources de parallélisme évoquées dans les paragraphes précédents revient à implémenter le traitement multi-*thread* avec KAAPI pour les tâches effectuées

à l'intérieur d'un sous-domaine. Cette approche est cohérente avec l'architecture classique de nombreux supercalculateurs actuels, se présentant comme une généralisation à grande échelle de la machine de calcul locale citée au paragraphe B-3.1.4.3, à savoir un *cluster* de nœuds multi-processeurs à mémoire partagée. Une exploitation pertinente d'une telle configuration est d'exécuter un processus MPI par nœud, et d'utiliser les cœurs locaux en *SMP*.

Avant sa mise en œuvre sur une telle machine, l'approche hybride à mémoire distribuée et partagée dans EPX est appliquée au cas de rotor/stator du paragraphe B-3.1.4.3 sur le *cluster* local utilisé précédemment [Faucher, 2014].

Les résultats en termes de performances sont donnés par la Figure 154. Différentes configurations parallèles sont considérées, de 4 à 16 cœurs mobilisés, et on s'intéresse au temps passé dans les tâches de calcul principales pour 5 000 cycles en temps.

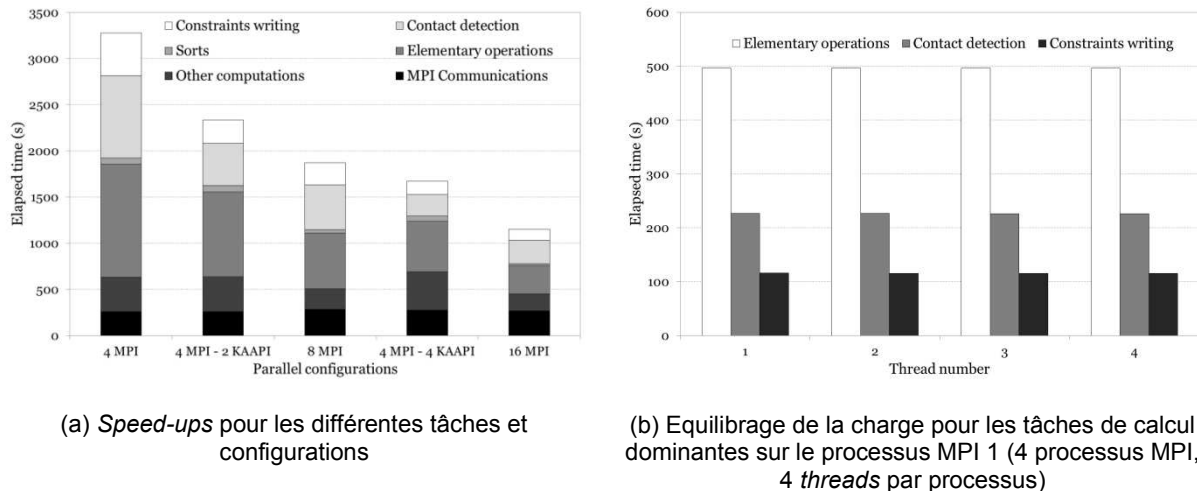


Figure 154 : Performances de l'approche hybride MPI/KAAPI pour le cas de rotor/stator (5 000 cycles en temps)

Ces résultats sont encore largement expérimentaux. On voit que certaines tâches sont plus extensibles que d'autres avec KAAPI, ce test de nature fortement industrielle mettant plus en évidence le caractère *memory bound* de certaines boucles que celui du paragraphe précédent.

La mise en œuvre à des fins de test de la stratégie complète proposée sur le supercalculateur TGCC/Curie répond ensuite directement à une recommandation formulée lors de la revue du projet RePDyn à mi-parcours. Elle prend la forme d'un *Preparatory Access* obtenu auprès de l'agence européenne PRACE (<http://www.prace-ri.eu>), partageant l'accès au calculateur avec la société civile française GENCI (<http://www.genci.fr>). Cet accès correspond à 200 000 heures de calcul entre février et juillet 2012, sur les *fat nodes* de la machine (32 cœurs, 128 Go de RAM).

La proposition retenue par PRACE porte sur la simulation de modèles complexes fortement couplés. La mise en œuvre du passage à l'échelle sur une application modèle non-représentative de l'utilisation industrielle d'EPX est exclue. Parmi les deux cas de simulation principalement étudiés durant le temps d'accès alloué, on se focalise sur la Table 54 sur celui ayant produit les résultats les plus stables, à savoir la simulation de l'interaction d'une onde de choc guidée avec un container métallique. Il est notable que la prise en main de l'environnement de simulation sur des calculateurs de grande taille demande l'acquisition d'une expérience spécifique et de nombreux ajustements, ce qui a nuit à l'aboutissement des actions d'analyse et d'optimisation dans le temps fortement contraint du projet PRACE.

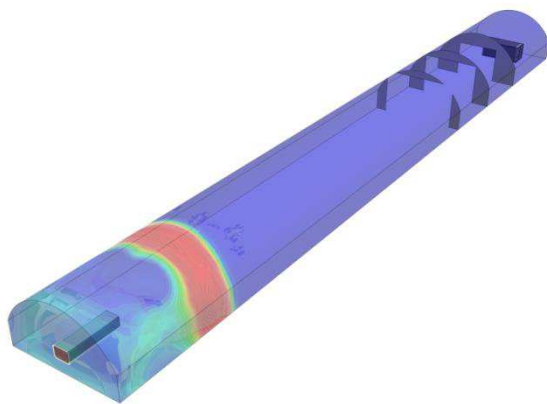
Simulation de l'interaction d'une onde de choc guidée avec un container métallique*Contexte et description du test*

Il s'agit de la simulation d'un essai réalisé à l'Université de Trondheim (Norvège), le jeu de données de base étant fourni par le *Joint Research Center* de la Commission Européenne. Le test correspond à une onde de choc générée à une extrémité fermée d'un tunnel rigide d'une longueur de 100 m environ. A proximité de l'autre extrémité du tunnel, ouverte, est placé un container métallique. Dans la seconde moitié du tunnel figurent trois déflecteurs destinés à focaliser l'onde sur le container. La description détaillée du dispositif, les résultats quantitatifs et les comparaisons à l'expérience, hors de propos du présent document, sont donnés dans [Casadei et al., 2011].

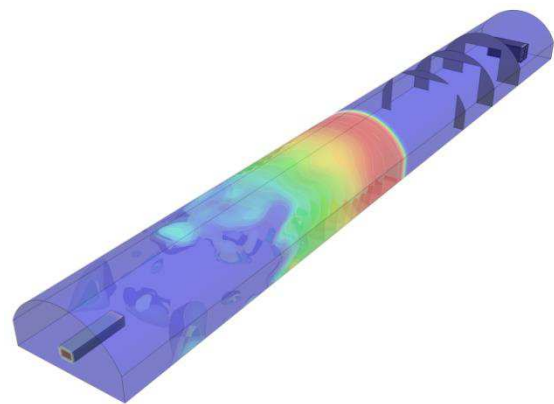
Le maillage compte environ 2 000 000 d'éléments pour le fluide et 100 000 pour le container. L'interaction entre les deux est de type *structures immergées*. Dans le temps alloué par le projet, il est choisi de privilégier l'analyse de l'extensibilité des algorithmes complexes d'EPX et de remettre la gestion des modèles de grande taille et des difficultés spécifiques associées (plusieurs dizaines de millions d'éléments) à des travaux ultérieurs.

Visualisation des résultats

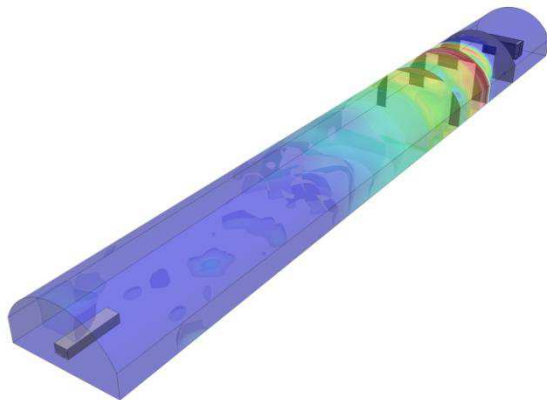
On s'intéresse tout d'abord à la propagation de l'onde de choc.



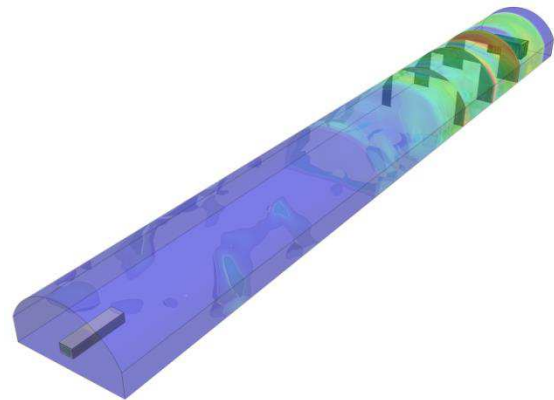
(a) 20 ms : génération de l'onde de choc



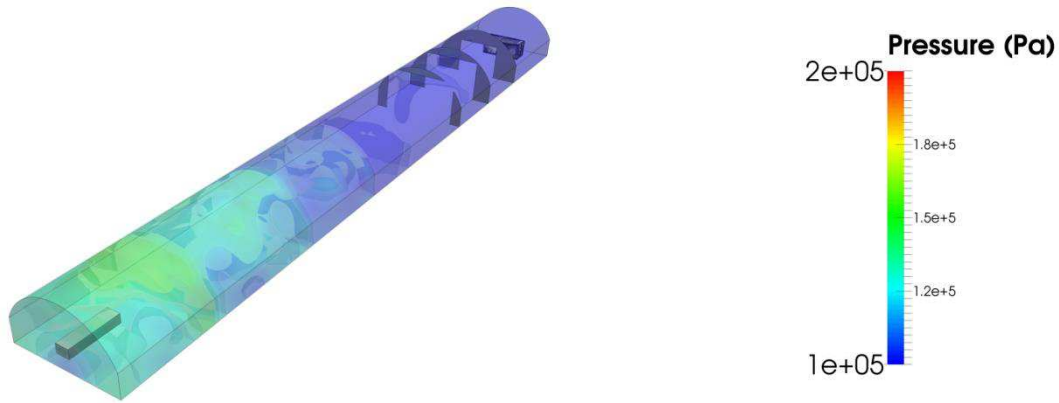
(b) 80 ms : propagation de l'onde de choc dans le tunnel



