



HAL
open science

Autour de méthodes numériques pour les couplages multiphysiques et multiéchelles en mécanique des solides

Isabelle Ramière

► **To cite this version:**

Isabelle Ramière. Autour de méthodes numériques pour les couplages multiphysiques et multiéchelles en mécanique des solides. Mécanique des solides [physics.class-ph]. Aix Marseille Université (AMU), 2021. tel-03395792v2

HAL Id: tel-03395792

<https://theses.hal.science/tel-03395792v2>

Submitted on 16 Dec 2021 (v2), last revised 24 Feb 2022 (v3)

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.

MÉMOIRE

en vue de l'obtention de

L'HABILITATION À DIRIGER DES RECHERCHES

Présentée et soutenue publiquement le 11 octobre 2021 par

Isabelle RAMIÈRE

**Autour de méthodes numériques
pour les couplages multiphysiques et multiéchelles
en mécanique des solides**

devant le **JURY** composé de

Président :

GOUT Christian

Professeur à l'INSA de Rouen

Rapporteurs :

ALLAIRE Grégoire

Professeur à l'École Polytechnique

BRANCHERIE Delphine

Professeure à l'UTC

GRAVOUIL Anthony

Professeur à l'INSA de Lyon

Examineurs :

CHAMOIN Ludovic

Professeur à l'ENS-Paris Saclay

LEBON Frédéric

Professeur à Aix-Marseille Université

REMERCIEMENTS

Paradoxalement, me voici arrivée à la dernière page d'écriture de ce manuscrit. C'est avec une émotion certaine que je mets fin à cette aventure de passage d'HDR... Et je n'y serai pas arrivée sans l'aide précieuse de nombreuses personnes que j'aimerais remercier ici.

Tout d'abord je souhaite remercier Grégoire ALLAIRE, Delphine BRANCHERIE et Anthony GRAVOUIL de m'avoir fait l'honneur de rapporter ce travail. J'ai particulièrement apprécié la qualité de leur relecture du manuscrit et les discussions très intéressantes qui en ont découlé le jour de la soutenance.

Un grand merci à Christian GOUT d'avoir présidé mon jury de soutenance. Cela fait plus de 20 ans maintenant que l'on se connaît, et son regard scientifique bienveillant depuis mes études à l'INSA m'a beaucoup apporté.

Merci aussi à Ludovic CHAMOIN d'avoir accepté de faire partie de mon jury, mais également pour ses questions pertinentes et pour sa relecture attentive du manuscrit.

Enfin, je remercie chaleureusement Frédéric LEBON d'avoir été mon tuteur de HDR mais surtout d'être un fabuleux collègue de travail depuis maintenant 10 ans. J'apprécie énormément de collaborer avec toi dans la bonne humeur au travers de nos multiples thésards, mini-symposia mais également autour du laboratoire commun MISTRAL. Merci de rester toujours disponible pour moi !

Je suis ainsi très fière d'avoir rassemblé dans ce jury ces chercheurs de haut vol dans les domaines des mathématiques appliquées et de la mécanique numérique.

Ce travail de recherche ne serait pas ce qu'il est sans la contribution majeure des doctorants et post-doctorants que j'ai eu la chance de pouvoir encadrer : Lauréline BARBIÉ, Hao LIU, Jules FAUQUE, Mourad TEMMAR, Daria KOLIESNIKOVA, Tommaso BARANI, Simon LE BERRE, Louis BELGRAND. Je n'oublie pas non plus les étudiants de Master ou d'école d'ingénieur qui ont réalisé leur stage avec moi. Sachez que j'ai beaucoup apprécié de travailler avec chacun d'entre vous et je vous remercie d'avoir fait un bout de chemin de recherche avec moi.

J'en profite pour saluer David RYCKELYNCK et Nicolas FAVRIE qui m'ont accompagnée dans certains de ces encadrements. Les discussions scientifiques et amicales que nous avons sont toujours très agréables.

Je souhaite aussi remercier mes collègues de travail du CEA, en particulier ceux qui sont ou ont été au Laboratoire de Simulation du comportement du Combustible durant ces 10 dernières années. Je remercie tout particulièrement Renaud MASSON et Bruno MICHEL pour leur travail avisé de relecture de certains chapitres du manuscrit mais surtout pour leur confiance depuis mon arrivée au laboratoire.

J'adresse également un mot de remerciement à ma hiérarchie qui m'a soutenue et encouragée à passer cette habilitation. Je pense particulièrement à Bruno COLLARD, Mireille BAUER, Carole VALOT et Marc DELPECH.

Je voudrais aussi sincèrement remercier les différentes secrétaires pour leur soutien administratif, en particulier Régine BOUSQUET pour son aide infaillible, mais également notre correspondant informatique Vincent FARDEAU pour son soutien technique précieux le jour de la soutenance. Je remercie également Géraldine CALLIER d'Aix-Marseille Université pour son aide, sa disponibilité et sa sympathie fort appréciables dans ce parcours du combattant universitaire.

Last but not least, mes plus profonds remerciements vont à mes proches, famille et amis, pour tout ce qu'ils m'apportent au quotidien. La vie ne serait rien sans eux !

Je pense en particulier à mes parents, mes plus fidèles supporters. Et puis évidemment au club MOTIF : Michel, qui croit en moi (bien plus que moi !) et me soutient dans la vie de tous les jours ; Océane, Flavien et Timothée qui sont de loin ma plus belle réussite et ma plus grande fierté. Je leur dédie ce manuscrit.

TABLE DES MATIÈRES

Préambule	vii
Synthèse des activités de recherche	ix
Curriculum Vitae	xi
Vie de la recherche	xiii
Liste de publications	xvii
Travaux de recherche	1
I Introduction	3
I.1 Simulation du comportement du combustible nucléaire	3
I.2 Principales contributions aux couplages multiphysiques	8
I.3 Principales contributions aux couplages multiéchelles	9
II Autour des couplages multiphysiques	11
II.1 Accélération de convergence de suites vectorielles de point fixe	13
II.2 Réduction d'ordre de modèle pour la mécanique du contact	29
II.3 Modélisation multiphysique couplée du phénomène de rattrapage de jeu dans les réacteurs à neutrons rapides	45
III Autour des couplages multiéchelles	57
III.1 Raffinement adaptatif de maillage multiniveau en mécanique des solides .	59
III.2 Homogénéisation numérique de type éléments finis au carré hybride en mécanique non linéaire	83
IV Perspectives générales	101
Références	103
Bibliographie de l'auteure	103
Bibliographie générale	105
Liste des figures	117

PRÉAMBULE

Mes travaux de recherche concernent la mise en œuvre et le développement de méthodes numériques innovantes pour les codes de calcul en soutien à l'industrie nucléaire. À travers mon parcours professionnel, j'ai ainsi eu la riche expérience de pouvoir mettre à profit mes compétences en mathématiques appliquées au service de différentes physiques de la filière nucléaire (thermohydraulique, génie chimique, mécanique du combustible).

Ce manuscrit d'Habilitation à Diriger des Recherches (HDR) se focalise sur mes travaux de recherche menés au sein du Département d'Études des Combustibles (DEC) du Commissariat à l'Énergie Atomique et aux Énergies Alternatives (CEA) depuis 2009.

Mes contributions s'articulent principalement autour de l'efficacité et de la précision des couplages multiphysiques avec des méthodes d'accélération de convergence des itérations de point fixe et de la réduction d'ordre de modèle pour la mécanique du contact, mais également autour de la mise en œuvre de couplages multiéchelles pour la mécanique des solides et ce pour différents rapports d'échelles : techniques de raffinement adaptatif de maillage de type multigrille local et éléments finis au carré (homogénéisation numérique par champs complets).

Je me suis toujours attachée, notamment au travers des travaux des doctorants que j'ai eu l'opportunité de pouvoir encadrer, à développer des méthodes numériques avec une portée plus large que le contexte industriel à l'origine de ces travaux. Cela demande un travail plus important d'abstraction et de développement, mais permet de bénéficier d'idées émergentes de plusieurs communautés et également de proposer des algorithmes génériques et transverses. C'est dans ce sens que ce manuscrit a été rédigé.

Cependant, je n'ai pas oublié l'application industrielle qui me guidait, car elle permet d'évaluer l'apport des nouvelles méthodologies numériques vis-à-vis des simulations actuelles mais également des données expérimentales. Trop peu de méthodes numériques modernes se confrontent à la réalité industrielle avec toutes ses complexités. Ce travail d'intégration dans la plateforme logicielle industrielle est souvent conséquent et peu valorisable dans la communauté scientifique. Cependant, en plus de répondre concrètement au besoin industriel et de valider les approches proposées, il permet aussi souvent d'enrichir et d'étendre les algorithmes afin de dépasser certaines limites rencontrées en pratique. Ainsi, en plus d'exemples « académiques » de vérification des méthodes proposées, j'ai ajouté dès que possible dans le document des exemples saillants d'applications industrielles.

Ce manuscrit est divisé en deux parties. La première partie est dédiée à la synthèse de mes activités de recherches (publications, encadrements d'étudiants, enseignements, organisations d'évènements scientifiques, . . .), qui se situent à la frontière entre les mathématiques appliquées et la mécanique numérique.

La deuxième partie concerne le mémoire de recherche à proprement parlé. Un chapitre de contexte permet de situer le cadre de mes travaux et les problématiques associées. La synthèse de mes principales contributions est également présentée dans ce chapitre. Les deux chapitres suivants détaillent mes travaux relatifs à la thématique multiphysique et aux couplages multiéchelles respectivement. Chaque section de ces chapitres est consacrée à un axe de recherche bien identifié. J'ai volontairement fait en sorte que ces sections soient les plus autoportantes possible. Elles contiennent notamment une partie introductive permettant de situer le contexte bibliographique et une partie conclusive discutant des directions de recherche. Ainsi, les cinq sections de ce manuscrit peuvent se lire indépendamment, ce qui inclut parfois de légères redondances (notamment dans les équations) dans la lecture séquentielle.

Enfin, en guise de conclusion générale, des perspectives à court et moyen termes sont données.

SYNTHÈSE DES ACTIVITÉS DE
RECHERCHE

CURRICULUM VITAE

ISABELLE RAMIÈRE

née le 23/08/1981

Mariée, 3 enfants (2011, 2015, 2018)

Nationalité française

https://www.researchgate.net/profile/Isabelle_Ramiere

INGÉNIEUR-CHERCHEUR EN MÉTHODES NUMÉRIQUES

Établissement : Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives

Unité de recherche : Direction des énergies,
Institut de recherche sur les systèmes nucléaires pour la production
d'énergie bas carbone,
Département d'études des combustibles,
Service d'études et de simulation des combustibles,
Laboratoire de simulation du comportement des combustibles

Adresse professionnelle : CEA Cadarache
DEC, SESC, LSC
Bâtiment 151
F-13108 Saint-Paul-Lez-Durance
FRANCE

Formation et diplômes

- 2006** **Doctorat de Mathématiques Appliquées** à l'Université Aix-Marseille I.
Mention **Très Honorable**. Directeur : Ph. Angot.
- 2003** Diplôme d'**Ingénieur INSA** (Institut National des Sciences Appliquées) de Rouen.
Département **Génie Mathématique**. **Major de promotion**.
- 2003** **DEA Sciences de l'Ingénieur** à l'I.N.S.A. et à l'Université de Rouen.
Mention **Très Bien**. **Major de promotion**.

Expériences professionnelles

- 2009-act.** CEA (Commissariat à l'Energie Atomique et aux Energies Alternatives) de Cadarache (13). Direction des Énergies (DES) - Département d'Études des Combustibles.
Ingénieur-Chercheur en Méthodes numériques.
Mise en place de méthodes numériques innovantes dans la plateforme logicielle PLEIADES destinée à l'étude du comportement des combustibles nucléaires (co-développement CEA, EDF, Framatome)
Mots-clefs : *Méthodes numériques, Raffinement adaptatif de maillage, Couplages multiphysiques, Couplage multiéchelles, Réduction de modèles.*
- 2017-2019** CEA de Cadarache (13). Direction de l'Énergie Nucléaire (DEN) - Département d'Études des Combustibles.

Responsable de développement de l'application PLEIADES/GERMINAL (version 3)

PLEIADES/GERMINAL : application combustible pour les réacteurs à neutrons rapides refroidis au Sodium (RNR-Na).

Mots-clefs : *Montée en version majeure, mutualisation (modèles, schéma couplage, pré et post traitements) au sein de la plateforme PLEIADES, nouveaux schémas de calculs, nouvelles fonctionnalités numériques.*

2007-08 CEA de Marcoule (30). DEN - Département RadioChimie et Procédés.

Ingénieur-Chercheur en Modélisation.

Modélisation numérique pour les procédés utilisés dans le retraitement des déchets nucléaires (extraction liquide-liquide, précipitation,...).

Mots-clefs : *Modélisation, Méthodes numériques, Analyse de Données, Génie Chimique.*

2006-07 Laboratoire de Modélisation et Imagerie en Géosciences (MIGP) de Pau (64) - UMR 5212.

Ingénieur de Recherche (IR) CNRS en Calcul Scientifique.

Mise en place d'une méthode de domaine fictif pour l'équation des ondes acoustiques. Application à la géophysique.

Mots-clefs : *EDP, Domaines fictifs, Ondes acoustiques, Eléments spectraux, Volumes finis.*

2003-06 CEA de Cadarache (13). DEN - Département des Technologies Nucléaires. Laboratoire LATP de Marseille (13) - UMR 6632. Université Aix-Marseille I.

Doctorante en Mathématiques Appliquées.

Méthodes de domaine fictif pour des problèmes elliptiques avec conditions aux limites générales en vue de la simulation numérique d'écoulements diphasiques.

Mots-clés : *Méthodes de domaine fictif, Problèmes elliptiques, Maillages non-conforme, Raffinement de maillage multiniveau, Eléments finis, Volumes finis.*

Enseignement

2016-act. Polytech'Marseille, Option Structures et Ouvrage, 3ème année cursus ingénieur..

Mécanique non linéaire et Cast3m : 4h de CM et 12h de TD.

2013-2015 INSA de Rouen, Génie Mathématique, 2ème année cursus ingénieur.

Méthodes numériques pour la simulation du combustible nucléaire : 1h de CM, 3h de TD.

VIE DE LA RECHERCHE

Résumé des travaux liés à la recherche

- **1 chapitre d'ouvrage publié.**
- **19 articles publiés** dans des revues internationales à comité de lecture (RICL), 1 article soumis, 2 articles en cours de rédaction.
- **22 actes (proceedings)** de conférences internationales.
- **20 notes techniques CEA.**
↔ voir [Liste des publications](#).
- **4 prix** liés à mes travaux scientifiques.
- Encadrement de **7 étudiants en thèse**, **1 post-doctorant** et **11 étudiants en école d'ingénieur ou master**.
- **Membre du jury de 2 thèses** (hors de mes doctorants).
- **Guest Editor** d'un numéro spécial de la revue Mathematics (MDPI, IF : 2.258).
- **Organisation de mini-symposia dans des congrès nationaux et internationaux** (WCCM2020, ECCM-ECFD2018, WCCM2016, CANUM2014), et d'évènements scientifiques pour le CEA (séminaires techniques et de rencontre, ...).
↔ voir [Sections suivantes](#).
- **Reviewer pour des revues internationales** (Numerical algorithms, CAMWA, IJNME, CMAME, JCAM, IJNMF, JCP, ...).
- **Membre du conseil scientifique du LabCOM MISTRAL** (CEA/LMA Marseille).
- **Membre de groupes de travail** : GT multiphysique IRESNE, GT techniques de couplage, GT compatibilité de codes, GT simulation RNR, GT MISTRAL.