(c) 140 ms : passage de l'onde de choc à travers les déflecteurs



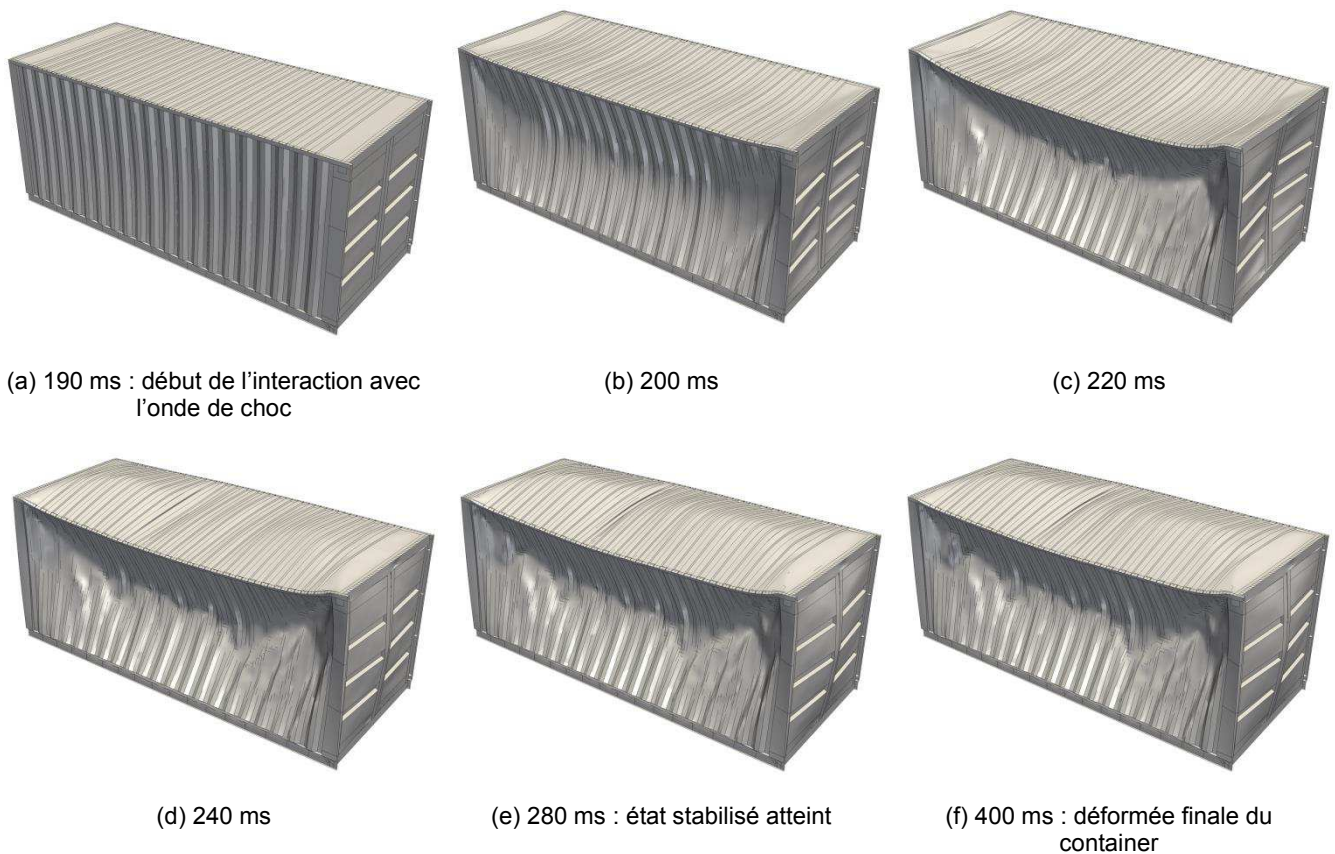
(d) 190 ms : interaction de l'onde de choc avec le container



(e) 400 ms : propagations d'ondes résiduelles dans le tunnel, sans effet majeur sur le container

Figure 155 : Interaction entre une onde de choc et un container métallique – Propagation de l'onde dans le tunnel

On présente ensuite la déformation importante du container, conforme à des prises de vue effectuées à l'issue de l'essai.



(a) 190 ms : début de l'interaction avec l'onde de choc

(b) 200 ms

(c) 220 ms

(d) 240 ms

(e) 280 ms : état stabilisé atteint

(f) 400 ms : déformée finale du container

Figure 156 : Interaction entre une onde de choc et un container métallique – Déformation du container

Mesures d'extensibilité de 32 à 1 024 cœurs mobilisés et commentaires

La Table 53 donne les mesures d'extensibilité obtenues pour le cas ci-dessus, ainsi que les configurations matérielles correspondantes pour chacun des nombres de cœurs considérés.

| | | | | | | |
|---|-------------|------------|------------|------------|------------|-------------|
| <i>Processus MPI</i> | 32 | 64 | 128 | 32 | 64 | 128 |
| <i>Threads KAAPI</i> | 1 | 1 | 1 | 8 | 8 | 8 |
| <i>Nombre total de CPU</i> | 32 | 64 | 128 | 256 | 512 | 1024 |
| <i>Temps (s) pour 2000 pas de temps</i> | 1547 | 885 | 577 | 640 | 440 | 345 |

Table 53 : Mesures d'extensibilité pour le calcul d'interaction d'une onde de choc avec un container métallique sur le calculateur TGCC/Curie

Ces résultats ne satisfont pas pleinement les attentes portant sur une exécution d'EPX à cette échelle. En particulier, est signalée en rouge sur la Table 53 une anomalie dans l'évolution du *speed-up*.

Tout d'abord, il n'a pas été possible de mobiliser plus de 8 cœurs par nœud en *SMP* sans dégrader fortement les performances, alors que la combinaison attendue des ressources pour mobiliser 1 024 cœurs était plutôt 64 processus MPI, utilisant chacun 16 *threads*. Ceci a forcé l'utilisation d'un nombre de processus MPI supérieur à ce qui était envisagé initialement, avec une limitation de l'extensibilité associée due aux travaux d'optimisation du solveur encore en cours en 2012. Ce point explique le saut indiqué en rouge dans les mesures de *speed-up*.

L'explication de la limitation du nombre de *threads* en *SMP* est encore en cours d'analyse par les partenaires CEA et INRIA. Un élément déterminant est que 8 est le nombre de cœurs par processeur sur les nœuds de TGCC/Curie concernés, constitués d'une association de 4 processeurs Intel Xeon X7560 pour fournir les 32 cœurs annoncés. Demander plus de 8 *threads* signifie donc solliciter plus d'un processeur, ce qui soulève des questions spécifiques relatives au protocole de maintien de la cohérence des caches entre les processeurs. Des travaux récents menés par l'INRIA tendent également à montrer que la politique de gestion de l'énergie, cruciale pour des machines de la taille de TGCC/Curie, peut être à l'origine des différences observées entre les *threads* lancées sur le même processeur que le *thread* principal (en charge également des sections séquentielles du programme) et les autres. Les différents processeurs sont forcés d'adapter leur fréquence de fonctionnement en rapport avec la charge de calcul qui leur demandée : si certains ne sont sollicités que de manière discontinue, ils peuvent ne pas fournir leur puissance de calcul nominale, ce que des tests élémentaires semblent montrer.

Malgré ces résultats qui suggèrent une phase de consolidation importante des différents aspects de la stratégie parallèle hybride proposée pour EPX, le *Preparatory Access* effectué sur TGCC/Curie répond positivement aux objectifs annoncés suivants.

1. La stratégie parallèle complète pour EPX est fonctionnelle sur 1 024 cœurs en associant le parallélisme à mémoire distribué et le parallélisme à mémoire partagée réalisé via la librairie KAAPI.
2. En faisant abstraction du saut modéré en passant de 128 à 256 cœurs dans les mesures de *speed-up* pour le cas d'interaction entre une onde de choc et un container (corrigé depuis en optimisant le parallélisme MPI) une approche extensible jusqu'à 1 024 cœurs est obtenue pour ce cas fortement couplé, ce qui était très largement hors de portée au début du projet.

L'efficacité parallèle est à consolider par des travaux d'optimisation détaillés, mais cela valide l'approche parallèle globale proposée.

3. L'ensemble des travaux réalisés pendant l'accès temporaire obtenu sur TGCC/Curie constitue une base de connaissance fondamentale pour la généralisation indispensable de la mise en œuvre d'EPX à cette échelle.

Table 54 : Synthèse de la mise en œuvre d'un cas industriel représentatif sur le calculateur TGCC/Curie

3.2.3 Illustration sur les transitoires accidentels de référence pour les réacteurs nucléaires actuels et futurs

On conclue la section dédiée au calcul parallèle pour les systèmes fluide-structure complexes en dynamique rapide par une revue de la mise en œuvre des méthodes innovantes proposées appliquées à la simulation concrète des conséquences mécaniques de transitoires accidentels de référence pour le parc de réacteurs nucléaires actuels et pour les réacteurs de IV^{ème} génération en conception.

Il s'agit d'un volet de valorisation fondamentale des actions de recherche menées, à vocation intercommunautaire, comme en témoigne la présentation des concepts à la conférence CSDM'2012 sur la conception de systèmes industriels complexes [Faucher, 2012].

Dans le domaine spécifique du nucléaire, les travaux sont exposés en 2013 à la conférence SNA+MC [Faucher et al., 2013], ce qui leur vaut une publication dans un numéro spécial de la revue *Annals of Nuclear Energy* [Faucher et al. (2), 2014]. Cette volonté de concrétiser la démarche de recherche par des applications abouties à

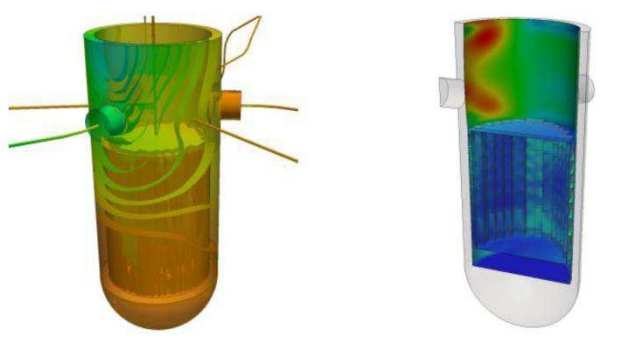
l'échelle industrielle sur des problématiques de premier intérêt pour la sûreté est un élément important de l'attribution du Grand Prix de la Société Française d'Énergie Nucléaire (SFEN) à EPX en 2013.

La Table 55 présente les transitoires accidentels considérés.

| Accident par Perte de Réfrigérant Primaire (APRP, voir le paragraphe B-2.2.3 pour une description spécifique) | |
|---|---|
| <i>Description physique</i> | <i>Caractéristiques de la simulation</i> |
| Brèche de taille importante dans le circuit primaire d'un réacteur pressurisé. Propagation d'une onde de dépressurisation de grande amplitude. | Couplage de modèles 1D-filaires pour les tuyauteries et de modèles 3D pour la cuve et ses structures internes. Impédances pour la représentation des effets des détails géométriques sur les ondes et l'écoulement. Changement de phase dans l'eau. |
| Accident de Dimensionnement du Confinement (ADC) | |
| <i>Description physique</i> | <i>Caractéristiques de la simulation</i> |
| Expansion d'une bulle de gaz sous pression dans un bain de liquide à l'intérieur d'une cuve avec une surface libre et des structures complexes immergées. | Interaction entre le fluide et les structures immergées en grands déplacements. Suivi d'interface entre le liquide et les gaz. |
| Explosion hydrogène | |
| <i>Description physique</i> | <i>Caractéristiques de la simulation</i> |
| Réaction dans un mélange de dihydrogène et de dioxygène dans l'enceinte de confinement d'un réacteur après une situation accidentelle en cuve provoquant l'oxydation de composants métalliques. | Écoulements réactifs. Modèles robustes et précis pour le suivi du front de flamme dans les régimes de déflagration et détonation. Interaction fluide-structure. |

Table 55 : Transitoires accidentels de référence considérés

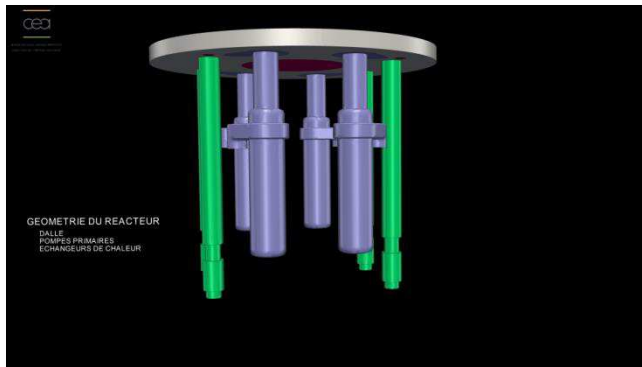
La Table 56 illustre finalement les résultats obtenus pour les simulations correspondantes, en précisant la place du calcul parallèle dans la réalisation des études.

| Accident par Perte de Réfrigérant Primaire | |
|---|---|
| <i>Résultats de simulation (cf. paragraphe B-0 pour des vues détaillées)</i> | <i>Exécution parallèle</i> |
|  <p>(a) Onde de dépressurisation (b) Contraintes dans les structures internes</p> <p>Figure 157 : Résultats de la simulation d'APRP</p> | <p>La simulation met en œuvre uniquement des contraintes permanentes, puisque l'interaction fluide-structure est réalisée avec des maillages coïncidents.</p> <p>De ce fait, l'extensibilité est aisément obtenue avec le solveur à mémoire distribuée.</p> <p>Les modèles courants, encore dans une phase de finalisation de la méthodologie, sont de taille modérée, mais un grand nombre de cycles en temps doit être effectué pour le calcul du régime stationnaire sur plusieurs secondes, introduisant un besoin fort pour une accélération parallèle pour respecter les contraintes temporelles d'une ingénierie.</p> <p>Dans les deux cas de simulations (régime nominal et transitoire de dépressurisation), le solveur se comporte comme attendu.</p> |

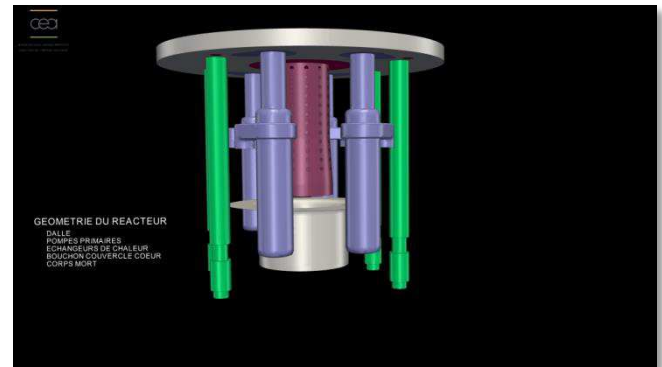
Accident de Dimensionnement du Confinement

Ce cas de calcul, reposant sur un remontage du prototype ASTRID ne représentant pas le dessin actuel du réacteur, a fait l'objet de la construction d'un contenu animé destiné au mur d'images de la Direction de l'Energie Nucléaire du CEA, pour son inauguration en novembre 2011. Les vues suivantes en sont extraites.

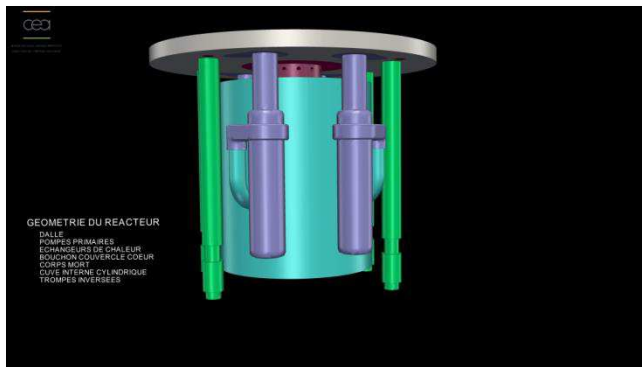
Présentation de la géométrie



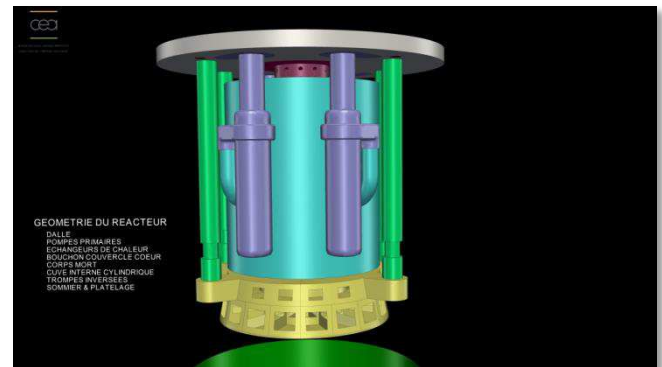
(a) Dalle, pompes et échangeurs



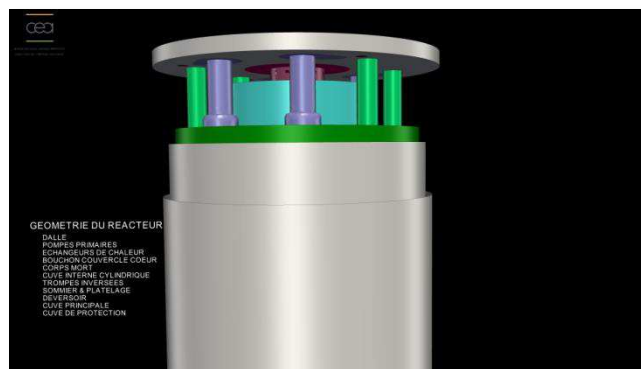
(b) = (a) + Bouchon Couvercle Cœur et corps mort



(c) = (b) + Cuve Interne Cylindrique



(d) = (c) + Sommier et platelage



(e) = (d) + Déversoir, cuve principale et cuve de protection

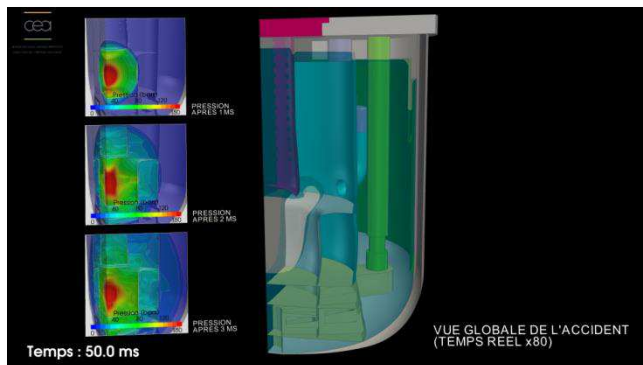
Figure 158 : Géométrie considérée pour le remontage du prototype ASTRID

Contrairement aux simulations courantes pour l'ADC, portant sur des représentations idéalisées de réacteurs, un nombre minimal d'hypothèses est fait sur la géométrie des structures au niveau de la modélisation. Seule la dalle est simplifiée en négligeant les traversées des pompes et des échangeurs. De même, les EPUr (dispositifs d'Evacuation de la Puissance Résiduelle) sont absents du modèle.

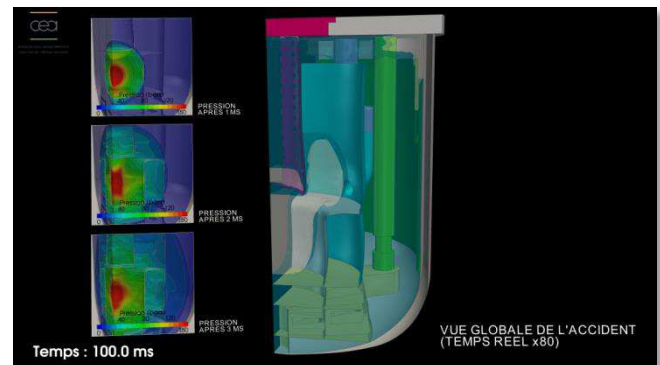
La géométrie retenue pour le calcul présente deux plans de symétrie autorisant de ne décrire qu'un quart du réacteur. Le chargement est voisin de celui utilisé pour la simulation des essais MARA (détente d'une bulle de gaz d'explosif). Il est issu d'études passées et ne reflète pas les recherches complexes en cours sur le cœur du prototype ASTRID. De même, les caractéristiques des matériaux et l'épaisseur pour les structures minces sont relativement arbitraires (en particulier pour les pompes et les échangeurs), du fait de l'avancement du projet ASTRID d'une part, et de la nature démonstrative du présent calcul d'autre part.

Le modèle consiste en un maillage par éléments finis des structures et du fluide interne. Les maillages coïncident géométriquement sur les bords du domaine fluide, alors que le maillage des structures internes est immergé dans le maillage du fluide, comme pour la simulation tridimensionnelle de l'essai MARA10 (voir le paragraphe B-2.2.2.3). En tout, le modèle compte environ 2 millions de mailles, ce qui représente un seuil de faisabilité significatif pour cette gamme de simulations fortement couplées.