Prix et distinctions

- | | |
|-------------|---|
| 2016 | Prix Jacques Gaussens de la SFEN (Société Française d'Énergie Nucléaire), prix des industriels, destiné à un jeune chercheur de moins de 35 ans, pour mes travaux de recherche autour de méthodes numériques innovantes pour les codes de calcul en soutien à l'industrie nucléaire. |
| 2012 | Prix du meilleur papier dans la catégorie jeune chercheur à la conférence ECT 2012 pour le papier "A Multilevel Technique based on Nested Local Meshes for Nonlinear Mechanics" par Lauréline Barbié, Isabelle Ramière et Frédéric Lebon. |
| 2007 | Prix Jean Bougeois de la SFEN pour mes travaux de Doctorat. |
| 1998 | Lauréate du prix de la vocation scientifique féminine de l'année. |

Encadrement d'étudiants et de post-doctorants

Post-doctorant

- | | |
|-----------------|--|
| 2020-act | Tommaso Barani : <i>Modélisation du transfert de matière par évaporation-condensation sous gradient thermique dans un matériau céramique</i> . Co-encadré avec Bruno Michel, CEA et Nicolas Favrie, IUSTI, Marseille. |
|-----------------|--|

Doctorants

- 2020-act** **Louis Belgrand** : *Modélisation et simulation par éléments finis multi-échelles du comportement thermo-mécanique non linéaire d'un matériau hétérogène*. Directeur de thèse Frédéric Lebon, LMA, Marseille.
- 2020-act** **Simon Le Berre** : *Réduction d'ordre de modèle pour la mécanique du contact frottant*. Directeur de thèse David Ryckelynck, Mines ParisTech.
- 2017-21** **Daria Koliesnikova** : *Raffinement adaptatif automatique de maillage à précision contrôlée dans un contexte multi-échelle pour la mécanique des solides non linéaire*. Directeur de thèse Frédéric Lebon, LMA, Marseille.
- 2016-19** **Mourad Temmar** : *Simulation multiphysique du phénomène de rattrapage du jeu pastille-gaine dans les aiguilles combustibles des réacteurs à neutrons rapides*. Directeurs de thèse Bruno Michel, CEA et Nicolas Favrie, IUSTI, Marseille.
- 2015-18** **Jules Fauque** : *Modèle d'ordre réduit en mécanique du contact. Application à la simulation du comportement des combustibles nucléaires*. Directeur de thèse David Ryckelynck, Mines ParisTech.
- 2013-16** **Hao Liu** : *Stratégie de raffinement automatique de maillage et méthodes multi-grilles locales pour le contact : application à l'interaction mécanique Pastille-Gaine*. Directeur de thèse Frédéric Lebon, LMA, Marseille.
- 2010-13** **Lauréline Barbié** : *Raffinement de maillage multi-grille local en vue de la simulation 3D du combustible nucléaire des Réacteurs à Eau sous Pression*. Directeur de thèse Frédéric Lebon, LMA, Marseille.

Stagiaires

- 2021** **Arthur Laurent** (3ème année SeaTech - Filière MOCA, Toulon), *Raffinement adaptatif de maillage dynamique pour la modélisation 3D*, en collaboration avec G. Latu, CEA-Cadarache, Stage de 6 mois.
- 2020** **Arthur Bichon** (Master 2 CEPS - parcours calcul scientifique et EDP, Marseille), *Automatisation du traitement des degrés de liberté Éléments Finis pour la méthode d'Hyper-Réduction Hybride*, en collaboration avec J. Fauque, CEA-Cadarache, Stage de 6 mois.
- 2020** **Van Kien Laurent Lê** (3ème année ENSEIRB MATMECA Bordeaux), *Simulation 3D HPC mécanique sur maillage adaptatif hexaédrique*, en collaboration avec G. Latu, CEA-Cadarache, Stage de 6 mois.
- 2020** **Chloé Brusq** (3ème année Polytech'Marseille), *Etude des champs locaux d'un calcul multi-échelles de type EF²*, en collaboration avec R. Largenton, EDF R&D, Stage de 6 mois.
- 2017** **Anaïs Rat** (année de césure entre 2ème et 3ème année, Centrale Marseille), *Approche multi-échelles de type EF² pour la simulation des crayons combustibles des réacteurs nucléaires à eau sous pression*, en collaboration avec R. Masson, CEA-Cadarache, Stage de 6 mois.
- 2015** **Jules Fauque** (3ème année Polytech'Nice-Sophia - M2 master P3M, Master Physique des Matériaux, Mécanique et Modélisation Numérique), *Mise en place d'un modèle d'ordre réduit pour la simulation du comportement mécanique des combustibles nucléaires*, Stage de 6 mois.
- 2012** **Maxime Touron** (2ème année ENSEIRB MATMECA Bordeaux), *Utilisation d'une estimation dans un calcul non-linéaire CAST3M. Application au couplage multi-physique*, Stage de 6 mois.

- 2012** **Pierre Brisset** (Master 1 - Paris Sud), *Développement d'une méthode de décomposition de domaine dans un calcul mécanique CAST3M*, en collaboration avec L. Barbié, CEA-Cadarache, Stage de 5 mois.
- 2010** **Willy Leclerc** (Master 2 Recherche - Caen). *Développement de méthodes multi-grilles locales pour la modélisation 3D de l'interaction mécanique pastille/gaine*, en collaboration avec J. Sercombe, CEA-Cadarache, Stage de 5 mois.
- 2008** **Nicolas Beudez** (2ème année ISITV Toulon). *Analyse de données expérimentales servant au développement de modèles physico-chimiques : recherche d'une méthode pour la détection automatique de valeurs aberrantes*, en collaboration avec H. Roussel, CEA-Marcoule, Stage de 3 mois.
- 2008** **Jaume Benoit** (2ème année Polytech Clermont-Ferrand). *Contribution à une plateforme numérique de simulation d'une opération de précipitation*, en collaboration avec M. Bertrand, CEA-Marcoule, Stage de 3 mois.

Participation à des jurys de thèses (hors de mes doctorants)

- Jan 2021** Examinatrice de la thèse de **Samy Mokhtari** (École des ponts ParisTech). *A wavelet-based multi-scale and homogenized modeling for pressure waves propagation in congested media*, thèse effectuée sous la direction de Pierre Argoul.
- Juin 2019** Examinatrice de la thèse d'**Emilien Garcia** (École Centrale de Marseille). *Approche non-linéaire du monitoring de forage : un espoir de progrès pour la commande en surface ?*, thèse effectuée sous la direction de Jacques Liandrat et Philippe Dufourcq.

Edition d'ouvrage scientifique

- 2021** **Advanced Numerical Methods in Computational Solid Mechanics**, Special Issue of *Mathematics*, MDPI (IF : 2.258).
Guest Editor I. Ramière (CEA) et F. Lebon (Aix-Marseille Université).
www.mdpi.com/journal/mathematics/special_issues/Numer_Meth_Comp_SolMech

Organisation d'évènements scientifiques

- 2022** Co-organisation du **mini-symposium « Multi-scale numerical methods for non-linear solids problems »** à **WCCM 2022** à Yokohama, Japon.
- 2021** Co-organisation du **troisième séminaire sur les méthodes numériques au CEA Cadarache** sur le thème « *Méthodes de Boltzmann sur réseau* ».
- 2020** Co-organisation du **mini-symposium « Recent advances in immersed boundary, fictitious domain and unfitted discretization methods »** à **WCCM 2020** à Paris, France.
- 2019** Co-organisation du **deuxième séminaire sur les méthodes numériques au CEA Cadarache** sur le thème « *Méthodes de résolution adaptatives* ».
- 2018** Co-organisation **mini-symposium « Recent advances in immersed boundary and fictitious domain methods »** à **ECCM-ECFD 2018** à Glasgow, UK.
- 2018** Co-organisation du **premier séminaire sur les méthodes numériques au CEA Cadarache** sur le thème « *Méthodes numériques multi-échelles* ».

-
- 2016** Co-organisation du **mini-symposium « Advanced Approaches for Mesh Refinement and Error Estimations in Mechanics and Engineering »** à **WCCM2016** à Séoul, Corée du Sud.
- 2015** Co-organisation du **séminaire rencontre CEA/I2M sur les mathématiques appliquées**.
- 2014** Co-organisation des **journées « Calculs de structures »** dans le cadre du **protocole d'accord CEA Cadarache - LMA CNRS Marseille**.
- 2014** Organisation du **mini-symposium « Stratégies numériques pour traiter des problèmes industriels multi-échelles »** au **CANUM 2014** à Carry-le-Rouet, France.
- 2010-act.** Nombreuses **interventions et animations** lors de journées d'accueil de lycéens au CEA de Cadarache.

LISTE DE PUBLICATIONS

Chapitre d'ouvrage

- [B1] B. MICHEL, I. RAMIÈRE, I. VIALARD, C. INTROÏNI, M. LAINET, N. CHAUVIN, V. MARELLE, A. BOULORE, T. HELFER, R. MASSON, J. SERCOMBE, J.-C. DUMAS, L. NOIROT, S. BERNAUD, *Chapter 9 - Two fuel performance codes of the PLEIADES platform : ALCYONE and GERMINAL*, Nuclear Power Plant Design and Analysis Codes : Development, Validation, and Application, pp. 207-233, Woodhead Publishing Series in Energy, Woodhead Publishing, 2021, [doi:10.1016/B978-0-12-818190-4.00009-7](https://doi.org/10.1016/B978-0-12-818190-4.00009-7).

Articles publiés dans des revues internationales à comité de lecture

- [A1] T. BARANI, I. RAMIÈRE and B. MICHEL. *Analysis of fabrication and crack-induced porosity migration in mixed oxide fuels for sodium fast reactors by the finite element method*, Journal of Nuclear Materials, volume 558, 153341, 2022, [doi:10.1016/j.jnucmat.2021.153341](https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2021.153341).
- [A2] C. INTROÏNI, J. SERCOMBE, I. RAMIÈRE and R. LE TELLIER. *Phase-field modeling with the TAF-ID of incipient melting and oxygen transport in nuclear fuel during power transients*, Journal of Nuclear Materials, volume 556, 153173, 2021, [doi:10.1016/j.jnucmat.2021.153173](https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2021.153173).
- [A3] D. KOLIESNIKOVA, I. RAMIÈRE and F. LEBON. *A unified framework for the computational comparison of adaptive mesh refinement strategies for all-quadrilateral and all-hexahedral meshes : locally adaptive multigrid methods versus h-adaptive methods*, Journal of Computational Physics, volume 437, 110310, 2021, [doi:10.1016/j.jcp.2021.110310](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2021.110310).
- [A4] D. KOLIESNIKOVA, I. RAMIÈRE and F. LEBON. *Analytical comparison of two multiscale coupling methods for nonlinear solid mechanics*, Journal of Applied Mechanics, volume 87(9), 094501, 2020, [doi:10.1115/1.4047259](https://doi.org/10.1115/1.4047259).
- [A5] M. TEMMAR, B. MICHEL, I. RAMIÈRE and N. FAVRIE. *Multi-physics modelling of the pellet-to-cladding gap closure phenomenon for SFR fuel performance codes*, Journal of Nuclear Materials, volume 529, 151909, 2020, [doi:10.1016/j.jnucmat.2019.151909](https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2019.151909).
- [A6] I. RAMIÈRE, H. LIU and F. LEBON. *Original stopping criteria associated to multilevel adaptive mesh refinement for problems with local singularities*, Computational Mechanics, volume 64(3), pp. 645-661, 2019, [doi:10.1007/s00466-019-01674-7](https://doi.org/10.1007/s00466-019-01674-7).
- [A7] M. LAINET, B. MICHEL, J.-C. DUMAS, M. PELLETIER and I. RAMIÈRE. *GERMINAL, a fuel performance code of PLEIADES platform to simulate the in-pile behaviour of mixed oxide fuel pins for sodium-cooled fast reactors*, Journal of Nuclear Materials, volume 516, pp. 30-53, 2019, [doi:10.1016/j.jnucmat.2018.12.030](https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2018.12.030).
- [A8] J. FAUQUE, I. RAMIÈRE and D. RYCKELYNCK. *An efficient hybrid hyper-reduced model for contact mechanics problems*, International Journal for Numerical Methods in Engineering, volume 115 (1), pp. 117-139, 2018, [doi:10.1002/nme.5798](https://doi.org/10.1002/nme.5798).
- [A9] B. MICHEL, T. HELFER, I. RAMIÈRE and C. ESNOUL. *A new numerical methodology for simulation of unstable crack growth in brittle materials*, Engineering Fracture Mechanics, volume 188, pp.126-150, 2018, [doi:10.1016/j.engfracmech.2017.08.009](https://doi.org/10.1016/j.engfracmech.2017.08.009).
- [A10] H. LIU, I. RAMIÈRE and F. LEBON. *On the coupling of local multilevel mesh refinement and ZZ methods for unilateral frictional contact problems in elastostatics*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, volume 323, pp.1-26, 2017, [doi:10.1016/j.cma.2017.04.011](https://doi.org/10.1016/j.cma.2017.04.011)

- [A11] B. MICHEL, T. HELFER, I. RAMIÈRE and C. ESNOUL . *3D Continuum Damage Approach for Simulation of Crack Initiation and Growth in Ceramic Materials*, Key Engineering Materials, volume 713, pp. 155-158, 2016, [doi:10.4028/www.scientific.net/KEM.713.155](https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/KEM.713.155).
- [A12] I. RAMIÈRE and T. HELFER. *Iterative residual-based vector methods to accelerate fixed point iterations*, Computers and Mathematics with Applications, volume 70 (9), pp.2210-2226, 2015, [doi:10.1016/j.camwa.2015.08.025](https://doi.org/10.1016/j.camwa.2015.08.025).
- [A13] L. BARBIÉ, I. RAMIÈRE and F. LEBON. *An automatic multilevel refinement technique based on nested local meshes for nonlinear mechanics*, Computers and Structures, volume 147, pp.14-25, 2015, [doi:10.1016/j.compstruc.2014.10.008](https://doi.org/10.1016/j.compstruc.2014.10.008).
- [A14] L. BARBIÉ, I. RAMIÈRE and F. LEBON. *Strategies around the local defect correction multi-level refinement method for three-dimensional linear elastic problems*, Computers and Structures, volume 130, pp.73-90, 2014, [doi:10.1016/j.compstruc.2013.10.008](https://doi.org/10.1016/j.compstruc.2013.10.008).
- [A15] M. BELLIARD and I. RAMIÈRE. *Fictitious domain methods for two-phase flow energy balance computations in nuclear components*, International Journal for Numerical Methods in Fluids, vol. 68 (8), pp. 939-957, 2012, [doi:10.1002/fld.2587](https://doi.org/10.1002/fld.2587).
- [A16] S. PICART, I. RAMIÈRE, H. MOKHTARI and I. JOBELIN. *Experimental Characterization and Modelization of Ion Exchange Kinetics for a Carboxylic Resin in Infinite Solution Volume Conditions. Application to Monovalent-Trivalent Cations Exchange*, The Journal of Physical Chemistry B, vol. 114 (34), pp. 11027-11038, 2010, [doi:10.1021/jp102120m](https://doi.org/10.1021/jp102120m).
- [A17] I. RAMIÈRE. *Convergence analysis of the Q_1 -finite element method for elliptic problems with non-boundary fitted meshes*, International Journal for Numerical Methods in Engineering, vol. 75 (9), pp. 1007-1052, 2008, [doi:10.1002/nme.2278](https://doi.org/10.1002/nme.2278).
- [A18] I. RAMIÈRE, Ph. ANGOT and M. BELLIARD. *A general fictitious domain approach with immersed jumps and multilevel nested structured meshes*, Journal of Computational Physics, vol. 225 (2), pp. 1347-1387, 2007, [doi:10.1016/j.jcp.2007.01.026](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2007.01.026).
- [A19] I. RAMIÈRE, Ph. ANGOT and M. BELLIARD. *A fictitious domain approach with spread interface for elliptic problems with general boundary conditions*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, vol. 196 (4-6), pp. 766-781, 2007, [doi:10.1016/j.cma.2006.05.012](https://doi.org/10.1016/j.cma.2006.05.012).

Article soumis pour publication

- [S1] C. RUIZ, N. LEBAZ, I. RAMIÈRE, D. MANGIN, and M. BERTRAND. *Fixed point convergence and acceleration for steady state population balance modelling of precipitation processes : application to neodymium oxalate*, soumis, juillet 2021.

Articles en cours de rédaction

- [R1] D. KOLIESNIKOVA, I. RAMIÈRE and F. LEBON. *Fully automatic multigrid adaptive mesh refinement strategy with controlled accuracy for nonlinear quasi-static problems*, en preparation, 2021.
- [R2] I. RAMIÈRE, R. MASSON and S. BERNAUD. *A full-field multiscale mechanical resolution within a multiphysics coupling scheme for heterogeneous material behaviour simulation*, en preparation, 2021.
- [R3] J. FAUQUE, I. RAMIÈRE and D. RYCKELYNCK. *Hybrid hyper-reduced modelling for nonlinear materials in contact*, en preparation, 2021.

Thèse

- [T1] I. RAMIÈRE, *Méthodes de domaine fictif pour des problèmes elliptiques avec conditions aux limites générales en vue de la simulation numérique d'écoulements diphasiques*, tel-00122916, Université de Provence, Aix-Marseille I, 2006.