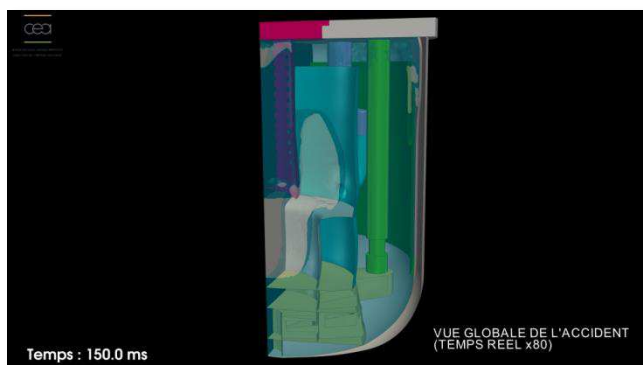
Vue globale de l'accident



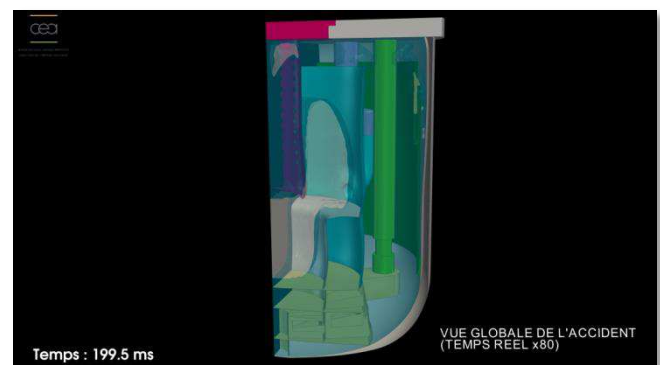
(a) 50 ms : détente de la bulle et élévation de la surface libre



(b) 100 ms : projection du liquide contre la dalle et déferlement vers la périphérie du réacteur



(c) 150 ms : compression du ciel gazeux et débordement dans le déversoir

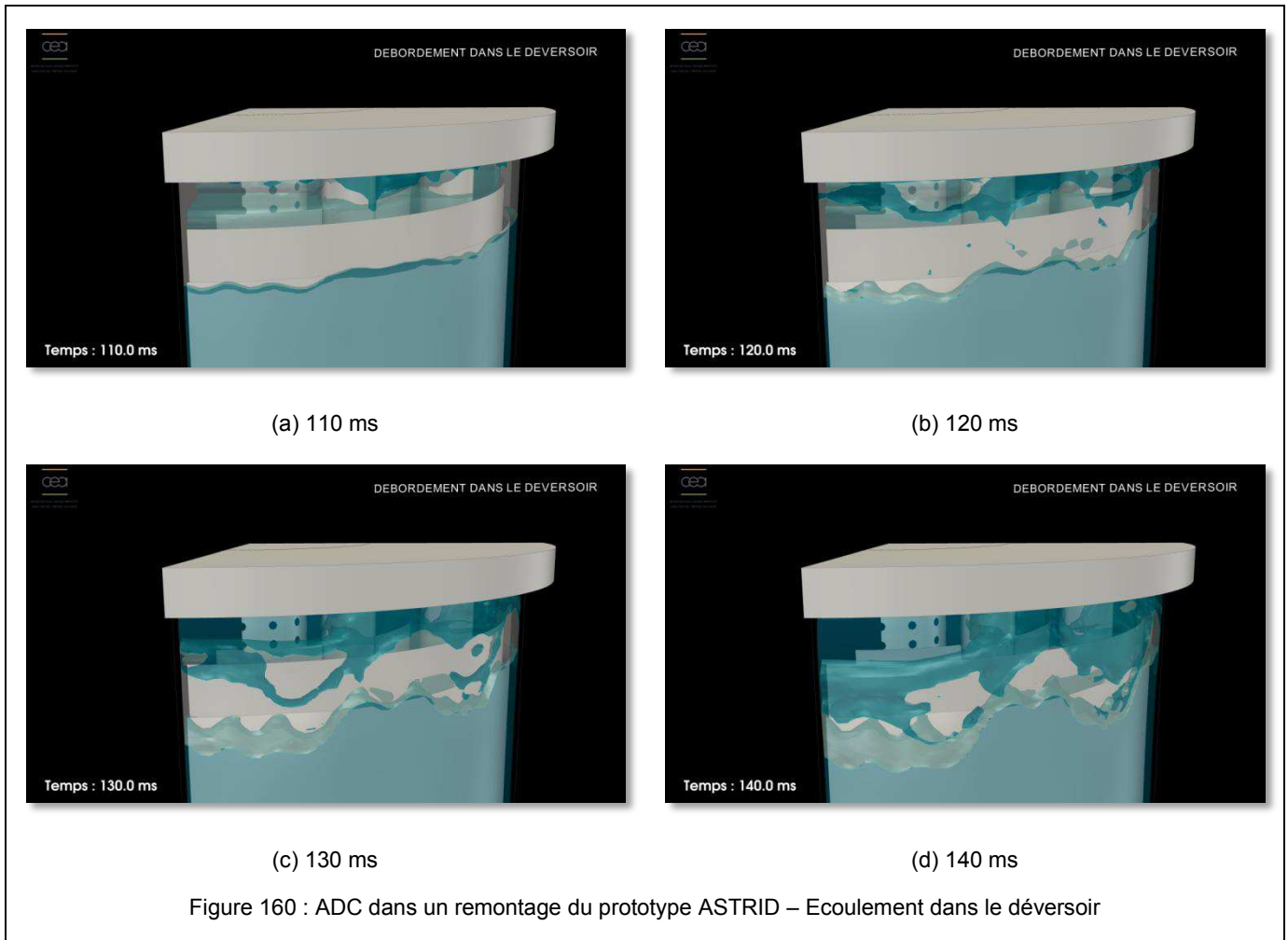


(d) 200 ms : formation d'un bourrelet caractéristique sur la cuve à la jonction avec la dalle

Figure 159 : ADC dans un remontage du prototype ASTRID – Vue globale de l'accident

Écoulement dans le déversoir

Cet aspect de la simulation conditionne particulièrement la déformation finale de la cuve principale et il requiert une finesse de discrétisation suffisante pour la grille fluide entre le déversoir et la cuve.



Exécution parallèle

Contrairement au calcul d'APRP, les modèles destinés à l'ADC mettent en œuvre des structures immergées et requièrent une finesse de discrétisation relativement importante pour représenter correctement l'expansion de la bulle et l'écoulement du liquide le long de la dalle et dans le déversoir. Le schéma VOFIRE pour la localisation des interfaces est également indispensable.

Le solveur à mémoire distribuée se comporte comme attendu jusqu'à environ 128 processus MPI, grâce au solveur GPCG pour les contraintes cinématiques. Pour adresser des nombres supérieurs de cœurs, l'approche hybride MPI + SMP est la plus adaptée. Une extensibilité croissante est obtenue jusqu'à 1 024 cœurs durant le *Preparatory Access* PRACE, mais l'efficacité parallèle ne répond pas aux attentes et l'accélération fournie par KAAPI est instable. Ceci est de toute évidence due à la loi d'état multi-composants complexe pour le fluide, provoquant des accès mémoire intempestifs dans la boucle élémentaire. Les corrections sont en cours (thèse de M. Sridi notamment).

Explosion hydrogène

Résultats de simulation

Deux cas sont considérés pour cet accident. Le premier est la simulation d'un essai sur l'installation à grande échelle RUT [Dorofeev et al., 1997], permettant de valider les modèles d'écoulements réactifs implémentés dans EPX. Le second est une simulation de démonstration dans une configuration réacteur. Dans ce second cas, le maillage est structuré, ce qui n'est pas une exigence d'EPX, mais une contrainte issue du chaînage avec un code chargé de calculer le mélange initial des réactifs.

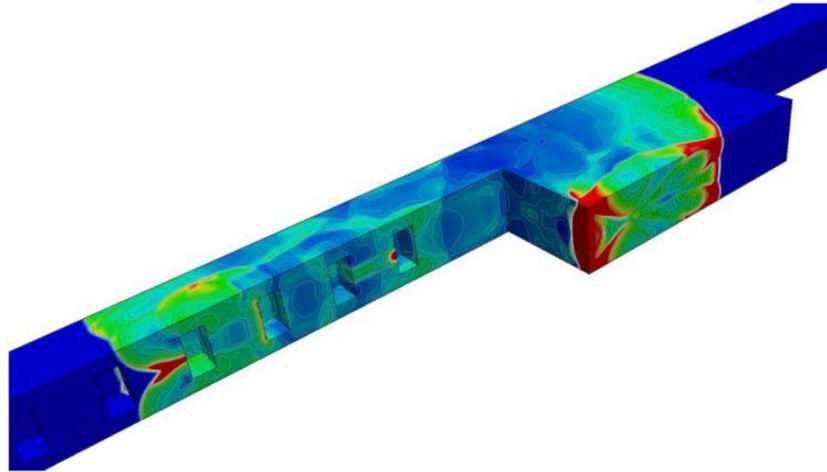


Figure 161 : Champ de pression dans un essai sur l'installation RUT

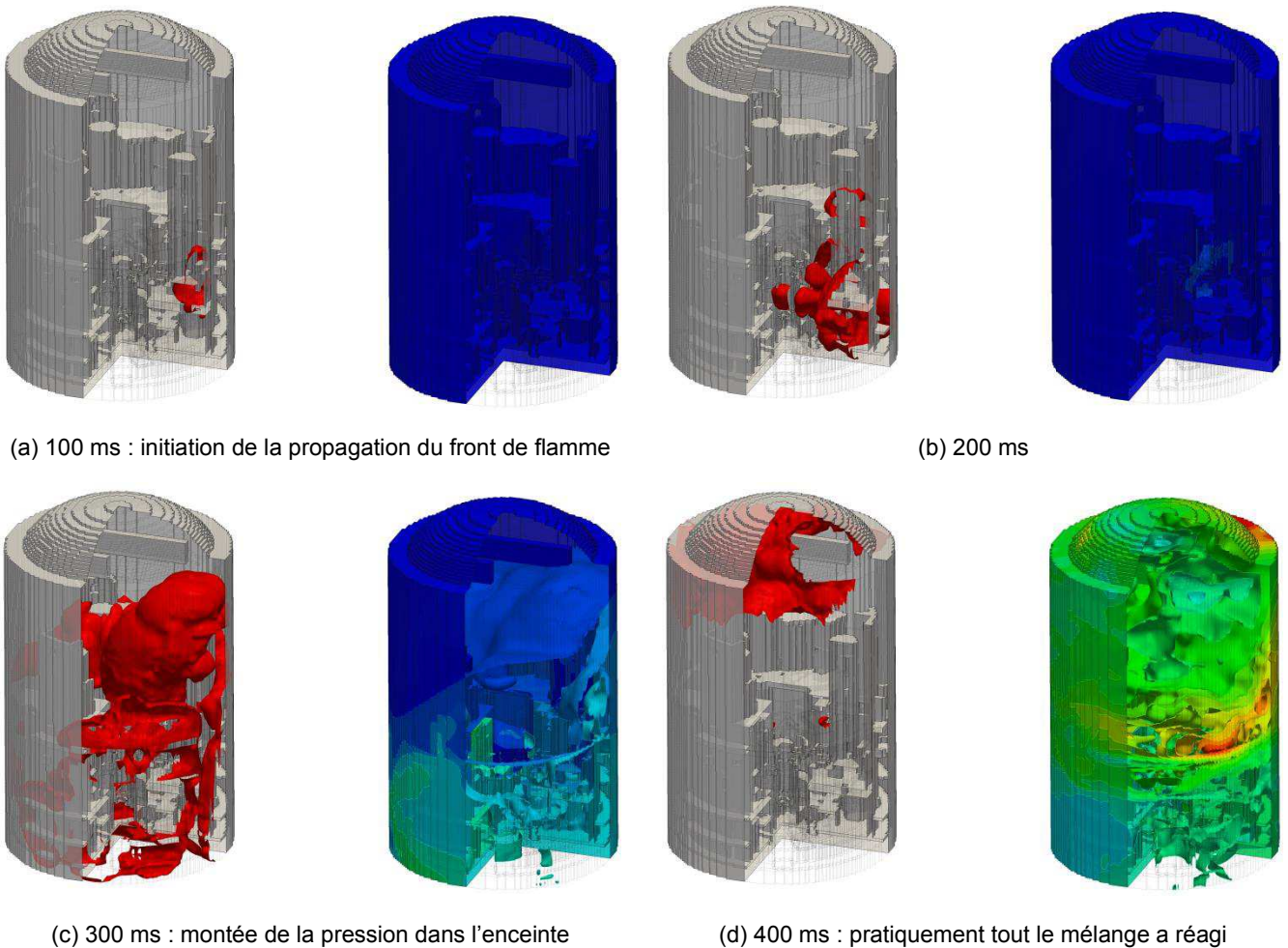


Figure 162 : Explosion hydrogène dans une enceinte (à gauche, front de flamme, à droite, pression)

Exécution parallèle

Ces simulations sont caractérisées par un grand nombre de cellules de type volume fini (de quelques millions à quelques dizaines de millions) et une faible influence des contraintes cinématiques, au moins tant que la ruine des structures en réponse à l'explosion n'est pas prise en compte.

Le solveur à mémoire distribuée est parfaitement extensible dans cette configuration pour plusieurs centaines de processus MPI. La seule limitation est la distribution de la mémoire entre les processus. La structure de données doit être améliorée pour réduire au maximum la redondance des données entre les processus, conduisant à une utilisation totale de la mémoire excessive et inutile. Pour un nombre donné de cœurs, l'approche hybride, reposant sur un nombre plus faible de processus MPI et limitant ainsi la redondance potentielle, peut éventuellement s'avérer préférable.

Table 56 : Simulation des transitoires de référence et commentaires sur les performances parallèles

3.2.4 Bibliographie et publications spécifiques (surlignées)

[Amdahl, 1967]

G. Amdahl, Validity of the single processor approach to achieving large scale computing capabilities, AFIPS Spring Joint Computer Conference Proceedings (30): 483-485, 1967.

[Casadei et al., 2011]

F. Casadei, T. Dyngeland, P. Pegon, Simulation of blast loading on a 20-ft steel ISO container with FSI by EUROPLEXUS, JRC Technical Note, PUBSY N. JRC63868, 2011.

[Dorofeev et al., 1997]

S. B. Dorofeev, V. P. Sidorov, W. Breitung, A.S. Kotchourko, Large scale combustion tests in the RUT facility: experimental study, numerical simulations and analysis on turbulent deflagrations and DDT, in Transactions of the 14th International Conference on Structural Mechanics in Reactor Technology, volume 10, pages 275-283, Lyon, France, 1997.

[Faucher, 2012]

V. Faucher, Contribution of ANR RePDyn project to the parallel simulation of fast transient accidental phenomena at nuclear reactor scale, Complex Systems Design & Management Conference, Paris, France, December 12-14, 2012.

[Faucher et al., 2013]

V. Faucher, P. Galon, A. Beccantini, F. Crouzet, F. Debaud, T. Gautier, Hybrid parallel strategy for the simulation of fast transient accidental situations at reactor scale, Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications and Monte Carlo 2013 (SNA + MC 2013), France, October 27-31, 2013.

[Faucher et al. (2), 2014]

V. Faucher, P. Galon, A. Beccantini, F. Crouzet, F. Debaud, T. Gautier, Hybrid parallel strategy for the simulation of fast transient accidental situations at reactor scale, Annals of Nuclear Energy, accepted March 2014.

[Gautier et al., 2007]

T. Gautier, X. Besseron, L. Pigeon, KAAPI: A Thread Scheduling Runtime System for Data Flow Computations on Cluster of Multi-Processors, Parallel Symbolic Computation'07, London, Ontario, Canada, 2007.

[Gautier et al., 2013]

T. Gautier, F. Lementec, V. Faucher, B. Raffin, X-KAAPI: a Multi Paradigm Runtime for Multicore Architectures, Sixth International Workshop on Parallel Programming Models and Systems Software for High-End Computing (P2S2), Lyon, October 1st, 2013.

[Sridi et al., 2014]

M. Sridi, V. Faucher, B. Raffin, T. Gautier, Optimisation de l'utilisation du cache dans EUROPLEXUS, COMPAS'2014 : Parallélisme / Architecture / Système, Neuchâtel, Suisse, 23 au 25 avril, 2014.

C. PROJET SCIENTIFIQUE

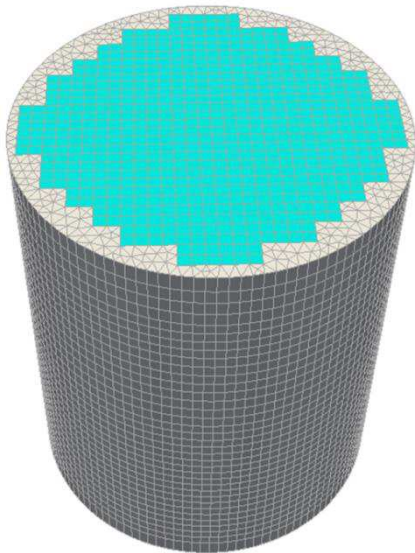
En guise de conclusion pour le présent mémoire, ce dernier chapitre introduit les thématiques qui étendent les concepts présentés précédemment dans une démarche de recherche à court et moyen termes.

On distingue à nouveau la contribution à la définition de nouvelles méthodes numériques pour la modélisation des systèmes fluide-structure complexes et les actions relatives aux techniques de résolution à haute performance pour ces mêmes systèmes.

1. Directions de recherche pour la modélisation et les algorithmes pour les systèmes couplés

Interaction fluide-structure avec précision accrue pour les structures immergées

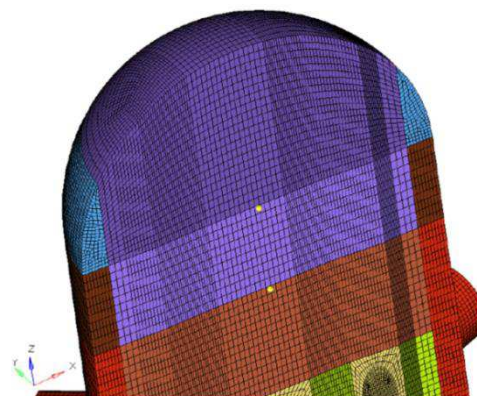
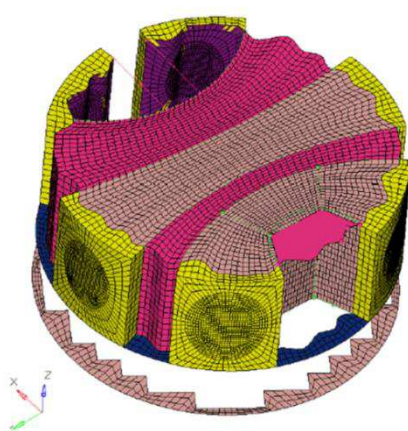
Un des avantages fondamentaux que présentent les approches de type *frontières immergées* pour l'interaction fluide-structure, en plus de leur capacité à gérer les grands déplacements et les changements de topologie de la structure, est l'accélération du processus de mise en données pour des modèles complexes, en allégeant les contraintes sur le maillage. A titre d'illustration, la Figure 163 présente le maillage utilisé pour la simulation des conséquences mécaniques de l'APRP (voir le paragraphe B-2.2.3.2) et une extension envisagée pour intégrer le plenum supérieur dans la représentation tridimensionnelle de la cuve.



(a) Maillage du cœur et de la dérivation se conformant à la géométrie du cloisonnement



(b) Raccordement avec le plenum inférieur et l'espace annulaire contraignant fortement la procédure de maillage



(c) Ajout du plenum supérieur dans la représentation tridimensionnelle de la cuve : difficulté majeure pour le raccordement des tuyauteries primaires entrantes (*branches froides*) et sortantes (*branches chaudes*) en accord avec le maillage du cœur et de la dérivation – Maillage réalisé par EDF

Figure 163 : Difficultés de maillage pour des systèmes industriels avec interaction fluide-structure conforme

Un inconvénient collatéral de cette problématique de maillage est l'obligation de recourir à des mailles distordues pour le fluide. Elles produisent dans de nombreux cas des artefacts sur la solution, en particulier dans des régimes d'écoulement à faible nombre de Mach, comme c'est le cas dans un transitoire de dépressurisation, une fois passées les ondes de grande amplitude après l'ouverture de la brèche.

Il semble alors souhaitable de découpler topologiquement le maillage de la structure de celui du fluide. La problématique associée est que les quantités d'intérêt observées dans une simulation de cette nature sont principalement les efforts sur le cloisonnement, résultant de différentiels de pression issus de temps de trajet différents des ondes entre le cœur et le dérivation. Il faut donc impérativement conserver une précision maximale sur ces efforts. Ceci soulève deux points délicats :

1. l'identification précise des deux domaines fluides de part et d'autre de la structure,
2. le calcul des efforts proprement dits à partir de relations cinématiques écrites sur des voisinages.

Pour le premier point, l'information sur le positionnement exact du fluide par rapport à la structure étant perdue dans les mailles fluides coupées par la structure, cela impose de recourir à un maillage fin pour le fluide. Le calcul parallèle vient en support de cette contrainte, de même que les techniques de raffinement adaptatif de maillage (voir le paragraphe suivant).