Actes de conférences

- [P1] D. KOLIESNIKOVA, I. RAMIÈRE and F. LEBON, *Automatic Adaptive Mesh Refinement with controlled accuracy in a multiscale context for Nonlinear Solid Mechanics*, International Conference Nuclear Energy for New Europe, NENE 2021.
Prix de thèse ENEN 2021.
- [P2] D. KOLIESNIKOVA, I. RAMIÈRE and F. LEBON, *Comparaison conceptuelle et algorithmique de la méthode multi-grilles Local Defect Correction et de la méthode d'homogénéisation numérique de type EF^2 -hybride*, Journée Scientifique et Technique «Homogénéisation et calcul multi- échelles», JST 2019.
- [P3] D. KOLIESNIKOVA, I. RAMIÈRE and F. LEBON, *Étude comparative de la méthode Local Defect Correction et des méthodes h-adaptatives*, 14ème Colloque National en Calcul des Structures, CSMA 2019.
- [P4] D. KOLIESNIKOVA, I. RAMIÈRE and F. LEBON, *Comparative study of Local Defect Correction and h-adaptive methods*, 13th International Conference on Computational Structures Technology, CST 2018.
- [P5] H. LIU, I. RAMIÈRE and F. LEBON. *A multilevel numerical method coupling LDC and ZZ methods for frictional contact problems in elastostatics*, 3rd International Conference on Multiscale Computational Methods for Solids and Fluids, ECCOMAS MSF 2017.
- [P6] B. MICHEL, M. TEMMAR, M. LAINET, I. RAMIÈRE, M. PELLETIER and JC. DUMAS. *3D simulation in the PLEIADES software environment for Sodium Fast Reactor fuel pin behavior under irradiation*, International Conference on Fast Reactors and Related Fuel Cycles : Next Generation Nuclear Systems for Sustainable Development, FR17_IAEA-CN-245-223, 2017.
- [P7] I. RAMIÈRE, R. MASSON, B. MICHEL and S. BERNAUD. *Un schéma de calcul multi-échelles de type Éléments Finis au carré pour la simulation de combustibles nucléaires hétérogènes*, 13ème Colloque National en Calcul des Structures, CSMA 2017.
- [P8] T. HELFER, O. FANDEUR, D. HABOUSSA, D. DELOISON, O. JAMOND, R. MUNIER, L. BERTHON, É. CASTELIER and I. RAMIÈRE. *New functionalities of the 3.0 version of TFEL, MFront and MTest*, 13ème Colloque National en Calcul des Structures, CSMA 2017.
- [P9] B. MICHEL, T. HELFER, I. RAMIÈRE and C. ESNOUL . *3D Continuum Damage Approach for Simulation of Crack Initiation and Growth in Ceramic Materials*, 15th International Conference on Fracture and Damage Mechanics, 2016.
- [P10] V. MARELLE, P. GOLDBRONN, S. BERNAUD, É. CASTELIER, J. JULIEN, K. NKONGA, L. NOIROT and I. RAMIÈRE. *New developments in ALCYONE 2.0 fuel performance code*, Paper 17876, TOP FUEL 2016.
- [P11] H. LIU, I. RAMIÈRE et F. LEBON. *Stratégie de raffinement automatique de maillage multi-grille pour la simulation de concentrations de contraintes*, Congrès Français de Mécanique, CFM 2015.
- [P12] L. BARBIÉ, I. RAMIÈRE and F. LEBON. *A Multilevel Technique based on Nested Local Meshes for Nonlinear Mechanics*, Eighth International Conference on Engineering Computational Technology, Civil-Comp Press, B.H.V. Topping, (Editor), Stirlingshire, UK, Paper

- 88, 2012. doi :10.4203/ccp.100.88.
Prix du meilleur papier dans la catégorie jeune chercheur.
- [P13] B. MICHEL, C. NONON, J. SERCOMBE, F. MICHEL, V. MARELLE, I. RAMIÈRE. *Simulation of the Pellet Cladding Interaction Phenomenon with the PLEIADES Fuel Performance Software Environment*, in American Institute of Physics (AIP) Conference Proceedings, 2012.
- [P14] L. BARBIÉ, I. RAMIÈRE and F. LEBON. *AMR methods in solids mechanics for pellet-cladding interaction modelling*, in D. Aubry, P. Diez, B. Tie, and N. Parés, editors, Adaptive Modeling and Simulation 2011, pp. 70-81, 2011.
- [P15] S. PICART, I. RAMIÈRE, H. MOKHTARI and I. JOBELIN. *Preparation of minor actinides targets or blankets by means of ionic exchange resin*, Actinides 2009, IOP Conference Series : Materials Science and Engineering, Volume 9, Numéro 1, 2010.
- [P16] S. PICART, I. RAMIÈRE, H. MOKHTARI and I. JOBELIN. *Preparation of minor actinides targets or blankets by the mean of Ionic Exchange Resin*, Paper 9802, Global 2009.
- [P17] S. PICART, H. MOKHTARI and I. RAMIÈRE. *Modeling of the ionic exchange between a weak acid resin in its ammonium form and a minor actinide*, Plutonium Futures “The Science” 2008.
- [P18] M. BELLIARD and I. RAMIÈRE. *Fictitious domain simulations for the two-phase flow energy balance of the Clotaire Steam Generator mock-up*, NURETH12 (12th International Topical Meeting on Nuclear Thermal-Hydraulics), Paper 6, 2007.
- [P19] I. RAMIÈRE, M. BELLIARD and Ph. ANGOT. *On the simulation of Nuclear Power Plant components using a fictitious domain approach*, NURETH11 (11th International Topical Meeting on Nuclear Thermal-Hydraulics), Paper 193, 2005.
- [P20] Ph. ANGOT, H. LOMENÈDE and I. RAMIÈRE. *A general fictitious domain method with non-conforming structured mesh*, Finite Volume for Complex Applications IV, Problems and Perspectives, Ed. F. Benkhaldoun, D. Ouazar, S. Raghay, Hermes Science, pp. 261 - 272, 2005.
- [P21] I. RAMIÈRE, Ph. ANGOT and M. BELLIARD. *Fictitious domain methods to solve convection-diffusion problems with general boundary conditions*, 17th Computational Fluid Dynamics Conference, AIAA, Paper 2005-4709, 2005.
- [P22] C. GOUT and I. RAMIÈRE. *Surface Approximation From Rapidly Varying Bathymetric Data*, IEEE International Geoscience and Remote Sensing Symposium, vol. 4, pp. IV : 2679 - 2681, 2003.

Communications à conférences sans actes

- [C1] D. KOLIESNIKOVA, I. RAMIÈRE and F. LEBON, *Adaptive multigrid Local Defect Correction method for nonlinear solid mechanics*, 14th World Congress on Computational Mechanics, WCCM 2020.
- [C2] C. INTROÏNI, J. SERCOMBE, I. RAMIÈRE and R. LE TELLIER, *Development in the PLEIADES/ALCYONE fuel performance code of a phase-field approach to model incipient fuel melting during power transients*, the 6th Nuclear Materials Conference, NuMat2020.
- [C3] J. FAUQUE, I. RAMIÈRE and D. RYCKELYNCK. *Hybrid hyper-reduction method applied to contact mechanics with non-linear material behavior*, 13th World Congress on Computational Mechanics, WCCM 2018.
- [C4] M. TEMMAR, B. MICHEL, I. RAMIÈRE, N. FAVRIE. *Multi-physics modelling of the pellet cladding gap closure phenomenon for the GERMINAL SFR fuel performance code*, 6th European Conference on Computational Mechanics (ECCM6) and 7th European Conference on Computational Fluid Dynamics (ECFD 7), ECCM-ECFD 2018.

- [C5] I. RAMIÈRE, F. LEBON and D. KOLIESNIKOVA. *Adaptive Mesh Refinement approaches for First Order Non-Fitted Boundary Conditions methods*, 6th European Conference on Computational Mechanics (ECCM6) and 7th European Conference on Computational Fluid Dynamics (ECFD 7), ECCM-ECFD 2018.
- [C6] J. FAUQUE, I. RAMIÈRE and D. RYCKELYNCK. *Hybrid hyper-reduced modeling for contact problems in elastostatics*, IUTAM Symposium on Model order reduction of coupled systems, MORCOS 2018.
- [C7] R. MASSON, I. RAMIÈRE, S. BERNAUD, P. GOLDBRONN and B. MICHEL. *Modelling microstructural effects on the fuel element behaviour with the release V2 of ALCYONE fuel performance code*, Materials Modelling and Simulation for Nuclear Fuels, MMSNF 2017.
- [C8] M. TEMMAR, B. MICHEL, M. LAINET, I. RAMIÈRE, M. PELLETIER, JC. DUMAS, N. FAVRIE and S. GAVRILYUK. *3D simulation and modelling of the pellet cladding gap closure phenomenon for the GERMINAL SFR fuel performance code*, Second Workshop on Research into Nuclear Fuel and cladding in Europe, NuFuel 2017.
- [C9] I. RAMIÈRE, J. FAUQUE and D. RYCKELYNCK. *Méthode d'hyper-réduction pour la mécanique du contact. Application à la simulation du combustible nucléaire*, Congrès Français de Mécanique, Journée AFM, CFM 2017.
- [C10] I. RAMIÈRE and T. HELFER. *Acceleration methods for fixed point coupled problems iterations*, VII International Conference on Coupled Problems in Science and Engineering, COUPLED 2017.
- [C11] J. FAUQUE, I. RAMIÈRE and D. RYCKELYNCK. *Hyper-Reduction method for mechanical contact problems*, VII International Conference on Coupled Problems in Science and Engineering, COUPLED 2017.
- [C12] J. FAUQUE, I. RAMIÈRE and D. RYCKELYNCK. *Hyper-Reduction method for mechanical contact problems*, 3rd Workshop on Order Reduction Methods, WORM 2016.
- [C13] H. LIU, I. RAMIÈRE and F. LEBON. *On the coupling of local multigrid and ZZ methods for unilateral contact problems in elastostatics*, 12th World Congress on Computational Mechanics, WCCM 2016.
- [C14] T. HELFER, J. SERCOMBE, B. MICHEL, I. RAMIÈRE, M. SALVO, O. FANDEUR, P. GOLDBRONN, V. MARELLE and É. FÉDÉRICI. *Recent improvements of the fuel thermomechanical modelling in the PLEIADES Platform to better simulate accidental transients conditions using the Alcyone fuel performance code*, First Workshop on Research into Nuclear Fuel in Europe and Materials Modeling and Simulation for Nuclear Fuels Workshop, NuFuel & MMSNF 2015.
- [C15] H. LIU, I. RAMIÈRE and F. LEBON. *Local Defect Correction multigrid Method coupled with the Zienkiewicz-Zhu a posteriori error estimator in elastostatics Solid Mechanics*, 17th Copper Mountain Conference on Multigrid Methods, 2015.
- [C16] I. RAMIÈRE, H. LIU, L. BARBIÉ and F. LEBON. *Comparisons Between a Local Multigrid Method and H-Adaptive Methods in Solid Mechanics*, 4th European Seminar on Computing, ESCO 2014.
- [C17] I. RAMIÈRE, L. Barbié et F. Lebon. *Méthode de raffinement local de maillage multi-niveaux en mécanique des solides non-linéaire. Application à l'interaction pastille-gaine*, Congrès National d'Analyse Numérique, CANUM 2014.
- [C18] I. RAMIÈRE. *Acceleration of the fixed point algorithm for coupling multi-physics models into an industrial simulation software*, 10th World Congress on Computational Mechanics, Mini-Symposium 034 : Computational Mechanics in Extreme Loading Environments, Paper 19043, WCCM 2012.
- [C19] B. MICHEL, I. RAMIÈRE, J. SERCOMBE, M. AGARD and C. BONHOMME. *PLEIADES : multi-concept nuclear fuel modelling*, IV European Conference on Computational Mechanics Solids, Structures and Coupled Problems in Engineering, ECCM 2010.

- [C20] I. RAMIÈRE. *General fictitious domain approaches with non-boundary fitted and multilevel nested structured meshes : theory and applications*, The Mathematics of Finite Elements and Applications, Mini-symposium “Finite Elements and Geometry”, MAFELAP 2009.
- [C21] I. RAMIÈRE, M. BELLIARD et Ph. ANGOT. *On the simulation of Nuclear Power Plant components using a fictitious domain approach*, Séminaire de la mécanique des fluides, IHP, 2005.
- [C22] I. RAMIÈRE, M. BELLIARD et Ph. ANGOT. *Résolution d’un problème de diffusion à l’aide d’une méthode de domaine fictif*, Congrès National d’Analyse Numérique, CANUM 2004.

Communauté scientifique

- [CS1] I. RAMIÈRE. *Hyper-réduction d’ordre de modèles pour la mécanique du contact*, Les clefs du CEA, numéro 70 « Sacrées mathématiques », Mars 2020.
- [CS2] I. RAMIÈRE. *Accélération de convergence pour les suites vectorielles de point fixe*, Les clefs du CEA, numéro 70 « Sacrées mathématiques », Mars 2020.
- [CS3] I. RAMIÈRE. *La méthode FIC-EBC : une méthode de domaine fictif avec sauts immergés et raffinement de maillage multi-niveaux*, MATAPLI 89, SMAI, Juin 2009.

Notes techniques CEA

- [NT1] P. GOLDBRONN, A. BOULORÉ, É. CASTELIER, J. FAUQUE, C. FILLAUX, T. HELFER, V. MARELLE, K. MER-NKONGA, B. MICHEL, L. NOIROT, I. RAMIÈRE, J. SERCOMBE. *ALCYONE V2.1.0 : Notice de présentation*, DES/IRESNE/DEC/SESC/LSC/21-012, Septembre 2021.
- [NT2] I. RAMIÈRE, N. SEILER, C. VAGLIO-GAUDARD, O. PROVITINA. *Analyse des activités multiphysiques et des moyens associés dans l’IRESNE*, DES/IRESNE/DIR 2021-03 Indice A, Juillet 2021.
- [NT3] G. LATU, T. HELFER, I. RAMIÈRE, S. BERNAUD, M. JOSIEN. *Evaluation technique préliminaire de Mefisto au regard des besoins IRESNE/DEC*, DES/IRESNE/DEC/SESC/LSC NT 21-006, Mai 2021.
- [NT4] C. PATRICOT et I. RAMIÈRE. *Note de synthèse du GT techniques de couplage : revue des méthodes de résolution de systèmes non linéaires utiles pour les couplages multi-physiques*, DES/ISAS/DM2S/SERMA/LPEC/2020-66358, Juin 2020.
- [NT5] I. RAMIÈRE. *Plan de développement de GERMINAL dans l’architecture 2 de PLEIADES et moyens nécessaires associés*, DEN/CAD/DEC/SESC/LSC/17-020, Novembre 2017.
- [NT6] I. RAMIÈRE, S. BERNAUD, R. MASSON. *Mise en place d’un schéma de calcul mécanique à deux échelles (EF^2) dans PLEIADES V2.0*, DEN/CAD/DEC/SESC/LSC/17-015, Août 2017.
- [NT7] P. GOLDBRONN, A. BOULORÉ, É. CASTELIER, C. FILLAUX, T. HELFER, J. JULIEN, V. MARELLE, R. MASSON, K. MER-NKONGA, B. MICHEL, L. NOIROT, I. RAMIÈRE, J. SERCOMBE, M. CASELLA. *ALCYONE V2.0 : Notice de présentation*, DEN/CAD/DEC/SESC/LSC/16-031, Décembre 2016.
- [NT8] H. LIU, I. RAMIÈRE, F. LEBON. *Estimateurs d’erreur a posteriori et raffinement automatique de maillage*, DEN/CAD/DEC/SESC/LSC/16-006, Mars 2016.
- [NT9] V. MARELLE, V. BOUINEAU, A. BOULORE, C. FILLAUX, P. GOLDBRONN, T. HELFER, J. JULIEN, R. MASSON, B. MICHEL, L. NOIROT, I. RAMIÈRE. *Alcyone V1.4 : Notice de présentation*, DEN/CAD/DEC/SESC/LSC/13-034, Décembre 2013.

- [NT10] I. RAMIÈRE et S. BERNAUD. *Vers la mutualisation des schémas de couplage de la plateforme PLEIADES*, DEN/CAD/DEC/SESC/LSC/12-028, Novembre 2012.
- [NT11] L. BARBIÉ et I. RAMIÈRE. *Développement de méthodes multi-grilles locales pour la modélisation 3D de problèmes élastiques issus de l'interaction mécanique pastille-gaine*, DEN/CAD/DEC/SESC/LSC/12-012, Juillet 2012.
- [NT12] I. RAMIÈRE. *Etat de l'art des algorithmes de couplage multi-physique dans les applications de la plate-forme PLEIADES*, DEN/DEC/SESC/LSC/10-013, Mars 2010.
- [NT13] C. STRUZIK, F. MICHEL, N. BOUHAMOU, E. GOHIER, V. MARELLE, B. MICHEL, I. RAMIÈRE, J. SERCOMBE. *Dossier de validation de la version 1.2 d'ALCYONE*, DEN/DEC/SESC/DIR/09-004, Octobre 2009.
- [NT14] I. RAMIÈRE. *Etude des lois de masse volumique et de gonflement de PAREX*, DEN/DRCP/SCPS/2008/27, Novembre 2008.
- [NT15] I. RAMIÈRE. *Manuel d'utilisation de PROGVALCRIT, programme de lancement automatique de calculs PAREX pour les études de sensibilité*, DEN/DRCP/SCPS/2008/07, Février 2008.
- [NT16] I. RAMIÈRE. *Dossier de programmation de PROGVALCRIT, programme de lancement automatique de calculs PAREX pour les études de sensibilité*, DEN/DRCP/SCPS/LCSE/-2008/07, Février 2008.
- [NT17] M. MONTUIR et I. RAMIÈRE. *Analyse de sensibilité de l'atelier T4 de purification du plutonium de l'usine UP3 de La Hague*, DEN/DRCP/SCPS/2007/19, Juillet 2007.
- [NT18] M. BELLIARD et I. RAMIÈRE. *A FE fictitious domain method based on surface integrals in the Neptune/pyGene software*, DEN/DTN/SMTM/LMTR/2005-17, Janvier 2005.
- [NT19] I. RAMIÈRE et M. BELLIARD. *Using a fictitious domain approach for solving a diffusion problem*, DEN/DTN/SMTM/LMTR/2004-97, Novembre 2004.
- [NT20] I. RAMIÈRE et M. BELLIARD. *Etablissement des équations homogénéisées*, NT/DTN/SMTM/2004-13, Mars 2004

Note C.N.R.S.

- [N1] I. RAMIÈRE. *Fictitious domain methods for wave equations. Application to geophysical problems*, MIPG, Pau, Mars 2007.

TRAVAUX DE RECHERCHE

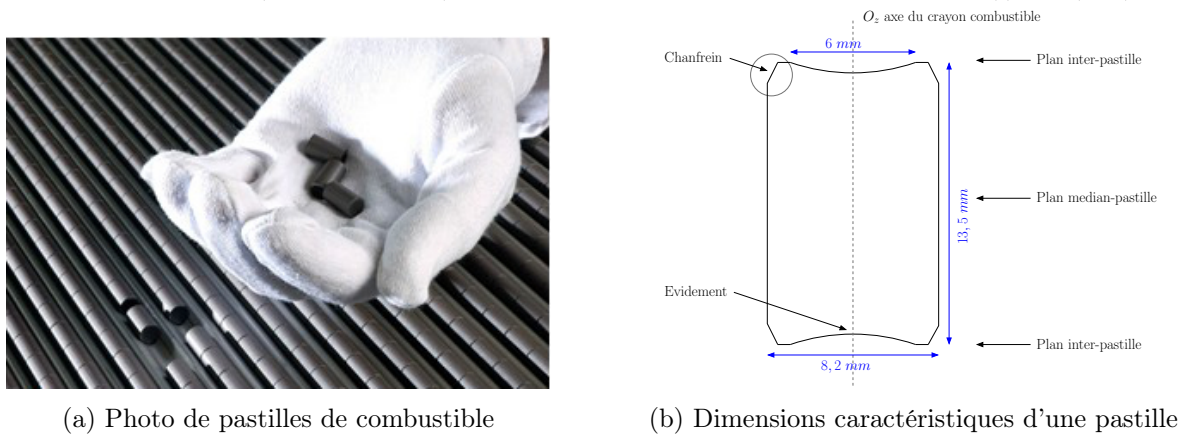
CHAPITRE I

INTRODUCTION

I.1 Simulation du comportement du combustible nucléaire

I.1.1 Le combustible nucléaire

Nous nous intéressons dans ce travail au comportement du combustible nucléaire en réacteur de type REP (Réacteur à Eau Pressurisée) ou RNR-Na (Réacteur à Neutrons Rapides, refroidi au Sodium). Dans ces réacteurs, le combustible nucléaire se présente sous forme de pastilles cylindriques de l'ordre de 1 cm^3 de volume, cf. figure I.1. Ces pastilles de combustible sont des céramiques contenant la matière fissile. On trouve des pastilles de dioxyde d'uranium (UO_2) ou des pastilles de MOX (Mixed OXyde), oxyde mixte d'uranium et de plutonium ($(U,Pu)O_2$).



(a) Photo de pastilles de combustible

(b) Dimensions caractéristiques d'une pastille

FIGURE I.1 – Pastilles de combustible utilisées dans les REP

Le procédé de fabrication MIMAS (pour MIcronized MASTerblend) utilisé actuellement en France pour fabriquer les pastilles de MOX induit une microstructure hétérogène de ce combustible. En effet, comme on peut le voir sur la figure I.2 issue d'une cartographie microsonde, la microstructure du MOX-MIMAS est de type matrice-inclusions avec une phase d'enrobage à teneur modérée en plutonium (autour de 10%) dans laquelle sont distribués des amas plutonifères (25 à 30% de Pu) et des amas uranifères à faible proportion en Pu (2%).

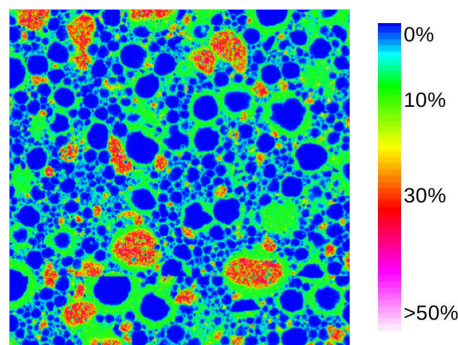


FIGURE I.2 – Teneur en plutonium d'une microstructure de combustible MOX-MIMAS

Plusieurs centaines de pastilles de combustible (typiquement entre 100 et 300) sont empilées dans une gaine métallique cylindrique de quelques mètres fermée à ses extrémités (incluant des

volumes d'expansion et des ressorts de maintien) pour former ce qu'on appelle le « crayon combustible » pour les REP, ou l'« aiguille combustible » pour les RNR-Na, cf. figure I.3.

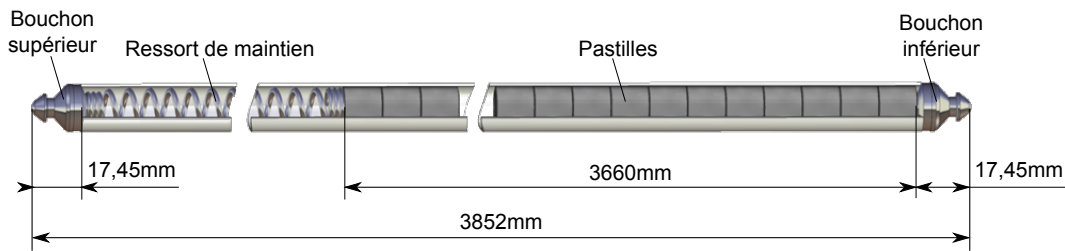


FIGURE I.3 – Schéma d'un crayon combustible d'un REP de puissance 900 MWe (Mégawatts électrique)

Ces crayons (ou aiguilles) combustibles sont regroupés en faisceau dans des « assemblages ». Plus d'une centaine d'assemblages de combustible constitue le cœur du réacteur nucléaire. Ce cœur du réacteur est ainsi le siège de la réaction de fission nucléaire exothermique. Un fluide caloporteur (eau pour les REP ou sodium pour les RNR-Na) vient évacuer la chaleur produite dans le cœur du réacteur pour la transporter vers un générateur de vapeur (qui est un échangeur de chaleur). Cet ensemble, appelé circuit primaire, est contenu dans le bâtiment réacteur, cf. figure I.4.

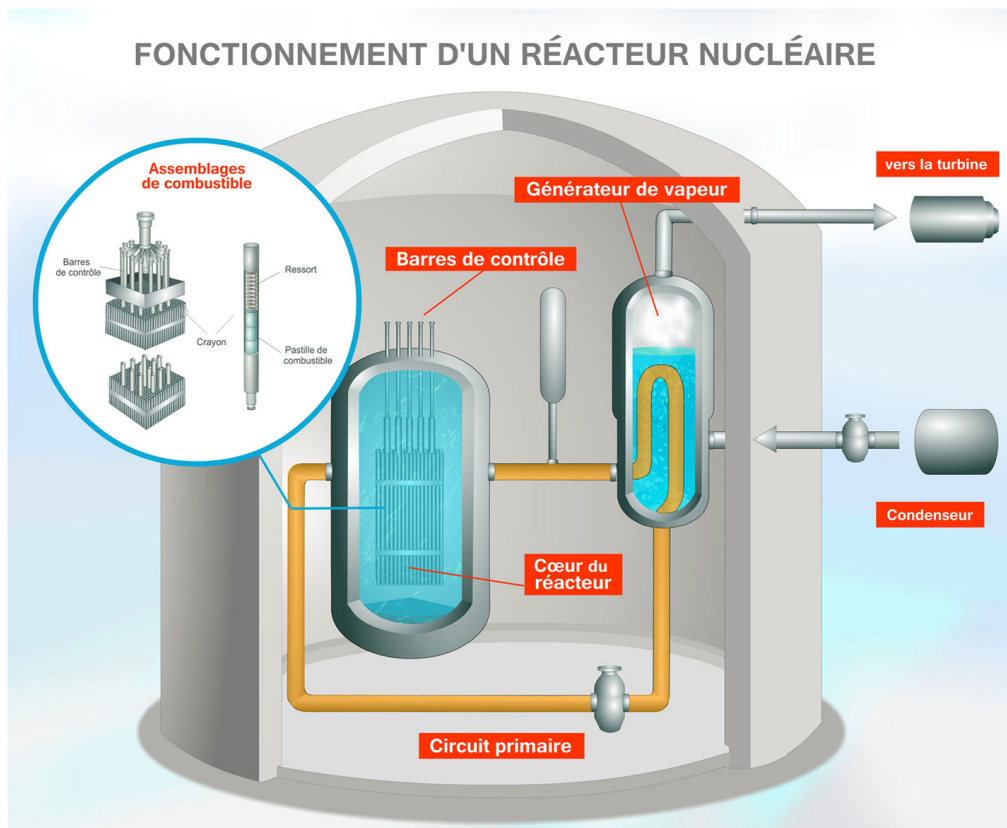


FIGURE I.4 – Schéma de fonctionnement d'un réacteur nucléaire

La vapeur produite dans le générateur de vapeur vient ensuite entraîner la rotation d'une turbine. Un alternateur permet finalement de convertir l'énergie mécanique en énergie électrique. Pour des questions de sûreté, un réacteur nucléaire compte trois barrières de confinement permettant d'empêcher le relâchement de produits éventuellement radioactifs à l'extérieur du réacteur. La première barrière est la gaine métallique entourant le combustible nucléaire, la seconde barrière est l'enveloppe métallique autour du fluide caloporteur et enfin la troisième barrière est l'enceinte de confinement en béton de forte épaisseur qui constitue le bâtiment réacteur.

La connaissance du comportement du crayon combustible sous irradiation est ainsi de grande importance pour s'assurer de l'intégrité de la gaine, première barrière de confinement des produits de la réaction nucléaire.

I.1.2 Comportement de l'élément combustible sous irradiation

Le comportement du crayon (ou de l'aiguille) de combustible dans un réacteur nucléaire est principalement piloté par la haute température et l'irradiation.

La céramique de combustible nucléaire est une céramique fragile avec une contrainte de rupture comprise entre 100 et 150 MPa. La fissuration des pastilles va alors apparaître dès la première montée en puissance du réacteur sous l'effet des contraintes thermiques. En début d'irradiation, le combustible se densifie suite à une baisse de porosité. Puis au cours de l'irradiation, on assiste à un accroissement du diamètre du combustible engendré par la dilatation thermique lors des montées en puissance. Le fort gradient thermique présent entre le centre et la périphérie de la pastille induit une dilatation thermique différentielle et conduit les fragments de pastille à prendre une forme dite de « diabolos », voir par exemple les images du milieu et de droite sur la figure I.5.

Dans les REP, le gonflement dû aux produits de fission solides et gazeux conduit également à une augmentation du volume du combustible. D'autre part, le diamètre de la gaine se réduit par fluage d'irradiation, du fait de la pression du caloporteur (environ 155 bars). Cela conduit à une fermeture du jeu initialement présent entre le combustible et la gaine, cf. figure I.5. En raison de l'effet diabolos, le contact intervient d'abord au niveau du plan inter-pastille, cf. figure I.5-milieu. Après plusieurs cycles d'irradiation, la fermeture du jeu pastille-gaine est complète. La mise en diabolos des pastilles et le fluage de la gaine sous pression externe induisent alors une déformation en forme de bambou de la gaine (figure I.5-droite).

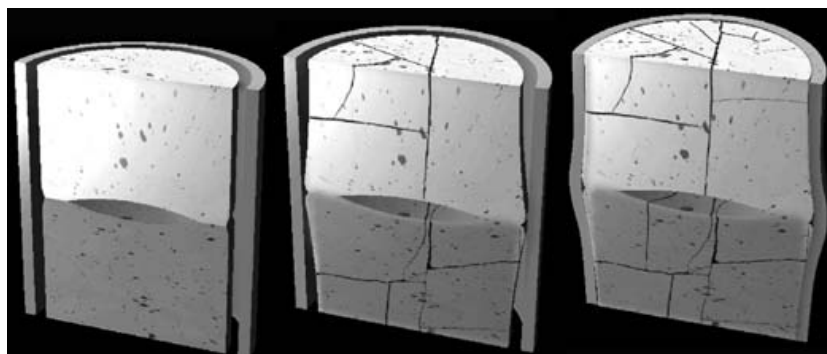


FIGURE I.5 – Schématisation du comportement d'un élément combustible de REP (pastille et gaine l'entourant) au cours de l'irradiation. À gauche : début d'irradiation, au milieu : fin de la première montée en puissance, à droite : après fermeture complète du jeu pastille-gaine

Dans les RNR-Na, les températures beaucoup plus élevées (supérieures à 2000°C au centre des pastilles de combustible, contre 1200°C pour les REP) ainsi que les forts gradients thermiques (>1000°C/cm) sont à l'origine d'un phénomène de migration des porosités vers le centre de la pastille, conduisant à l'apparition d'un trou central, cf. figure I.6. Ces hautes températures entraînent par ailleurs le relâchement dans le volume libre de l'aiguille combustible d'une très grande partie (environ 90%) des gaz de fission formés (contrairement aux REP, où seulement 10% est relâché). Expérimentalement, on observe également une fermeture du jeu pastille-gaine pour ce type de réacteur, bien que dans ce cas il n'y a pas de fluage de la gaine sous pression externe (le caloporteur sodium est à pression atmosphérique).

Pour plus de détails sur le comportement du combustible nucléaire, le lecteur pourra consulter deux ouvrages de références [Bailly *et al.*, 1997 ; Guillet *et al.*, 2008].



FIGURE I.6 – Coupe métallographique transversale d’une pastille de combustible RNR-Na

En fonctionnement nominal, les interactions mécaniques entre les pastilles et la gaine ne provoquent pas la rupture de la gaine. Cependant les objectifs généraux de sûreté visent à garantir qu’aucun produit radioactif n’est rejeté à l’extérieur du réacteur nucléaire et que le refroidissement du combustible est assuré en toutes situations. Ainsi, au niveau de l’élément combustible, l’intégrité mécanique de la gaine doit être garantie pour toutes les catégories de fonctionnement (nominal, incidentel ou accidentel) avec une probabilité de rupture variable en fonction des situations (très faible en nominal et un peu plus élevée en accidentel dans la limite d’un terme source acceptable).

I.1.3 Plateforme logicielle de simulation du comportement du combustible

La simulation du comportement du combustible nucléaire est une aide précieuse aux différents acteurs de la recherche et développement sur les combustibles nucléaires. Elle permet notamment à l’industriel exploitant les réacteurs nucléaires de garantir la tenue de ses installations aux différentes situations de fonctionnement. Elle est très utile pour le dimensionnement ou encore l’optimisation de l’élément combustible.

La simulation offre également la possibilité de prédire le comportement des combustibles dans diverses conditions dont celles qu’il est difficile d’appréhender dans leur totalité avec les moyens expérimentaux classiques, en particulier les conditions accidentelles, et permet ainsi de travailler sur les marges de sûreté. Elle sert aussi à orienter de futures expérimentations permettant de valider ou d’enrichir notre compréhension des phénomènes physiques.

Le comportement du combustible nucléaire est un problème qui est par nature multiphysique et multiéchelle. En effet, comme vu à la section I.1.2, la physique du combustible mêle notamment thermique, mécanique des solides et physico-chimie. De plus, les données d’entrées de ce système multiphysique impliquent également d’autres physiques : la neutronique (connaissance de la puissance dégagée par la réaction nucléaire et évolution de la composition isotopique du combustible) et la thermo-hydraulique (température du fluide caloporteur) principalement.

Par ailleurs, différentes échelles cohabitent au sein de l’élément combustible : l’échelle du crayon, l’échelle des pastilles, l’échelle du contact pastille-gaine et éventuellement l’échelle de la microstructure.