Pour le second point, il s'agit d'améliorer la procédure d'écriture des contraintes cinématiques d'interaction fluide-structure en présence de maillages déconnectés. La Figure 164 illustre l'approche actuelle dans une configuration bidimensionnelle. Pour chaque nœud de la grille fluide situé dans le domaine d'influence de la structure (repéré en rouge sur la figure), une contrainte cinématique est écrite impliquant les nœuds de structures les plus proches.

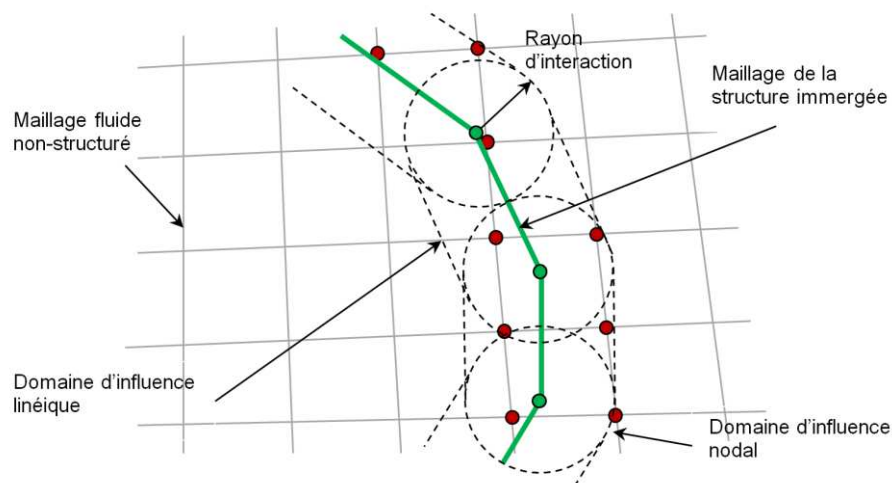


Figure 164 : Détection des interactions fluide-structure avec maillages déconnectés

On obtient en pratique une série de forces ponctuelles agissant sur la structure au niveau des points de projection de nœuds fluides les plus proches. Le champ des efforts d'interaction manque alors de régularité, ce qui nuit à la précision de la méthode.

Pour pallier cet écueil, il est envisagé de recourir à une écriture continue des contraintes cinématiques d'interaction, de la forme :

$$\int_{\text{surface de la structure}} [(\dot{\mathbf{q}} - \mathbf{u}) \cdot \mathbf{n}_s] \lambda \, dS = 0 \quad (72)$$

Cette écriture doit ensuite être discrétisée sur un espace bien choisi pour le multiplicateur λ et les intégrales correspondantes doivent être calculées de manière exacte, ce qui exige une subdivision de l'espace pour utiliser à chaque fois la quadrature adaptée au degré des fonctions de forme mises en jeu.

Mise en œuvre générique, robuste et parallèle de techniques de raffinement adaptatif de maillage

Si le calcul parallèle a pour vocation de permettre l'utilisation de la finesse de maillage adaptée pour un problème donné en allégeant les contraintes sur le temps de calcul, il n'en demeure pas moins que le raffinement uniforme de la discrétisation est bien souvent inutile, voire contre-productif.

Une alternative est l'utilisation de méthodes de raffinement adaptatif de maillage (*Adaptive Mesh Refinement* ou *AMR*). Des actions d'envergure dans ce sens existent en séquentiel dans l'environnement EPX, à l'initiative de l'Université Polytechnique de Catalogne et en collaboration avec le *Joint Research Center* de la Commission Européenne [Verdugo, 2013][Casadei et al. (1), 2013][Casadei et al. (2), 2013]. Les éléments méthodologiques à considérer appartiennent à deux catégories complémentaires, reportées sur la Table 57.

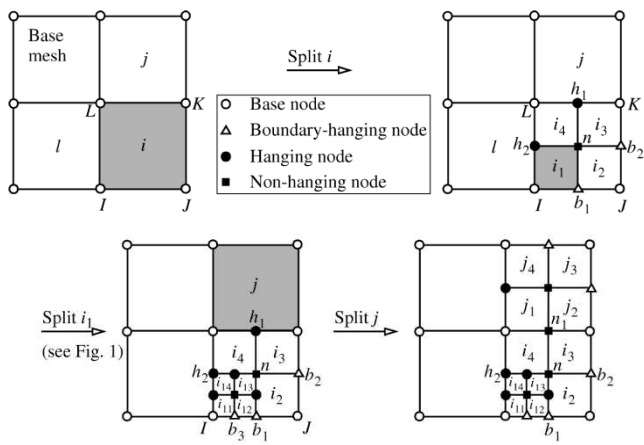
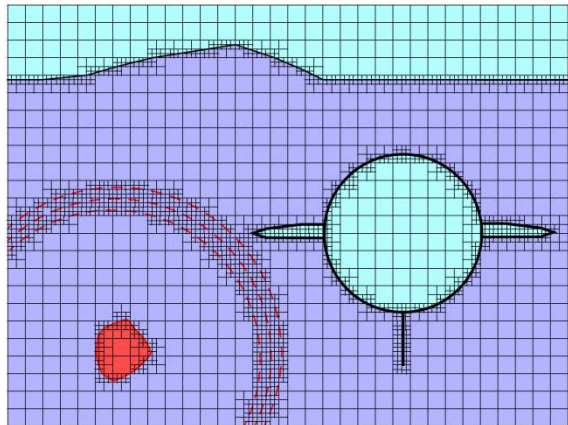
| Eléments méthodologiques pour l'AMR en séquentiel | |
|--|---|
| <i>Technologie pour le raffinement et le déraffinement de grilles non-structurées</i> | <i>Définition et implémentation de critères pilotant la finesse de discrétisation locale</i> |
|  <p>Figure 165 : Raffinement local d'un quadrangle</p> <p>La Figure 165, extraite de [Casadei et al. (2), 2013] illustre la problématique de raffinement, en particulier la gestion des nœuds libres (<i>hanging nodes</i>) apparaissant sur les arêtes (et au milieu des faces en 3D).</p> <p>Les flux à travers les faces pour les calculs fluides doivent aussi être traités spécifiquement.</p> | <p>Il peut s'agir de critères portant sur la variation d'une quantité, pour bien représenter les fronts d'onde par exemple, ou de critères liés à la géométrie du problème, comme le raffinement au voisinage des structures dans un calcul d'interaction fluide-structure, ou au voisinage des interfaces entre les fluides le cas échéant.</p> <p>La Figure 166, extraite de [Casadei et al. (1), 2013] donne le principe d'utilisation de tels critères.</p>  <p>Figure 166 : Principes des critères pour l'AMR</p> |

Table 57 : Eléments méthodologiques pour l'AMR en dynamique rapide

En complément des travaux en cours et en relation avec les actions de recherche présentées au chapitre B, la question de la gestion en parallèle de l'AMR en dynamique rapide revêt une grande importance pour sa diffusion dans la communauté des utilisateurs d'EPX, en particulier pour l'approche à mémoire distribuée avec décomposition de domaine. Les deux volets méthodologiques de la Table 57 doivent être pris en compte, avec en particulier les points techniques et algorithmiques associés figurant sur la Table 58.

| Eléments techniques et algorithmiques pour l'AMR en parallèle (solveur à mémoire distribuée) | |
|--|---|
| <i>Technologie pour le raffinement et le déraffinement de grilles non-structurées</i> | <i>Définition et implémentation de critères pilotant la finesse de discrétisation locale</i> |
| <p>Prise en compte des <i>hanging nodes</i> créés sur la frontière entre deux sous-domaines.</p> <p>Gestion des flux eulérien ou ALE à travers les frontières en prenant en compte le raffinement local de chaque élément.</p> | <p>Communications spécifiques pour les critères reposant sur des reconstructions sur un voisinage (par exemple, calcul de gradients ou de courbures).</p> <p>Prise en compte des grands mouvements relatifs des structures et du fluide pour les critères reposant sur le voisinage de la structure (pouvant interagir avec des éléments fluides appartenant à d'autres sous-domaines).</p> |

Table 58 : Quelques éléments techniques pour l'AMR en parallèle à mémoire distribuée

Extension des modélisations multi-fluides multi-phases en environnement industriel

Il s'agit d'un domaine de recherche majeur pour la collaboration entre EDF et CEA en dynamique rapide (calcul des conséquences de l'APRP ou d'autres situations transitoires en réacteur comme les marteaux d'eau) [Liu, 2013], et pour le consortium EPX en général. Il couvre notamment la mise en œuvre de modèles multi-fluides avancés intégrant les transferts de masse entre les fluides, avec des travaux en cours pour la gestion robuste des déséquilibres dans le processus de changement de phase.

En relation avec le contenu du présent mémoire, on s'intéresse particulièrement à la représentation de l'écoulement diphasique au niveau de la brèche dans le cadre d'un accident de dépressurisation brutale et aux effets d'un impact balistique sur un réservoir. La Table 59 rassemble le contexte et les perspectives correspondantes.

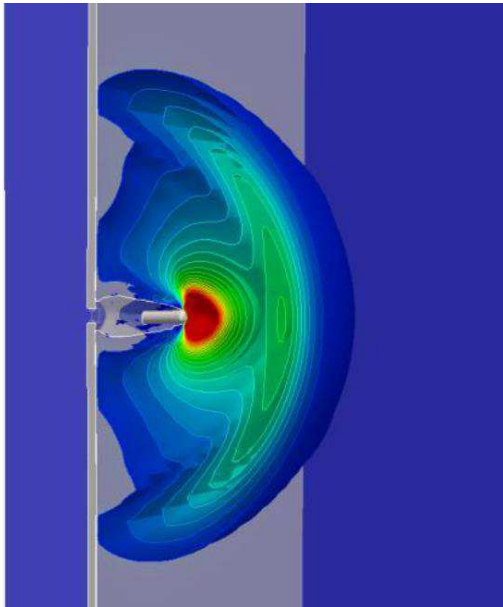
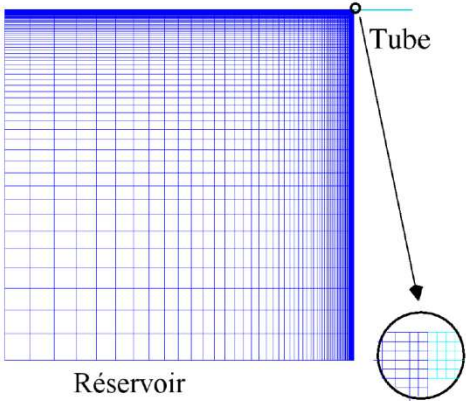
| Écoulement diphasique à la brèche durant un transitoire de dépressurisation | Choc balistique dans un réservoir |
|--|--|
| <p>La représentation de l'état diphasique à la brèche, en tenant compte du déséquilibre thermique, détermine le débit sortant et conditionne donc très fortement la forme de l'onde de dépressurisation qui parcourt le circuit et sollicite les structures.</p> | <p>Il s'agit d'un cas de calcul porté par l'ONERA dans le cadre du projet ANR RePDyn (cf. Figure 167). La modélisation physique n'étant pas encore assez mature pour produire un résultat de manière stable, il n'est pas considéré dans les mesures de performances.</p> |
| <p><i>Perspectives de recherche</i></p> | |
| <p>De nombreuses modélisations sont à comparer à des solutions de référence, des approches simplifiées aux approches continues intégrant la représentation du volume externe (cf. Figure 168).</p> |  |
|  | <p>Figure 167 : Projectile balistique dans un réservoir</p> |
| <p>Figure 168 : Exemple de modèle de calcul intégrant la tuyauterie et le volume de fuite</p> | <p>Il représente tout de même un domaine de simulation à très fort potentiel, avec la création d'une bulle de cavitation de grand volume dans le sillage du projectile balistique, dont le comportement sur un temps relativement long (multiples <i>collapses</i> successifs) donne le chargement sur les structures. Des résultats expérimentaux spectaculaires sont disponibles à l'ONERA.</p> |
| <p>La question de l'intégration dans un modèle de calcul complet pour l'APRP, exécuté en parallèle, est primordiale.</p> | <p><i>Perspectives de recherche</i></p> <p>Il s'agit d'un cas de validation majeure pour les approches multi-fluides (à 5 ou 7 équations), en particulier pour la simulation des écoulements avec cavitation et la représentation du phénomène de recondensation.</p> <p>Ces travaux sont en forte interaction avec le calcul haute performance, en raison du besoin de finesse pour la simulation du comportement de la bulle. Les travaux complémentaires sur l'AMR peuvent également être mis à profit.</p> |

Table 59 : Perspectives de recherche pour les écoulements multi-fluides et multi-phases

2. Directions de recherche pour le calcul à haute performance en dynamique rapide

Parallélisme hybride à grande échelle

Les expérimentations pour le passage de la stratégie parallèle hybride proposée pour EPX suggèrent des travaux de consolidation importants, en particulier pour la maîtrise de l'extensibilité de l'approche à mémoire partagée sur des nœuds dont la structure mémoire est relativement complexe.

Il s'agit d'identifier les conséquences sur la performance du placement des données en mémoire, d'en déduire des règles et des pratiques permettant de stabiliser la performance et surtout, de mettre en œuvre ces règles de manière automatique et dynamique, pour libérer le modélisateur de cette contrainte. Ces actions de recherche sont le domaine de la thèse de M. Sridi (CEA/INRIA, cf. paragraphe B-3.2.1).

S'y ajoutent des paramètres relatifs à l'interaction entre le parallélisme à mémoire distribuée et le parallélisme à mémoire partagée, par exemple, la répartition optimale (et à nouveau automatique) d'un nombre de cœurs donnés entre processus MPI et *threads* internes. Un certain nombre des techniques logicielles sont déjà implémentées dans EPX pour répondre à ses besoins d'adaptation de la configuration de calcul à la volée. La recherche à effectuer concerne donc majoritairement les outils de diagnostic internes et les méthodes d'optimisation, pour d'une part identifier et discriminer avec pertinence les écarts à la performance attendue en cours d'exécution, et d'autre part, déterminer l'évolution des paramètres les plus influents pour corriger ces écarts. L'actualisation automatique de la décomposition de domaine pour le solveur à mémoire distribuée, en remplacement de la fréquence d'actualisation imposée dans le formalisme actuel, est également un point à considérer dans ces travaux d'optimisation *a posteriori* de la configuration de calcul.

Une mise en œuvre systématique des méthodes sur les supercalculateurs centralisés est indispensable pour cette action.

Veille sur les nouvelles architectures, les nouveaux modèles de programmation, leurs avantages et leurs conséquences sur les algorithmes

Les accélérateurs matériels représentent une source de performance majeure pour la communauté du calcul scientifique, avec une difficulté d'accès pour les outils industriels liée au modèle de programmation qu'ils imposent, notamment pour la gestion de la mémoire qui leur est associée.

Le cas des processeurs graphiques est remarquable en ce sens, car il tend à séparer la communauté des spécialistes du logiciel de celle des mathématiciens appliqués, tous s'accordant sur l'intérêt des performances proposées, au moins théoriques. L'expérience mitigée de M. Durand pour le portage sur GPU des techniques de résolution par éléments discrets en dynamique rapide souligne le besoin d'analyses préalables approfondies sur la robustesse des algorithmes et les gains à attendre avant la mise en œuvre effective d'un portage sur de telles architectures.

Néanmoins, un tel élan de la communauté et des fournisseurs de matériel ne peut être ignoré et il est fondamental de poursuivre une veille active sur l'offre technique et les modèles de programmation associés. Sur ce point, les accélérateurs à base de processeurs massivement multi-cœurs (Intel Xeon-Phi notamment) semblent une direction à suivre particulièrement, dans la mesure où les travaux de portage et de réécriture pour rendre un code standard exécutable sur cette architecture sont notoirement plus restreints que pour les GPU.

L'analyse approfondie des exigences particulières de ce matériel pour obtenir la performance attendue et de leurs conséquences sur les algorithmes mis en œuvre en dynamique rapide des fluides et des structures est donc un sujet de recherche continue, mettant à profit la collaboration existante avec l'équipe MOAIS de l'INRIA. Cette dernière propose une expertise de haut niveau pour l'utilisation optimale d'architectures munies d'un ou plusieurs accélérateurs, en étudiant avec précision le placement des données et des tâches, ainsi que son évolution en cours d'exécution.

Maîtrise de la précision des simulations parallèles

En plus de l'analyse des performances d'EPX pour les modèles associés à son activité industrielle, la contribution d'EDF dans le cadre du projet RePDyn soulève un point spécifique à l'arithmétique à virgule flottante qui représente un frein au déploiement des méthodes proposées vers ses unités d'ingénierie. Il s'agit de la dispersion dans les résultats d'une simulation donnée observée lorsqu'elle est exécutée avec des nombres différents de processus MPI ou de *threads*, ou les deux conjointement.

Les réserves légitimes exprimées par EDF portent sur le fait que l'analyse des simulations dans un référentiel de sûreté n'est pas compatible avec des sources d'incertitude non-maîtrisées dans les résultats.

Tout d'abord, le chapitre B, et le paragraphe B-1.2.5 en particulier pour le traitement des contraintes cinématiques, montrent que l'algorithme d'EPX est conçu pour limiter les incertitudes.

Il est alors fondamental de distinguer 2 classes de dispersions :

1. la dispersion issue de la variation dans l'exploitation des ressources matérielles (nombres de processus MPI différents, architectures différentes pour les processeurs utilisés),
2. la dispersion introduite par les paramètres de résolution.

Cette dernière doit faire l'objet d'une analyse spécifique et accompagne le processus de validation de toute méthode numérique, le plus souvent à l'aide d'une comparaison à une solution de référence, par exemple expérimentale.

Au contraire, la première est une conséquence logique de l'arithmétique à virgule flottante, pour laquelle l'addition n'est ni associative ni commutative, en raison de la précision limitée sur les réels, engendrant des arrondis sur les sommes partielles. Les références [Goldberg, 1991][Kapra et Dehon, 2007][Mattson et Standberg, 2008][Monniaux, 2008][Villa et al., 2008] représentent des contributions marquantes dans la littérature abondante sur ce thème bien connu de la communauté du calcul intensif depuis plus de 20 ans.

En répartissant les calculs à faire sur les cœurs disponibles, toute approche parallèle, aussi bien à mémoire partagée qu'à mémoire distribuée, tend à modifier l'ordre dans lequel les opérations sont réalisées. Un exemple simple est le passage de la numérotation globale des éléments à la numérotation locale sur les sous-domaines, qui modifie l'ordre dans lequel sont sommées les contributions aux vecteurs de forces internes. Il en résulte une solution logiquement différente entre une exécution de la version parallèle et une exécution de la version standard d'EPX, de même qu'entre deux exécutions de la version parallèle avec des nombres de processus différents.

La contribution d'EDF au projet RePDyn, très détaillée, permet de mettre en évidence les multiples aspects de l'impact de l'arithmétique à virgule flottante sur l'algorithme de simulation en dynamique rapide d'EPX. Ils sont rassemblés et commentés sur la Table 60.

| | |
|---|---|
| <i>Influence du pas de temps automatique</i> | Le pas de temps automatique dépend directement de la position des nœuds et conditionne le nombre de sommations faites pour atteindre un instant donné. Il présente donc une influence majeure sur la propagation de différences d'arrondis entre les versions. |
| <i>Influence des non-linéarités à seuil</i> | C'est le type de non-linéarité ayant l'impact le plus grand : on la trouve par exemple dans le contact unilatéral ou dans la modélisation de certains matériaux complexes, comme le béton armé par exemple. Le dépassement du seuil, fondé sur une comparaison de nombres flottants, introduit ponctuellement une variation forte dans la réponse du système, avec des conséquences fortes sur le voisinage. Une variation dans l'instant de dépassement d'un seuil local peut donc aisément créer des bifurcations dans la solution numérique. |
| <i>Influence des instabilités et des pertes d'unicité</i> | Dans certains cas physiques bien connus (flambage, contact et frottement avec alternance adhérence/glisement par exemple), la solution du système mécanique considéré n'est pas unique. Les différences d'arrondis dans les sommations peuvent privilégier une solution plutôt qu'une autre si elles ont des caractéristiques très voisines. |
| <i>Influence du nombre de pas de temps</i> | Plus le nombre de pas de temps est grand, plus le nombre de sommations effectuées est grand et plus le nombre de dépassements de seuils locaux est grand. |
| <i>Influence sur la mesure de quantités locales</i> | Mesurer des quantités locales pour des modèles fortement non-linéaires revient à sélectionner implicitement une solution parmi l'ensemble des solutions numériques possibles (avec comme unique source de dispersion l'arithmétique à virgule flottante). C'est une démarche pertinente pour la vérification du fonctionnement informatique du programme, à condition de se limiter alors à un nombre modéré de pas de temps en regard de la manifestation de phénomènes non-linéaires dans le modèle. La mesure de quantité locale à des fins de vérification après un grand nombre de pas de temps pour des modèles complexes fortement non-linéaires n'est pas pertinente. |

Table 60 : Différentes influences de l'arithmétique à virgule flottante sur un algorithme de simulation en dynamique rapide

La Table 61 présente deux tests simples illustrant la relation entre la dispersion dans les résultats issue des variations d'arrondis dans les opérations de sommation et la nature du problème de dynamique rapide simulé. Le

cas linéaire, sans difficulté, est écarté, au profit de deux situations fortement non-linéaires, mais de nature fondamentalement différente. Dans le premier cas, la non-linéarité se manifeste de façon régulière jusqu'à un unique seuil de rupture pour la structure, alors que dans le second cas, elle repose avant tout sur une succession d'instabilités. Dans les deux cas, les simulations parallèles sont réalisées avec le solveur à mémoire distribuée pour 4, 8, 12 et 16 processus MPI.