En vue de simuler le comportement des éléments combustibles sous irradiation, la plateforme PLEIADES [Plancq *et al.*, 2004 ; Marelle *et al.*, 2013] (Plateforme Logicielle pour les Éléments Irradiés dans les Assemblages, en Démonstration, en Expérimentation ou en Service), a été développée par le CEA et ses partenaires EDF et Framatome (anciennement AREVA) depuis 2003. Cette plateforme regroupe plusieurs applications dédiées aux différentes filières de réacteur étudiées. L’ensemble de ces applications partage une architecture logicielle, des composants phy-

siques (ou modèles), des lois et propriétés matériaux. Au sein de cette plate-forme, l'application ALCYONE [Thouvenin *et al.*, 2006], [MGB⁺16]¹. est destinée à la filière REP, et l'application GERMINAL [LMD⁺19] à la filière RNR-Na.

Ces deux applications s'attachent à simuler le comportement d'un crayon (ou aiguille) de combustible à l'aide d'une description géométrique basée sur un découpage de cet élément combustible en « tranches » axiales, chaque tranche représentant une partie de l'empilement des pastilles et le morceau correspondant de la gaine les entourant. Chacune de ces tranches peut être modélisée par une représentation 1D axisymétrique², 2D ou 3D, voir figure I.7.

Au sein d'une formulation incrémentale en temps, plusieurs étapes sont réalisées afin de simuler le comportement multiphysique et multiéchelle de l'élément combustible à chaque pas de temps. Deux principales échelles sont considérées : l'échelle globale et l'échelle locale.

L'échelle globale permet de décrire le comportement de l'ensemble du crayon (ou de l'aiguille) de combustible à l'aide d'un chaînage (ou éventuellement un couplage) entre les différentes résolutions multiphysiques locales sur les tranches. Certains modèles 0D sont résolus à cette échelle (typiquement le calcul de la pression interne dans le crayon).

L'échelle locale permet de décrire le comportement multiphysique de la tranche avec une hypothèse d'homogénéisation axiale, permettant de considérer une seule pastille située au milieu de la tranche axiale. Un couplage multiphysique partitionné est utilisé entre les différents composants physiques, voir notamment [MGB⁺16 ; LMD⁺19 ; MRV⁺21]. Un algorithme de point fixe de type Gauss-Seidel par bloc est mis en place entre les modèles physiques dit « spécialisés » (décrivant le comportement du combustible) qui sont les plus fortement couplés : thermique, mécanique, physico-chimie (incluant différentes physiques de l'irradiation), cf. figure I.7. Les autres modèles physiques (thermo-hydraulique et neutronique) intervenant à l'échelle locale sont des modèles dits « simplifiés » qui sont alors simplement chaînés lors de la résolution multiphysique.

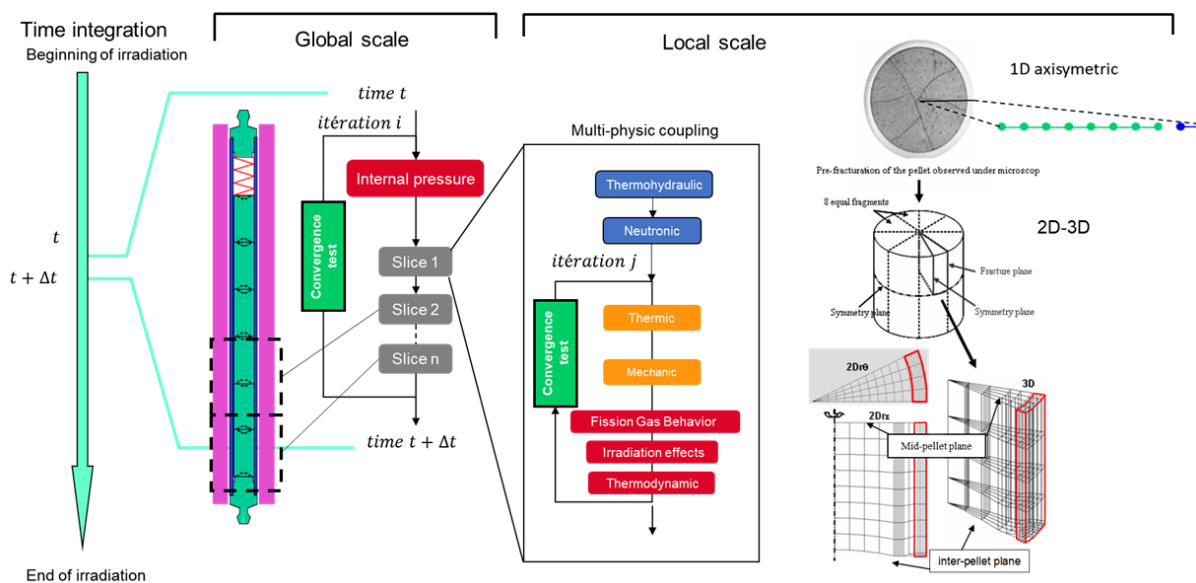


FIGURE I.7 – Schéma de couplage PLEIADES générique pour des géométries de type crayon ou aiguille de combustible

1. Tout au long de ce manuscrit, deux nomenclatures sont utilisées afin de pouvoir distinguer facilement mes contributions, cf. Bibliographie personnelle page 103 et Bibliographie générale page 105

2. Actuellement l'application GERMINAL ne propose qu'une représentation 1D axisymétrique.

I.2 Principales contributions aux couplages multiphysiques

Concernant la simulation multiphysique du combustible nucléaire, je me suis attachée à développer des méthodes numériques permettant d'améliorer l'efficacité du couplage multiphysique. Par efficacité, on entend ici à la fois la diminution du temps de calcul pour obtenir une solution précise mais également dans certains cas l'obtention elle-même d'une solution précise ou plus physique.

La résolution du couplage multiphysique par une approche partitionnée telle qu'introduite dans la section I.1.3, en opposition à une approche monolithique où toutes les équations des différents modèles physiques sont résolues simultanément par un seul solveur, permet d'utiliser des solveurs dédiés et efficaces pour chacune des physiques. En contre-partie la solution du système couplé s'obtient par un algorithme de point fixe dont la convergence, quand elle est obtenue, est en général uniquement linéaire et souvent lente. Des méthodes d'accélération de convergence doivent alors être utilisées.

Nous avons proposé de mettre en place dans l'architecture de la plateforme PLEIADES des outils numériques génériques autour de l'accélération de convergence [MRV⁺21] afin d'obtenir des schémas de couplage modulaires [MGB⁺16 ; MRV⁺21] et de pouvoir utiliser des approches d'accélération de convergence de façon non intrusive.

Le système de point fixe considéré ici n'étant pas un système scalaire, les méthodes connues d'accélération scalaire (Aitken-Steffensen, sécante, relaxation,...) appliquées indépendamment à chaque composante scalaire du vecteur solution, conduisent à des résultats peu satisfaisants. Nous nous sommes ainsi intéressés à l'accélération de suites vectorielles de point fixe. Nous avons en particulier introduit dans [RH15] un cadre commun pour construire de nouvelles méthodes d'accélération de suites vectorielles mais également pour retrouver sous un même formalisme les méthodes d'accélération vectorielle les plus populaires et efficaces. D'un point de vue pratique, ce formalisme commun est purement mathématique, indépendant du système physique à résoudre, et permet donc de tester facilement différentes méthodes d'accélération quel que soit le domaine d'application où une résolution partitionnée de type point fixe est utilisée. Cette partie de mes recherches fait l'objet de la section II.1.

Dans le couplage multiphysique partitionné des applications PLEIADES présenté précédemment, le logiciel éléments finis Cast3M (www-cast3m.cea.fr) du CEA est utilisé comme solveur mécanique et thermique. Le modèle mécanique prend une part très importante du temps de résolution. J'ai donc jugé intéressant d'évaluer l'apport de méthodes de réduction d'ordre de modèles dans ce contexte. Le but d'une telle démarche est de réduire le temps de calcul de la résolution du modèle mécanique tout en proposant une solution approximée proche de celle d'ordre plein (ici la solution éléments finis). Le modèle d'ordre réduit trouvera alors son intérêt pour accélérer les études paramétriques (calibration, validation, calcul d'incertitudes, etc) mais devrait également permettre de rendre plus raisonnables les temps de calcul de simulations de phénomènes multiéchelles.

Nous nous sommes en particulier focalisés dans la thèse de Jules Fauque [Fauque, 2018] sur la réduction d'ordre de modèles pour la mécanique du contact avec des matériaux au comportement non linéaire. La réduction d'ordre de modèles de problèmes fortement non linéaires, comme le problème du contact en mécanique des solides, est encore très peu étudiée dans la littérature. Nous avons proposé dans [FRR18] une méthode d'hyper-réduction hybride d'ordre de modèles pour la mécanique du contact élastique. Dans la thèse [Fauque, 2018] et dans l'article en préparation [FRR21], l'hyper-réduction hybride a été étendue à des problèmes de contact entre matériaux non linéaires. L'ensemble de ma contribution autour de la réduction d'ordre de modèle en mécanique du contact est détaillée en section II.2.

Concernant la fiabilité et la prédictibilité de la simulation multiphysique, nous nous sommes intéressés au travers de la thèse de Mourad Temmar [Temmar, 2019] à améliorer la modélisation et le schéma de couplage multiphysique de l'application GERMINAL [LMD⁺19] afin de pouvoir

simuler le phénomène de rattrapage du jeu pastille-gaine (cf. section I.1.2) à partir d'un modèle 1D basé sur une formulation physique, en remplacement du modèle empirique actuel. En effet, la taille du jeu influence au premier ordre (avec la conductivité thermique dans le combustible et dans le jeu) l'évacuation de la chaleur produite dans le combustible. Une meilleure simulation de cette taille doit permettre de réduire l'incertitude sur la température maximale du combustible et donc sur la marge à fusion du combustible. A partir d'observations expérimentales, nous avons identifié dans [TMRF20] deux mécanismes responsables du phénomène de rattrapage du jeu pastille-gaine dans les RNR-Na, dont un directement relié au mécanisme de migrations des porosités (cf. section I.1.2). Nous avons alors proposé une stratégie multidimensionnelle permettant de comprendre les phénomènes et leur impact avec une approche 3D purement thermo-mécanique puis de transposer les mécanismes identifiés dans un modèle 1D plus prédictif. Par ailleurs, dans la thèse [Temmar, 2019], des travaux complémentaires ont été réalisés afin d'obtenir une compréhension détaillée du processus migration des pores avec prise en compte de l'effet géométrique des porosités. Ce processus est simulé grâce à un couplage entre thermique et phénomène d'évaporation-condensation. L'essentiel de ces travaux est présenté dans la section II.3.

I.3 Principales contributions aux couplages multiéchelles

Concernant la prise en compte des hétérogénéités d'échelles dans la simulation du comportement du combustible nucléaire, je me suis intéressée à l'introduction dans la résolution mécanique des deux échelles actuellement peu ou pas prises en compte : l'échelle mésoscopique liée à l'interaction pastille-gaine et l'échelle microscopique pour tenir compte de la microstructure hétérogène des MOX. Dans les deux cas, cette prise en compte passe par un couplage numérique multiéchelle (ou multiniveau), permettant d'obtenir une solution précise en optimisant la taille des systèmes à résoudre.

La prise en compte d'une échelle mésoscopique dans le calcul mécanique est nécessaire dans notre cas pour simuler précisément le contact pastille-gaine se produisant d'abord dans le plan inter-pastille, au droit des fissures de combustible (cf. section I.1.2), et dont le niveau de contraintes peut initier une fissuration de la gaine. Pour ce faire, les méthodes de raffinement adaptatif de maillage sont une solution prometteuse. Étant donné que le solveur mécanique est un solveur implicite quasi-statique, les méthodes standards de type h-adaptatives ou p-adaptatives consistant à générer un unique maillage raffiné localement (en espace ou en degré de fonction de base) sont limitées par la taille du système linéaire à résoudre (cf. nombre de degrés de liberté). Nous nous sommes donc intéressés aux méthodes multigrilles locales qui consistent à ne pas modifier le maillage de calcul initial mais à générer localement dans les zones d'intérêt des sous-domaines emboîtés de pas de maillage de plus en plus fins. Un processus itératif permet ensuite de relier les solutions des différents niveaux de maillage. Nous avons étendu dans la thèse de L. Barbié [Barbié, 2013] la méthode multigrille Local Defect Correction (LDC) à la mécanique des solides élastiques [BRL14] et introduit un premier algorithme dans le cas de comportements non linéaires [BRL15]. Dans la thèse de H. Liu [Liu, 2016], nous avons combiné de façon efficace la méthode LDC avec un estimateur *a posteriori* d'erreur et proposé un critère original d'arrêt du raffinement en cas de singularité locale [RLL19]. Nous avons également développé un algorithme efficace permettant de traiter du contact élastique avec frottement via la méthode multiniveau LDC [LRL17]. Enfin, dans la thèse de D. Koliesnikova [Koliesnikova, 2021], nous avons comparé dans un cadre élastostatique les performances de la méthode LDC par rapport à celles des méthodes h-adaptatives conformes et non conformes et ce pour des maillages hexaédriques [KRL21a]. Dans cette thèse, nous travaillons actuellement sur un algorithme multiniveau générique permettant de contrôler la précision de la solution numérique de problèmes de quasi-statique avec non-linéarités matérielles. L'ensemble de ces contributions sont résumées dans la section III.1.

Afin de simuler le comportement micromécanique des combustibles hétérogènes, nous nous sommes intéressés aux méthodes dites éléments finis multiéchelles. Parmi ces méthodes, nous avons choisi la méthode des « éléments finis au carré » (EF²) car elle était particulièrement bien adaptée à la mécanique non linéaire des solides. Dans un calcul éléments finis à l'échelle macroscopique, cette méthode consiste à substituer la résolution locale de l'équation constitutive du comportement par une homogénéisation numérique obtenue à partir d'un calcul éléments finis à l'échelle de la microstructure. Cette méthode permet ainsi de se passer de l'identification de lois de comportement macroscopiques et est parfaitement scalable puisque les calculs locaux sont indépendants. Cependant le nombre de calculs locaux est très important (cf. nombre de points de Gauss du maillage), ce qui rend cette méthode coûteuse pour une utilisation sur nombre de processeurs raisonnable (de l'ordre de la dizaine). Nous avons ainsi introduit dans [RMMB17] un algorithme EF² hybride permettant de faire un calcul EF² qu'en certaines zones d'intérêt. Nous avons implémenté cette approche dans le solveur mécanique Cast3M de PLEIADES et nous disposons ainsi d'un schéma de calcul multiphysique avec un modèle mécanique multiéchelle [RMB21]. Nous avons également travaillé sur l'influence des conditions aux limites au bord du calcul microscopique sur l'efficacité de l'algorithme. Enfin, récemment nous avons montré dans [KRL20] que les algorithmes multiniveaux de type LDC et EF² hybride étaient conceptuellement très proches et avons ainsi proposé une formulation générique de couplage numérique multiéchelle pour la mécanique des solides non linéaires. Cette partie de mes travaux est décrite en section III.2.

AUTOUR DES COUPLAGES MULTIPHYSIQUES

SOMMAIRE DÉTAILLÉ DU CHAPITRE

II.1 Accélération de convergence de suites vectorielles de point fixe .	13
II.1.1 Introduction	13
II.1.2 État de l'art des schémas de couplage dans PLEIADES	14
II.1.2.a Algorithmes d'accélération de convergence	14
II.1.2.b Vers un schéma de couplage modulaire	16
II.1.2.c Analyse des performances et voies d'amélioration	17
II.1.3 Formalisme générique d'accélération vectorielle basée sur le résidu . .	19
II.1.3.a Transformation vectorielle basée sur le résidu	19
II.1.3.b Méthodes d'accélération itératives basées sur le résidu	21
II.1.3.c Exemples numériques	23
II.1.3.d Conclusions	25
II.1.4 Directions de recherche	26
II.2 Réduction d'ordre de modèle pour la mécanique du contact . . .	29
II.2.1 Introduction	29
II.2.2 Hyper-réduction hybride pour la mécanique du contact élastique . . .	31
II.2.2.a Rappel du problème de contact sans frottement en élastostatique	31
II.2.2.b Méthode d'Hyper-Réduction Hybride	33
II.2.2.c Autour de la méthode d'Hyper-Réduction Hybride	35
II.2.2.d Exemples numériques	38
II.2.3 Hyper-réduction hybride pour la mécanique du contact avec non- linéarités matérielles	39
II.2.3.a Formulation discrète	39
II.2.3.b Implémentation dans le solveur mécanique Cast3M	40
II.2.3.c Exemple numérique	41
II.2.4 Directions de recherche	42
II.3 Modélisation multiphysique couplée du phénomène de rattrapage de jeu dans les réacteurs à neutrons rapides	45
II.3.1 Introduction	45
II.3.2 Nouveau modèle 1D de délocalisation et schéma de couplage	45
II.3.2.a Identification des phénomènes de rattrapage de jeu	45
II.3.2.b Modélisation et simulation thermo-mécaniques 3D	46
II.3.2.c Modélisation et simulation multiphysique 1D	50
II.3.3 Vers la compréhension du phénomène de transport de matière autour des fissures	53
II.3.4 Directions de recherche	54

II.1 Accélération de convergence de suites vectorielles de point fixe

II.1.1 Introduction

Comme introduit dans la section I.1.3, la simulation du combustible nucléaire fait intervenir un couplage multiphysique partitionné. Celui-ci peut s'écrire sous la forme d'un problème de point fixe

$$X = F(X), \quad \text{où } X \in \mathbb{R}^d \text{ et } F : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d \quad (\text{II.1.1})$$

En effet, pour un problème multiphysique (ou multimodèle), on retrouve le système de point fixe (II.1.1) en posant $F = (F_i)_{i=1,\dots,m}$ où F_i représente le modèle physique i et $X = (X_i)_{i=1,\dots,m}$ où X_i est la (ou les) variable(s) d'intérêt du modèle i . Le nombre m de modèles est souvent différent de la taille d du vecteur inconnu car les modèles peuvent retourner plusieurs sorties. De façon générale, on a ainsi $X_i \in \mathbb{R}^{d_i}$, avec $\sum_{i=1}^m d_i = d$ et $F_i : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^{d_i}$.

La formulation générique de point fixe (II.1.1) se rencontre dans un nombre varié de méthodes numériques (décomposition de domaine, résolution multigrille,...), de problèmes couplés (interaction fluide-structure, thermo-mécanique,...) mais également lors de la résolution de problèmes non linéaires (structure électronique, transfert de chaleur, mécanique non linéaire, ...). En effet, il y a une dualité naturelle entre les problèmes de point fixe et les problèmes non linéaires puisque tout problème non linéaire de la forme $G(X) = 0$ est équivalent à un problème de point fixe de type (II.1.1). Un choix trivial, qui n'est souvent pas le meilleur, est de prendre $F(X) = G(X) + X$.

La méthode de résolution naturelle d'un problème de point fixe est de construire une suite de point fixe générée par les itérations suivantes (parfois appelées itérations de Picard) à partir d'un vecteur initial X^0 donné

$$X^{(n+1)} = F(X^{(n)}), \quad \text{où } n \text{ désigne le numéro d'itération} \quad (\text{II.1.2})$$

jusqu'à convergence de la suite, détectée numériquement lorsque $\|F(X^{(n)}) - X^{(n)}\| \leq \epsilon$ avec ϵ un réel positif petit et $\|\cdot\|$ une norme donnée.

Remarque. Dans le cas d'un couplage multiphysique ou plus généralement lorsque la fonction F a plusieurs composantes (appelées modèles dans la suite), les itérations de point fixe (II.1.2) peuvent se décliner de plusieurs manières selon que les variables (ou inconnues) déjà calculées par les modèles $j < i$ soient mises à jour ou non pour l'entrée du modèle i au cours de l'itération n . Ces deux types de choix discriminent les deux grandes classes de méthodes de point fixe par bloc (un bloc est dans ce cas un modèle) : les méthodes de type Jacobi (sans mise à jour entre les modèles) et les méthodes de type Gauss-Seidel (avec mise à jour entre les modèles). \square

La construction des itérations de point fixe (II.1.2) présente l'avantage majeur d'être simple et facilement mise en œuvre informatiquement. Elle ne présente pas de difficulté algorithmique particulière. En particulier, elle ne nécessite pas la construction de la Jacobienne de F , ce qui la rend très attrayante vis-à-vis des méthodes de type Newton très connues pour la résolution de problèmes non linéaires (mais souvent coûteuses et difficiles à mettre en œuvre de façon générique). En contre-partie, la convergence de la suite de point fixe (II.1.2) vers la solution du problème (II.1.1) n'est a priori pas garantie (car elle s'appuie sur des propriétés de F autour du point solution [Granás et Dugundji, 2003], a priori inconnu!) et souvent linéaire (erreur qui décroît de façon linéaire) avec une vitesse de convergence lente.

Pour pallier la lente convergence linéaire de la suite de point fixe, des méthodes d'accélération de convergence de suites (appelées aussi méthodes d'extrapolation) doivent être utilisées. Ces méthodes consistent à générer une nouvelle suite qui converge plus vite (en nombre d'itérations) vers

la solution que la suite initiale. Certaines méthodes d'accélération permettent également d'augmenter l'ordre de convergence (super-linéaire, quadratique,...) et même d'atteindre la convergence quand la suite de point fixe diverge. Pour les suites de point fixe, les méthodes d'accélération de convergence ont l'intérêt de considérer la fonction de point fixe F comme une « boîte noire », c'est-à-dire qu'elles ne nécessitent aucune modification de F , et en particulier de son solveur.

De manière générale, les méthodes d'accélération de convergence construisent une suite accélérée $(Y^{(n)})_n$ dont les itérés sont des fonctions des derniers itérés de la suite initiale $(X^{(n)})_n$:

$$Y^{(n)} = \psi(X^{(n)}, X^{(n-1)}, X^{(n-2)}, \dots) \quad (\text{II.1.3})$$

tel que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{Y^{(n)} - X}{X^{(n)} - X} = 0 \quad (\text{II.1.4})$$

où X est la limite de la suite $(X^{(n)})_n$. Cette dernière équation permet de constater que la suite $(Y^{(n)})_n$ converge plus vite vers la solution que la suite initiale $(X^{(n)})_n$ (puisque le numérateur tend plus vite vers 0 que le dénominateur).

Remarque. Dans le cas de vecteurs, le rapport (II.1.4) fait appel à l'inverse d'un vecteur dont la définition n'est pas unique. On considère en général la définition suivante de l'inverse d'un vecteur $V \in \mathbb{R}^d$:

$$V^{-1} \equiv \frac{V}{\|V\|^2}$$

avec une norme choisie (souvent la norme euclidienne). □

En pratique, on utilise l'accélération de convergence de manière dynamique, c'est-à-dire que le nouvel itéré sera directement l'itéré accéléré

$$X^{(n+1)} = Y^{(n)} \quad (\text{II.1.5})$$

En effet, comme souligné dans la littérature (voir entre autres [Anderson, 1965 ; Brezinski et Redivo Zaglia, 1991]), la transformation statique de suite à partir d'une suite existante est moins efficace qu'une transformation dynamique (ou cyclique) de suite.

L'accélération de la convergence de suites est un domaine à part entière de l'analyse numérique. La littérature sur ce sujet est vaste, on peut citer comme point d'entrée le livre de Brezinski et Zaglia [Brezinski et Redivo Zaglia, 1991]. En particulier, les algorithmes d'accélération de convergence pour des suites vectorielles ($d > 1$), suites les plus rencontrées dans un contexte applicatif, ont été principalement introduits au XX^{ème} siècle [Brezinski, 2000], particulièrement dans les années 1960 (cf. [Shanks, 1955 ; Wynn, 1962 ; Anderson, 1965 ; Irons et Tuck, 1969]) ainsi que dans les années 1990 (cf. [Brezinski et Redivo Zaglia, 1991 ; Graves-Morris, 1992 ; Sedogbo, 1997 ; Brezinski et Chehab, 1998]). La plupart d'entre eux sont des généralisations du puissant algorithme d'accélération scalaire du Δ^2 d'Aitken [Aitken, 1926].

II.1.2 État de l'art des schémas de couplage dans PLEIADES

II.1.2.a Algorithmes d'accélération de convergence

L'état de l'art [Ram10] des schémas de couplage multiphysique dans les applications de la plateforme PLEIADES [Plancq et al., 2004 ; Marelle et al., 2013] a permis d'identifier deux types de méthodes d'accélération de convergence mises en place à l'intérieur de différentes applications (de façon généralement intrusive).

Il s'agit d'une part d'approches de relaxation [LMD⁺19] (voir [Quarteroni et al., 2007] par exemple), parfois appelées algorithme de mélange (« mixing algorithm » [Eyert, 1996 ; Fang et Saad, 2009]) :

$$X^{(n+1)} = (1 - \omega)X^{(n)} + \omega F(X^{(n)}), \quad \omega \in \mathbb{R}^+ \quad (\text{II.1.6})$$

où ω est appelé paramètre de relaxation.

Cet algorithme permet d'accélérer la convergence de la suite de point fixe lorsque celle-ci converge ou d'obtenir une convergence lorsque la suite de point fixe diverge avec un comportement oscillant (ce qui se traduit mathématiquement par des valeurs propres de la Jacobienne de F toutes inférieures à -1).

Le principal défaut de cet algorithme est que l'intervalle sur lequel choisir ω pour permettre d'obtenir ou d'accélérer la convergence de la suite initiale de point fixe, n'est pas connu a priori car il dépend de la Jacobienne de F au point solution. Ainsi des valeurs statiques empiriques sont souvent utilisées en pratique. Le plus souvent, le choix se porte sur $\omega = 0.5$, voir par exemple [Erbts *et al.*, 2014]. Il existe aussi des procédés empiriques permettant d'obtenir des bons résultats.

D'autre part, il existe également dans PLEIADES un algorithme d'accélération basé sur la méthode de Steffensen [Michel *et al.*, 2012]. L'algorithme de Steffensen (voir par exemple [Henrici, 1964 ; Nievergelt, 1991]) est l'application dynamique de la méthode du Δ^2 d'Aitken [Aitken, 1926], conçue pour une équation de point fixe scalaire :

$$x = f(x) \quad \text{où } x \in \mathbb{R} \text{ et } f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R} \quad (\text{II.1.7})$$

La méthode de Steffensen s'écrit alors

$$x^{(n+1)} = x^{(n)} - \frac{(f(x^{(n)}) - x^{(n)})^2}{f(f(x^{(n)})) - 2f(x^{(n)}) + x^{(n)}} = x^{(n)} - \frac{(\Delta x^{(n)})^2}{\Delta^2 x^{(n)}}, \quad (\text{II.1.8})$$

en notant : $\Delta x^{(n)} = f(x^{(n)}) - x^{(n)}$, $\Delta f(x^{(n)}) = f(f(x^{(n)})) - f(x^{(n)})$ et $\Delta^2 x^{(n)} = \Delta f(x^{(n)}) - \Delta x^{(n)}$. La méthode de Steffensen est une méthode d'ordre 2. Cependant, chaque itération de Steffensen requiert 2 nouvelles évaluations de la fonction f . Ainsi l'indice d'efficacité de cette méthode, défini par $r^{1/s}$ avec r l'ordre de la méthode et s le nombre d'évaluations de la fonction par itération, est de $\sqrt{2}$ ($\simeq 1.414$). Il est par exemple légèrement inférieur à l'indice d'efficacité de la méthode sécante (voir [Henrici, 1964] entre autres) qui est une méthode à un pas (une évaluation de f) d'ordre $(1 + \sqrt{5})/2$ ($\simeq 1.618$). Cette méthode peut être vue comme une transformation dynamique du Δ^2 d'Aitken nécessitant qu'une seule nouvelle évaluation de fonction par itération :

$$x^{(n+1)} = x^{(n)} - \frac{(x^{(n)} - x^{(n-1)})(f(x^{(n)}) - x^{(n)})}{(f(x^{(n)}) - x^{(n)}) - (f(x^{(n-1)}) - x^{(n-1)})} = x^{(n)} - \frac{(x^{(n)} - x^{(n-1)})\Delta x^{(n)}}{\Delta x^{(n)} - \Delta x^{(n-1)}} \quad (\text{II.1.9})$$

On peut remarquer que la méthode de la sécante appliquée à une itération de point fixe sur deux revient à la méthode de Steffensen.

Par ailleurs, en utilisant une formulation équivalente de la méthode de relaxation (II.1.6) (appliquée au cas scalaire $d = 1$)

$$x^{(n+1)} = x^{(n)} + \omega(f(x^{(n)}) - x^{(n)}) = x^{(n)} + \omega\Delta x^{(n)} \quad (\text{II.1.10})$$

il apparaît évident que les méthodes de Steffensen et de la sécante sont des méthodes de relaxation particulières avec un paramètre de relaxation variable. On peut facilement montrer que ce paramètre de relaxation est une approximation dynamique du paramètre de relaxation optimal ($\omega_{opt} = 1/(1 - f'(x_{sol}))$, avec x_{sol} le point fixe de f). Ainsi, dans la littérature, la méthode de la sécante est aussi appelée relaxation d'Aitken ou relaxation dynamique [Anderson, 1965 ; Küttler *et Wall*, 2008 ; Erbts *et Düster*, 2012].

L'algorithme de Steffensen a la propriété supplémentaire intéressante de converger même lorsque les itérations de point fixe divergent. Ainsi par rapport à l'algorithme de point fixe standard, l'algorithme de Steffensen :

- accélère la convergence quand elle a lieu
- propose un procédé convergeant même lorsque la suite de point fixe diverge.

Géométriquement, la méthode de Steffensen consiste à rechercher l'intersection avec la première bissectrice ($y = x$) de la linéarisation de la fonction f à partir des 2 derniers itérés successifs (non modifiés) de point fixe.

Dans le cas particulier où la fonction f est purement linéaire, l'algorithme de Steffensen (tout comme la méthode de la sécante) permet d'obtenir la solution en une seule itération.

Dans la plateforme PLEIADES, l'algorithme de Steffensen, qui est une méthode d'accélération de suites scalaires, est appliqué indépendamment à chaque composante du vecteur de point fixe $X \in \mathbb{R}^d$ [Michel *et al.*, 2012]. Cette stratégie permet d'en faire une méthode d'accélération pseudo-vectorielle, comme introduit dans [Macleod, 1986].

II.1.2.b Vers un schéma de couplage modulaire

Le travail d'état de l'art précédent nous a permis de proposer au niveau de l'architecture logicielle de la plateforme PLEIADES des outils numériques génériques autour de l'accélération de convergence [RB12 ; MRV⁺21] : accélérateurs de convergence, prédicteurs, évaluateurs de convergence. Ainsi, les applications PLEIADES ont pu mettre en place un schéma de couplage modulaire non intrusif permettant de tester facilement différentes méthodes d'accélération à l'extérieur des composants physiques. Par ailleurs, les schémas de couplage ont gagné en lisibilité et maintenabilité [MGB⁺16 ; MRV⁺21]. Un exemple de schéma de couplage multiphysique avec accélérateurs de convergence est décrit sur la figure II.1.1.

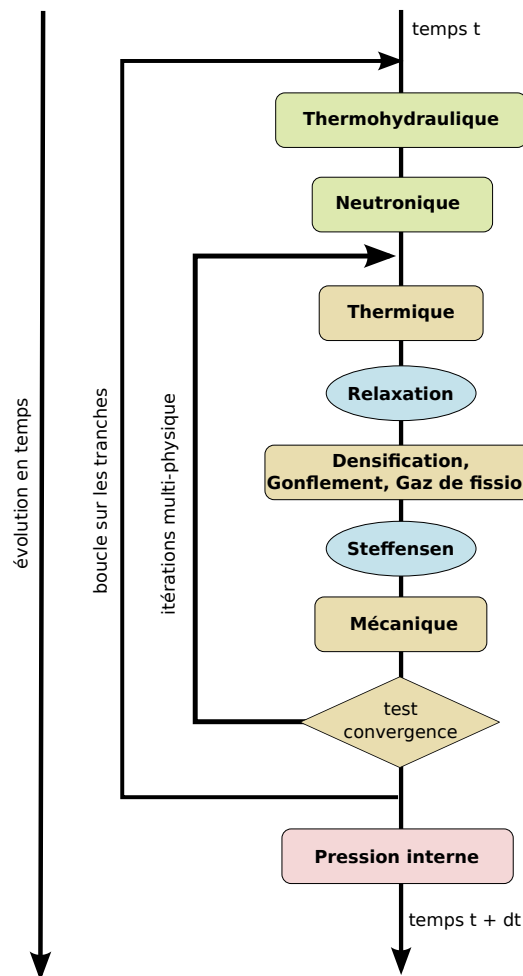


FIGURE II.1.1 – Exemple du schéma de couplage multiphysique de référence de l'application ALCYONE de la plateforme PLEIADES

On peut souligner qu'en général le schéma de couplage ne fait intervenir des accélérateurs de convergence que sur une partie $X_i \in \mathbb{R}^{d_i}$ du vecteur multiphysique $X \in \mathbb{R}^d$. Lorsque le couplage multiphysique fait intervenir plus de 2 modèles, cette pratique est courante (voir par exemple [Erbts *et al.*, 2014]), même si le problème de couplage (II.1.1) ne se réduit pas à une équation de point fixe sur la variable X_i . Une raison pratique en est que le vecteur de couplage complet $X \in \mathbb{R}^d$ n'est en général jamais assemblé. Par ailleurs, les différentes composantes X_i , $1 \leq i \leq m$ du vecteur contiennent des grandeurs qui ne sont a priori pas du même ordre de grandeur et qui n'ont pas la même signification physique, ce qui peut poser des problèmes numériques lors d'une accélération de convergence sur le vecteur complet.