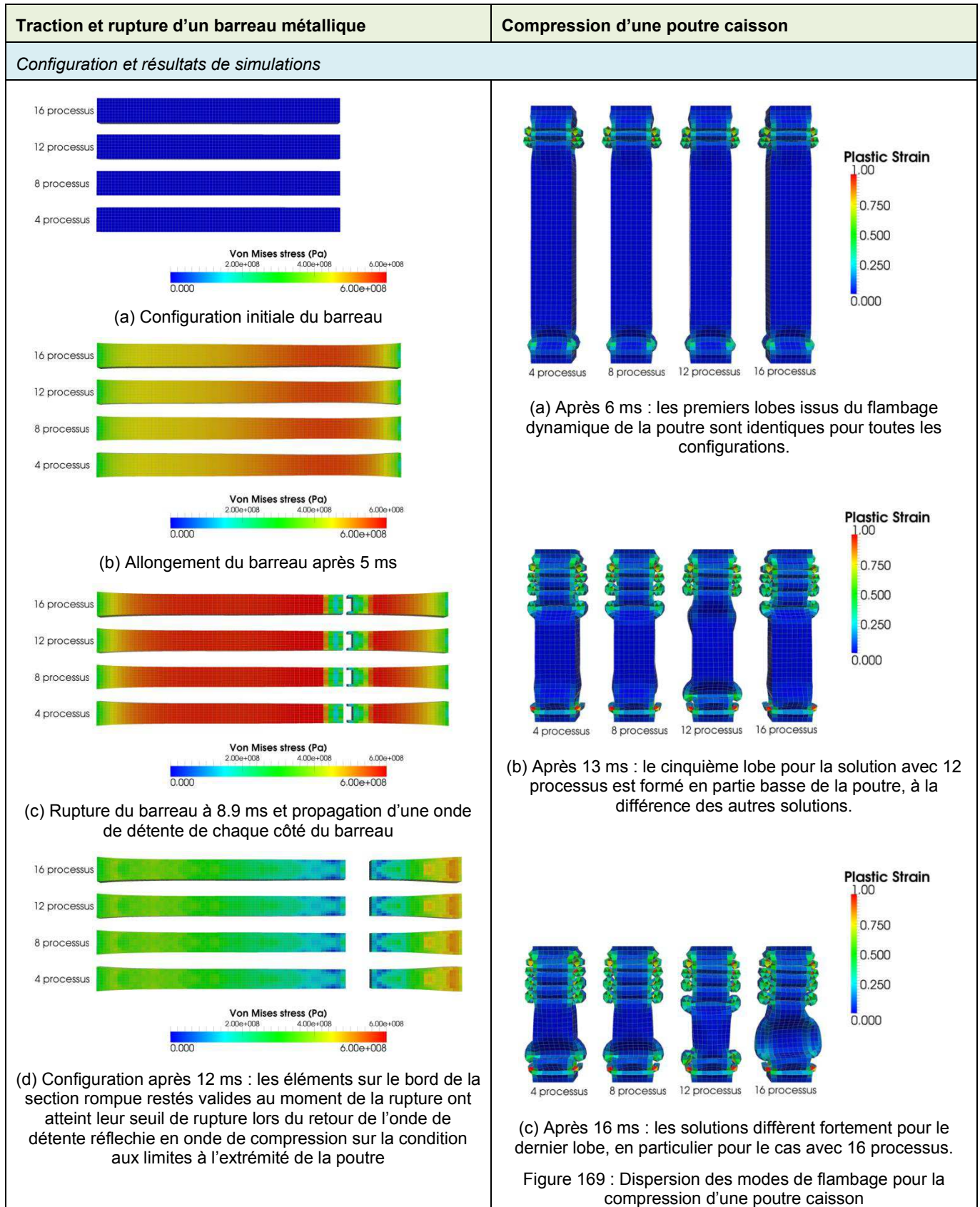
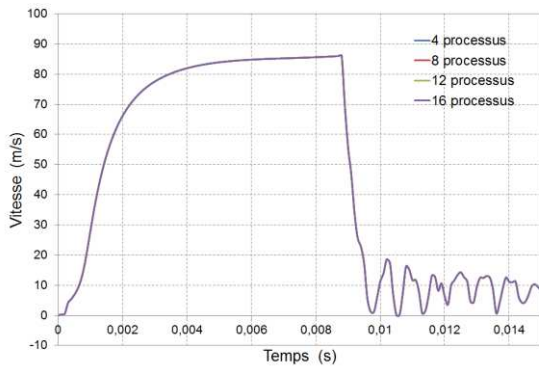


Figure 169 : Dispersion des modes de flambage pour la compression d'une poutre caisson



(e) Vitesse au niveau de la section du barreau rompue

Figure 170 : Traction d'un barreau métallique

Commentaires

On n'observe aucune différence entre les solutions parallèles pour une telle configuration physique, en raison de la stabilité de la solution du système malgré la forte non-linéarité. Dans ce cas, des mesures locales éventuelles sont appropriées, ce que montre la Figure 170, traçant la vitesse au centre du barreau au niveau de la section de rupture au cours du temps pour toutes les exécutions. Toutes les courbes sont confondues, avec un instant de rupture strictement identique dans tous les cas, puis une oscillation libre également identique.

Les premières instabilités sont identiques pour toutes les simulations. A mesure que la longueur intègre de la poutre se réduit, l'espace des solutions bifurquées possibles augmente et on assiste à une dispersion importante sur les deux derniers lobes avant la compression totale de la poutre. Des mesures locales dans la moitié inférieure de la poutre conduiraient logiquement à de fortes variations entre les différentes exécutions. Pourtant, aucune des solutions obtenues ne peut être considérée comme plus juste ou plus fautive que les autres et en choisir une comme la référence n'est pas pertinent.

Table 61 : Influence de l'arithmétique à virgule flottante en fonction de la stabilité physique du problème considéré

Une voie de contournement de l'influence de l'arithmétique à virgule flottante consiste à forcer quelle que soit la configuration de calcul parallèle l'ordre des opérations. Ceci se fait au prix d'une complexité de développement majeure et implique de façon erronée que la solution séquentielle fait référence de manière unique.

La stratégie alternative envisagée est l'analyse de la propagation des erreurs d'arrondis sur les résultats de calcul, pour qualifier les sources de dispersion, distinguer les portions de code générant des pertes de précision importantes et concevoir éventuellement des modifications pertinentes dans la programmation, le tout en préservant les performances du logiciel en termes de temps d'exécution. L'outil dédié, à mettre en œuvre en collaboration avec EDF, est la bibliothèque CADNA (<http://www.lip6.fr/cadna>), du Laboratoire d'Informatique de Paris 6 (LIP6), dont l'utilisation pour le code Telemac-2D (EDF, dédié à la simulation des écoulements à surface libre) est illustrée par la Figure 171 [Denis, 2013].

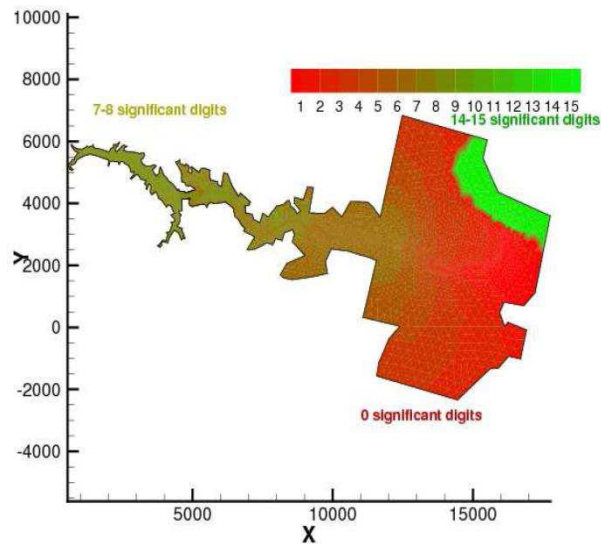


Figure 171 : Représentation d'un résultat en ajoutant le nombre de chiffres significatifs avec lequel il est connu

3. Références

[Casadei et al. (1), 2013]

F. Casadei, P. Díez, F. Verdugo, A Data Structure for Adaptivity in EUROPLEXUS, JRC technical note, 2013.

[Casadei et al. (2), 2013]

F. Casadei, P. Díez, F. Verdugo, An algorithm for mesh refinement and un-refinement in fast transient dynamics, Int. J. Comput. Methods, vol. 10, published online on <http://www.worldscientific.com>, 2013.

[Denis, 2013]

C. Denis, Numerical verification of an industrial code to simulate accurately large scale hydrodynamics events, International Water Journal, vol. 2: 46-51, 2013.

[Goldberg, 1991]

D. Goldberg, What every computer scientist should know about floating-point arithmetic, ACM Computing Surveys, vol. 23(1), 1991.

[Kapra et Dehon, 2007]

N. Kapra, A. Dehon, Optimistic parallelization of floating-point accumulation, Proceedings of the 18th IEEE Symposium on Computer Arithmetics (ARITH'07): 205-216, 2007.

[Liu, 2013]

Y. Liu, Contribution à la vérification et à la validation d'un modèle diphasique bifluide instationnaire, Thèse de doctorat de l'Université Aix-Marseille, 2013.

[Mattson et Strandberg, 2008]

T. Mattson, K. Strandberg, Parallelization and floating point numbers, Intel knowledge base, <http://software.intel.com/en-us/articles/parallelization-and-floating-point-numbers>, 2008.

[Monniaux, 2008]

D. Monniaux, The pitfall of verifying floating-point computations, CNRS, <http://hal.archives-ouvertes.fr/docs/00/28/14/29/PDF/floating-point-article.pdf>, 2008.

[Verdugo, 2013]

F. Verdugo, Error assessment and adaptivity for structural transient dynamics, Thèse de doctorat de l'Université Polytechnique de Catalogne, 2013.

[Villa et al., 2008]

O. Villa, D. Chavarria-mir, V. Gurumoorthi, A. Marquez, S. Krishnamoorthy, Effects of floating-point non-associativity on numerical computations on massively multithreaded systems, High Performance Computing, Pacific Northwest National Laboratory report, 2008.