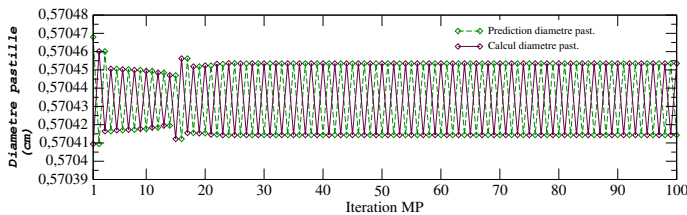
II.1.2.c Analyse des performances et voies d'amélioration

Nous présentons brièvement dans cette section quelques résultats saillants sur l'efficacité des deux algorithmes d'accélération de convergence disponibles dans la plateforme PLEIADES, à savoir un algorithme de relaxation et un algorithme de Steffensen par composante (cf. section II.1.2.a).

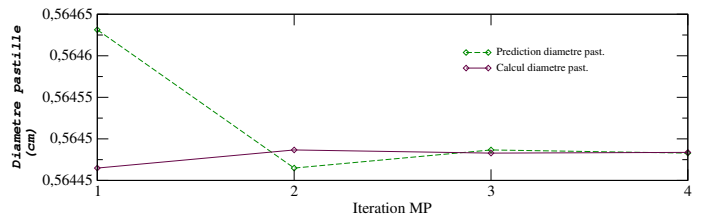
Méthode de relaxation

Dans les applications PLEIADES, la méthode de relaxation est appliquée avec un paramètre de relaxation fixé a priori, en général $\omega = 0.5$. Comme attendu théoriquement, cette valeur n'a aucune chance d'être la valeur optimale. Elle peut cependant permettre d'obtenir une convergence mais rien ne garantit qu'elle soit dans l'intervalle permettant d'accélérer la convergence, comme le montrent les exemples d'application sur une inconnue scalaire reportés sur la figure II.1.2.

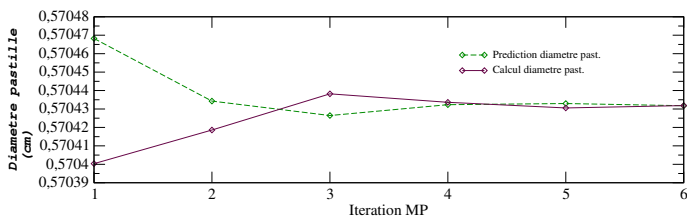
Remarque. Dans ce cas, l'accélération de convergence se fait en début d'itération suivante, au moment de la prédiction de la valeur inconnue, d'où le terme « prédiction » dans les graphiques. Lorsqu'aucune méthode d'accélération n'est appliquée, la valeur prédite est donc directement la valeur obtenue en fin de d'itération précédente. \square



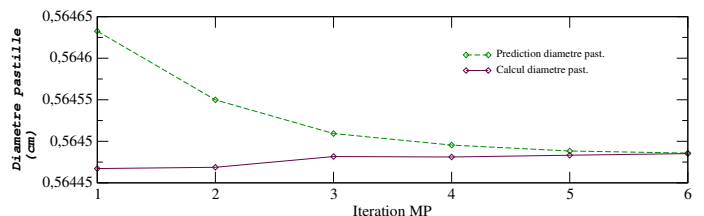
(a) Calcul 1 : sans relaxation



(b) Calcul 2 : sans relaxation



(c) Calcul 1 : avec relaxation



(d) Calcul 2 : avec relaxation

FIGURE II.1.2 – Exemples d'application d'une méthode relaxation avec $\omega = 0.5$ sur un scalaire

On voit sur ces exemples que l'utilisation d'une valeur du paramètre de relaxation fixée a priori reste hasardeuse. Une relaxation dynamique paraît intéressante pour remplacer à la fois

la valeur statique et un éventuel procédé empirique. Par ailleurs, il serait intéressant que cette relaxation dynamique soit vectorielle afin de ne pas devoir s'appliquer uniquement sur certaines valeurs scalaires du vecteur de couplage multiphysique.

Méthode de Steffensen pseudo-vectorielle

Nous regardons ici les performances d'une méthode de Steffensen appliquée indépendamment à chaque valeur nodale d'un champ physique (ici le gonflement dans le schéma de couplage de la figure II.1.1).

Il apparaît dans nos calculs que cette méthode de Steffensen pseudo-vectorielle conduit toujours à la convergence, permet de faire converger les itérations quand la suite de point fixe diverge (cf. propriété intéressante du cas scalaire, rappelée en section II.1.2.a) mais parfois ne permet pas d'accélérer les itérations vectorielles de point fixe, voir figure II.1.3. Sur cette figure, l'évolution d'une seule composante du vecteur inconnu est représentée (ici le gonflement gazeux au nœud central du combustible).

Remarques.

- Pour ces cas tests, l'accélération de Steffensen est appliquée directement après le modèle concerné afin de permettre aux modèles suivants du couplage d'avoir pour entrée la valeur corrigée (ou accélérée) d'où le terme « correction » dans les graphiques.
- L'accélération de Steffensen est appliquée une itération de point fixe sur deux pour disposer des deux évaluations successives de la fonction nécessaires au calcul, cf. Eq. (II.1.8).
- Le léger écart entre les points de départ des calculs avec ou sans accélération provient d'un léger cumul des écarts en fonction du temps entre le schéma de couplage avec ou sans accélération. □

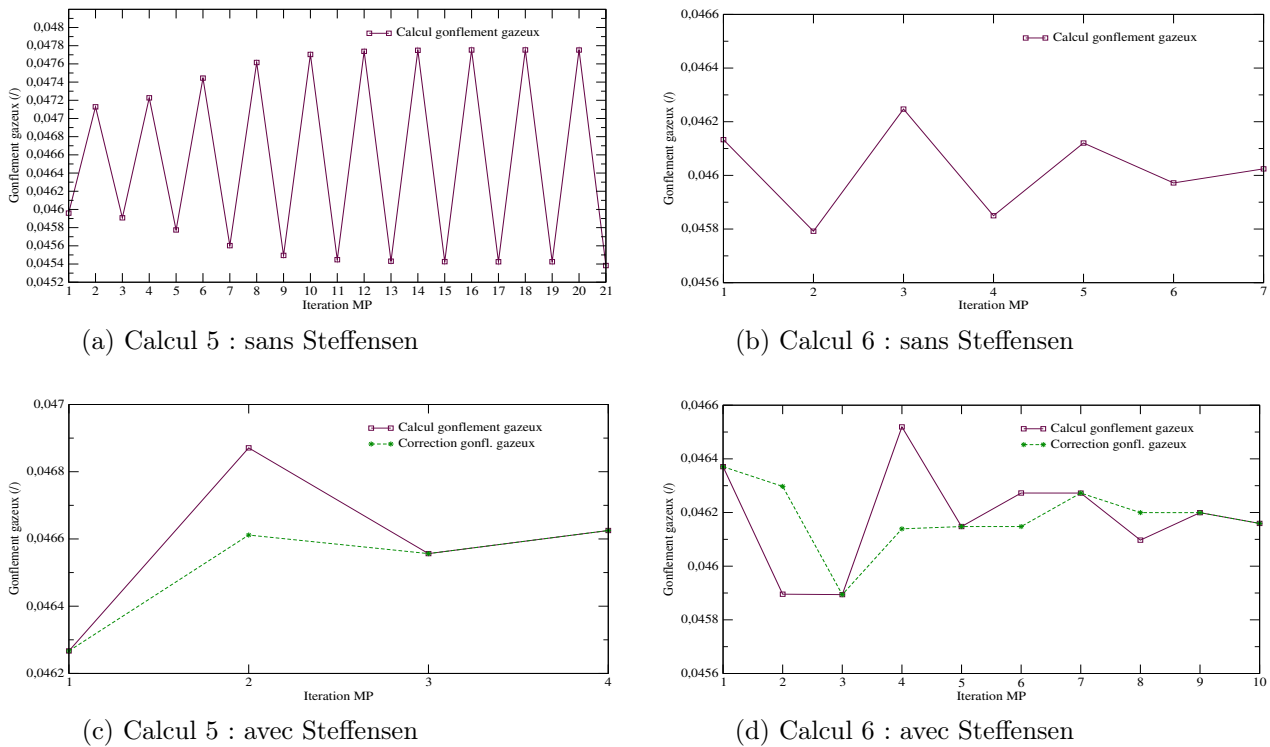


FIGURE II.1.3 – Exemples d'utilisation d'une méthode de Steffensen sur chaque composante d'un vecteur. Ici, valeurs au nœud central.

La non-accélération de convergence semble être due à l'application de la méthode de Steffensen de façon indépendante sur chaque composante du vecteur de point fixe. En effet, cela suppose

que le problème de point fixe vectoriel réduit à chaque composante du vecteur inconnu est un problème de point fixe scalaire ($d = 1$). Ceci n'est évidemment généralement pas le cas. Les résultats obtenus sont en cohérence avec [Macleod, 1986 ; Brezinski et Redivo Zaglia, 1991] et confirment que les méthodes vectorielles (basées sur des approches de projection) sont plus intéressantes que l'application de méthodes scalaires à chaque composante.

Ainsi, à partir des résultats de convergence obtenus avec les méthodes de relaxation statique et de Steffensen pseudo-vectorielle, il est apparu important de s'intéresser à des méthodes d'accélération nativement vectorielles.

II.1.3 Formalisme générique d'accélération vectorielle basée sur le résidu

Il existe de nombreuses méthodes d'accélération de suites vectorielles dans la littérature, voir la revue que nous en avons proposée dans [RH15]. La plupart d'entre elles sont des extensions de méthodes d'accélération de suites scalaires. D'autres méthodes sont, au contraire, directement construites pour des suites vectorielles. Elles sont dans ces cas-là généralement basées sur un processus de minimisation.

Le but de cette formulation générique proposée et analysée dans [RH15] était d'introduire un cadre commun pour construire de nouvelles méthodes d'accélération de suites vectorielles mais également de retrouver sous un même formalisme les méthodes d'accélération vectorielles les plus populaires et efficaces.

Ce formalisme a été construit comme une généralisation de la procédure d'accélération hybride non linéaire [Brezinski et Chehab, 1998] mais peut aussi être vu comme une extension à la fois de la méthode d'extrapolation de rang réduit (Reduced Rank Extrapolation) [Eddy, 1979], et de la méthode d'Anderson [Anderson, 1965]. Il est basé sur l'introduction d'une transformation faisant intervenir des suites convergeant vers 0, désignées par le terme générique « résidu ». Nous donnons les étapes clés de la construction de cette transformation et des méthodes d'accélération associées dans les sections suivantes.

D'un point de vue pratique, ce formalisme commun permet de tester facilement différentes méthodes d'accélération.

II.1.3.a Transformation vectorielle basée sur le résidu

Soit $(X^{(n)})_n$ une suite de vecteurs de \mathbb{R}^d convergeant vers une limite inconnue X , M un entier tel que $M < d$ et $(Z_i^{(n)})_n, i = 1, \dots, M$ des suites vectorielles arbitraires de \mathbb{R}^d convergeant vers 0. Nous définissons la transformation Y permettant de transformer la suite $(X^{(n)})_n$ en la suite $(Y^{(n)})_n$:

$$Y^{(n)} = X^{(n)} - \sum_{i=1}^M \lambda_i^{(n)} Z_i^{(n)}, \quad (\text{II.1.11})$$

avec $\lambda_i^{(n)}, i = 1, \dots, M$ des scalaires.

Pour $M = 1$, l'expression (II.1.11) se ramène à l'approche hybride non linéaire proposée dans [Brezinski et Chehab, 1998].

Lorsque les $\lambda_i^{(n)}$ ne dépendent pas de n ($\lambda_n^i \equiv \lambda^i, \forall n$), nous constatons immédiatement que la suite $Y^{(n)}$ converge vers X et ainsi la transformation Y est dite régulière. En pratique, comme les $\lambda_i^{(n)}$ varient avec n , la régularité de Y ne peut être garantie (en particulier la limite des $(\lambda_i^{(n)})_n$ ne doit pas tendre vers l'infini). Ce défaut est assez répandu parmi les méthodes d'accélération existantes, c'est le cas par exemple pour le procédé du Δ^2 d'Aitken (cf. [Brezinski et Redivo Zaglia, 1991]).

Cependant, sous l'hypothèse classique (cf. par exemple [Aitken, 1926 ; Brezinski et Redivo Zaglia,

1991 ; Jbilou et Sadok, 2000]) qui consiste à supposer les mêmes coefficients dans les expressions de $Y^{(n)}$ et $Y^{(n+1)}$, une estimation de X peut être obtenue en minimisant $\delta Y^{(n)} = Y^{(n+1)} - Y^{(n)}$ par rapport à ces coefficients. Ainsi on peut écrire :

$$Y^{(n+1)} = X^{(n+1)} - \sum_{i=1}^M \lambda_i^{(n)} Z_i^{(n+1)}, \quad (\text{II.1.12})$$

et ainsi

$$\delta Y^{(n)} = \delta X^{(n)} - \sum_{i=1}^m \lambda_i^{(n)} \delta Z_i^{(n)}. \quad (\text{II.1.13})$$

où l'opérateur de différence δ agit sur l'indice d'itération : $\delta S^{(n)} = S^{(n+1)} - S^{(n)}$.

Les $\lambda_i^{(n)}$ étant choisis pour minimiser $\|\delta Y^{(n)}\|$, cela conduit à

$$\|\delta Y^{(n)}\| \leq \|\delta X^{(n)}\| \quad (\text{II.1.14})$$

pour la norme choisie (puisque l'égalité est obtenue avec des 0). Ainsi la suite vectorielle $(Y^{(n)})_n$ converge plus vite que $(X^{(n)})_n$.

Pour la norme euclidienne, une expression des $\lambda_i^{(n)}$ peut être obtenue via la solution de l'équation normale. À noter qu'en pratique, d'autres stratégies de minimisation sont souvent utilisées comme l'orthogonalisation de Gram-Schmidt ou une décomposition QR , qui semble dans le cas présent la plus efficace [Degroote *et al.*, 2009 ; Walker et Ni, 2011].

Soit les matrices de dimensions $d \times M$ suivantes :

$$Z^{(n)} = (Z_1^{(n)} \dots Z_M^{(n)}), \quad \delta Z^{(n)} = (\delta Z_1^{(n)} \dots \delta Z_M^{(n)}).$$

La minimisation par moindres carrés conduit à

$$\lambda^{(n)} = \begin{pmatrix} \lambda_1^{(n)} \\ \vdots \\ \lambda_M^{(n)} \end{pmatrix} = (\delta Z^{(n)T} \delta Z^{(n)})^{-1} \delta Z^{(n)T} \delta X^{(n)}. \quad (\text{II.1.15})$$

Si deux des vecteurs composant $\delta Z^{(n)}$ sont colinéaires, la matrice $\delta Z^{(n)T} \delta Z^{(n)}$ devient singulière, son inversion est donc impossible. Dans ce cas, le $\lambda_i^{(n)}$ correspondant est mis à 0 et le système est réduit.

L'expression (II.1.15) est alors utilisée pour définir deux transformations de suites qui vont conduire à différentes méthodes d'accélération (cf. section suivante) :

$$Y^{(n)} = X^{(n)} - Z^{(n)} (\delta Z^{(n)T} \delta Z^{(n)})^{-1} \delta Z^{(n)T} \delta X^{(n)}, \quad (\text{II.1.16})$$

ou

$$Y^{(n+1)} = X^{(n+1)} - Z^{(n+1)} (\delta Z^{(n)T} \delta Z^{(n)})^{-1} \delta Z^{(n)T} \delta X^{(n)}. \quad (\text{II.1.17})$$

La formulation générique (II.1.16) est au final très proche du formalisme de la méthode d'extrapolation polynomiale décrite dans [Jbilou et Sadok, 2000]. La méthode d'extrapolation de rang réduit [Eddy, 1979] est obtenue avec $Z_i^{(n)} = \delta X^{(n+i-1)}$, et se ramène pour $M = 1$ à la méthode de Lemaréchal [Lemaréchal, 1971].

Le choix $Z_i^{(n)} = \delta X^{(n-i)}$ permet d'utiliser une combinaison linéaire des résidus précédents. On retrouve alors l'idée d'Anderson [Anderson, 1965]. Pour ce choix de $Z_i^{(n)}$, le noyau de la

transformation Y est le même que celui de la transformation de Shanks [Shanks, 1955], qui est résolue en pratique par l' ϵ -algorithme de Wynn [Wynn, 1956] :

$$\sum_{i=0}^M a_i (X^{(n-i)} - X) = 0 \quad (\text{II.1.18})$$

avec $\sum_{i=0}^M a_i \neq 0$ et $a_0 \cdot a_M \neq 0$.

De nombreuses autres expressions de $Z_i^{(n)}$ peuvent être utilisées. Par exemple, $Z_i^{(n)} = \delta^k X^{(n-i)}$, $k > 1$ comme proposé dans [Brezinski et Chehab, 1998] pour la méthode Δ^k .

II.1.3.b Méthodes d'accélération itératives basées sur le résidu

Dans cette partie, nous nous intéressons à l'application dynamique de la transformation précédente pour accélérer la convergence des suites vectorielles de point fixe (cf. Eq. (II.1.2)). Nous nous focalisons sur les méthodes itératives (ou dynamiques) à un pas (i.e. qui ne nécessitent qu'une évaluation de point fixe par itération), en opposition à des méthodes multipas comme la méthode d'Irons and Tuck [Irons et Tuck, 1969], l' ϵ -algorithme vectoriel [Wynn, 1962] ou les algorithmes d'extrapolation polynomiale introduits dans [Jbilou et Sadok, 2000].

Lors de l'application dynamique du processus d'accélération de convergence aux itérations de point fixe, nous disposons de deux suites : la suite des $(X^n)_n$ et celle des $(F(X^n))_n$. Il en découle deux classes de méthodes itératives d'accélération vectorielles basées sur la transformation (II.1.11) : les méthodes de suites croisées et les méthodes de suites alternées. Chacun de ces deux formalismes est décrit par la suite.

Comme il n'est pas garanti que la transformation Y soit régulière, le critère de convergence devra toujours porter sur le résidu de point fixe, c'est-à-dire $\Delta X^{(n)} = F(X^{(n)}) - X^{(n)}$, afin d'obtenir la solution désirée du problème de point fixe.

Première classe : méthodes de suites croisées

Ce formalisme se base sur la suite de point fixe $(F(X^{(n)}))_n$:

$$Y^{(n)} = F(X^{(n-1)}) - \sum_{i=1}^M \lambda_i^{(n)} Z_i^{(n)} \quad (\text{II.1.19})$$

$$Y^{(n+1)} = F(X^{(n)}) - \sum_{i=1}^M \lambda_i^{(n)} Z_i^{(n+1)}, \quad (\text{II.1.20})$$

et utilise la suite accélérée $(X^{(n)})_n$ uniquement pour définir les suites $(Z_i^{(n)})_n$, $i = 1, \dots, M$.

En effet, $Z_i^{(n)}$ dépend dans ce cas du résidu de point fixe $\Delta X^{(n)}$. Par exemple, le choix $Z_i^{(n)} = \delta X^{(n-i)}$ dans la transformation générique (II.1.11), devient pour les méthodes de suites croisées $Z_i^{(n)} = \Delta X^{(n-i)}$ alors que le choix $Z_i^{(n)} = \delta^2 X^{(n-i-1)}$ devient $Z_i^{(n)} = \Delta(X^{(n-i)}) - \Delta(X^{(n-i-1)}) = F(X^{(n-i)}) - X^{(n-i)} - F(X^{(n-i-1)}) + X^{(n-i-1)}$.

Par exemple, pour $M = 1$ et $Z_i^{(n)} = \Delta X^{(n-i)} = F(X^{(n-i)}) - X^{(n-i)}$, on retrouve la méthode d'accélération vectorielle standard de la sécante.

Deuxième classe : méthodes de suites alternées

Pour cette classe de méthodes, $Y^{(n)}$ est basée sur la suite $(X^{(n)})_n$ alors que $Y^{(n+1)}$ s'appuie sur la suite $(F(X^{(n)}))_n$:

$$Y^{(n)} = X^{(n)} - \sum_{i=1}^M \lambda_i^{(n)} Z_i^{(n)} \quad (\text{II.1.21})$$

$$Y^{(n+1)} = F(X^{(n)}) - \sum_{i=1}^M \lambda_i^{(n)} Z_i^{(n+1)}, \quad (\text{II.1.22})$$

où $Z_i^{(n)}$ est une fonction de $X^{(n-i)}$, $i = 0, \dots, M$ et $Z_i^{(n+1)}$ ne dépend que de $F(X^{(n-i)})$, $i = 0, \dots, M$.

Nous avons par exemple

$$\begin{cases} Z_i^{(n)} &= \delta X^{(n-i)} &= X^{(n-i+1)} &- X^{(n-i)} \\ Z_i^{(n+1)} &= \delta F(X^{(n-i)}) &= F(X^{(n-i+1)}) &- F(X^{(n-i)}) \end{cases} \quad (\text{II.1.23})$$

ou

$$\begin{cases} Z_i^{(n)} &= \delta^2 X^{(n-i-1)} &= X^{(n-i+1)} &- 2X^{(n-i)} &+ X^{(n-i-1)} \\ Z_i^{(n+1)} &= \delta^2 F(X^{(n-i-1)}) &= F(X^{(n-i+1)}) &- 2F(X^{(n-i)}) &+ F(X^{(n-i-1)}) \end{cases} \quad (\text{II.1.24})$$

Pour tout choix du type $Z_i^{(n)} = \delta^k X^{(n-i-k+1)}$, $k > 1$, l'expression de $\delta Y^{(n)} = Y^{(n+1)} - Y^{(n)}$ est une combinaison linéaire des résidus de point fixe $\Delta X^{(n)} = F(X^{(n)}) - X^{(n)}$ dont les coefficients sont identiques aux coefficients de la suite accélérée dans les équations (II.1.21) ou (II.1.22). Dans ce cas, si le processus d'accélération est une méthode à deux pas (accélération appliquée à une itération de point fixe sur deux), l'équation de $\delta Y^{(n)}$ à minimiser est la même dans les deux formalismes (suites croisées ou suites alternées). Cependant, à l'exception du cas $k = 1$ et $M = 1$, l'expression de $X^{(n+1)}$ reste différente entre chaque formalisme et ainsi la méthode d'accélération obtenue diffère également.

Remarque. *Quand un problème non linéaire $G(X) = 0$ est résolu par un procédé de point fixe (voir la dualité évoquée en introduction II.1.1), le résidu $G(X^{(n)})$ est généralement directement utilisé à la place de $F(X^{(n)}) - X^{(n)}$, voir par exemple [Eyert, 1996 ; Fang et Saad, 2009].* \square

Le choix $Z_i^{(n)} = \delta X^{(n-i)} / Z_i^{(n+1)} = \delta F(X^{(n-i)})$ (voir Eq.(II.1.23)) permet de retrouver une méthode de type Anderson [Anderson, 1965], dont la littérature récente [Eyert, 1996 ; Fang et Saad, 2009 ; Walker et Ni, 2011] confirme l'efficacité dans de nombreuses situations. Pour $M = 1$, cette méthode revient à une autre méthode de sécante vectorielle. Les deux approches vectorielles de sécante (croisée ou alternée) appliquées en alternance avec une itération classique de point fixe conduisent à la méthode d'Irons et Tuck [Irons et Tuck, 1969].

Remarque. *Il est important de souligner que les méthodes d'accélération dites « interface quasi-Newton » [Degroote et al., 2009] et « reduced order models » [Vierendeels et al., 2007], récemment introduites pour des couplages partitionnés en interaction fluide-structure, sont en réalité des méthodes d'Anderson.* \square

II.1.3.c Exemples numériques

Nous reprenons ici quelques exemples présentés dans [RH15]. Nous nous intéressons à l'accélération de la convergence linéaire des itérations de point fixe obtenues via une méthode de quasi-Newton pour résoudre l'équilibre mécanique $G(X) = 0$:

$$X = F(X) \quad \text{avec} \quad F(X) = X - K^{-1}G(X). \quad (\text{II.1.25})$$

avec K une matrice constante, qui n'est donc pas la matrice jacobienne de G . Le fait de prendre la matrice K constante fait perdre la convergence quadratique de la méthode de Newton, et même la convergence super-linéaire d'une approche de type sécante. Cependant cette approche offre des gains considérables en temps de calcul et reste applicable quand l'opérateur tangent cohérent (matrice jacobienne) n'est pas (facilement) obtainable.

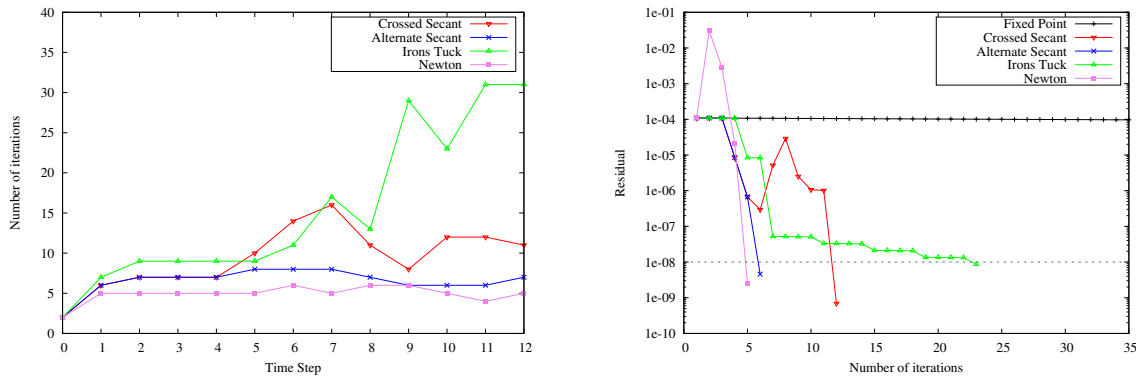
Dans le cas qui nous intéresse la matrice K est l'opérateur élastique, choisi de sorte à assurer la convergence des itérations de point fixe. Cependant, la convergence obtenue étant lente, des méthodes d'accélération doivent être appliquées : c'est la stratégie employée dans le logiciel élément finis Cast3M du CEA [Verpeaux, 2014] avec un algorithme d'Anderson.

Les deux cas tests suivants ont été réalisés dans l'outil open-source MTest, partie du projet MFront [Mfront ; Helfer et al., 2015b], développé au sein de la plateforme PLEIADES. Le vecteur inconnu X a alors 6 composantes ($d = 6$), car MTest s'intéresse au comportement mécanique en un point matériel. L'inconnue est le tenseur des déformations en ce point matériel, tenseur symétrique qui peut donc s'écrire sous la forme d'un vecteur à 6 composantes en 3D.

Nous allons comparer dans la suite plusieurs méthodes d'accélération issues des deux classes introduites précédemment. Elles se différencient par le choix du résidu $Z_i^{(n)}$ et de leur nombre M à prendre en compte.

Méthodes des résidus basées sur 2 itérations

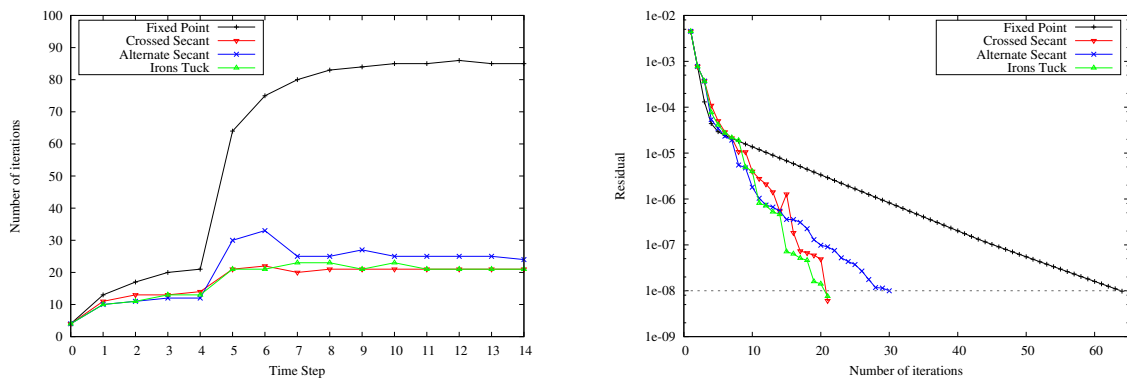
Nous nous intéressons ici à des méthodes d'accélération basées sur les 2 itérations précédentes, à savoir les méthodes de sécante (croisée ou alternée) et la méthode à deux pas d'Irons and Tuck. Dans ce cas le résidu est donc du type $Z_i^{(n)} = \delta X^{(n-i)}$ et $M = 1$. Les résultats sont résumés dans les figures II.1.4 et II.1.5. Le critère de convergence porte sur la norme maximale absolue du résidu de point fixe. La valeur seuil choisie dans les exemples suivants est de 10^{-8} , ce qui correspond à une précision relative d'environ 10^{-5} .



(a) Nombre d'itérations par pas de temps

(b) Détails des itérations pour le pas de temps #10

FIGURE II.1.4 – Méthodes des résidus basées sur 2 itérations pour le cas test Chaboche.



(a) Nombre d'itérations par pas de temps

(b) Détails des itérations pour le pas de temps #5

FIGURE II.1.5 – Méthodes des résidus basées sur 2 itérations pour le cas test Polycristaux.

Pour le cas test dit « Chaboche » (comportement plastique isotrope issu des travaux de J.L. Chaboche [Chaboche, 1989 ; Chaboche, 1993]), nous avons pu implémenter la méthode de Newton à titre de comparaison. Les itérations de point fixe sont par ailleurs très nombreuses pour ce cas test et n'ont pas pu être tracées sur la figure II.1.4a.

Nous pouvons déjà constater que l'accélération de convergence est très efficace sur ce type de problème de quasi-Newton. Par contre, il ne semble pas se dégager de méthode « universellement la plus efficace », l'approche la plus performante n'étant pas la même dans les 2 cas.

Nous pouvons par ailleurs voir sur le cas test « Chaboche » que l'accélération de convergence d'une méthode de quasi-Newton linéaire peut concurrencer la méthode de Newton quadratique en nombre d'itérations (ici avec la sécante alternée), en particulier sur le détail de convergence du résidu sur la figure II.1.4b. Étant donné que l'approche accélérée ne requiert pas le calcul de la matrice jacobienne, elle en devient beaucoup moins coûteuse en temps de calcul que la méthode de Newton.

Nous remarquons un comportement un peu chaotique de la méthode de sécante croisée tout en accélérant grandement les itérations de point fixe. Les 2 autres méthodes semblent avoir une convergence monotone en fonction des itérations, cf. figures II.1.4b et II.1.5b.

Nous avons pu obtenir des ordres de convergence numériques des méthodes de types sécante et de Newton. La méthode de Newton converge comme prévu théoriquement à l'ordre 2 et nous trouvons un résultat intéressant pour les méthodes vectorielles de sécante car leur ordre de convergence semble coïncider avec l'ordre de convergence théorique obtenu dans le cas scalaire, à savoir $((1 + \sqrt{5})/2)$, cf. section II.1.2.a.

Méthodes des résidus basées sur 3 itérations

Nous comparons dans cette section les résultats obtenus via plusieurs méthodes des résidus basées sur 3 itérations :

- $M = 1$ et $Z_1^{(n)} = \delta^2 X^{(n-2)}$: approches dites δ^2
- $M = 2$ et $Z_i^{(n)} = \delta X^{(n-i)}$: approches dites $2 - \delta$

Nous avons pu montrer dans [RH15], qu'il fallait impérativement que le critère de convergence porte sur le résidu de point fixe $\Delta X^{(n)} = F(X^{(n)}) - X^{(n)}$ quelle que soit la méthode d'accélération afin de détecter les transformations non régulières (convergeant mais pas vers la solution du problème de point fixe).

Par ailleurs, nous avons constaté que les méthodes de type δ^2 n'étaient pas très efficaces, l'approche δ^2 croisée en particulier conduisant à un nombre d'itérations similaire voire supérieur à celui obtenu avec des itérations de point fixe. L'ordre de convergence de ces approches semble être linéaire.

Les méthodes de type $2\text{-}\delta$ semblent avoir comme les approches $1\text{-}\delta$ (sécante) un ordre de convergence en $(1 + \sqrt{5})/2$. On peut penser par extrapolation de ce résultat que toutes les approches de type $M\text{-}\delta$ ont un ordre de convergence similaire à celui de la sécante scalaire.

Les performances des 3 approches basées sur 3 itérations les plus performantes (méthode δ^2 alternée, méthode $2\text{-}\delta$ croisée et méthode $2\text{-}\delta$ alternée) ont été comparées aux 2 approches de sécante (croisée ou alternée), cf. figure II.1.6.

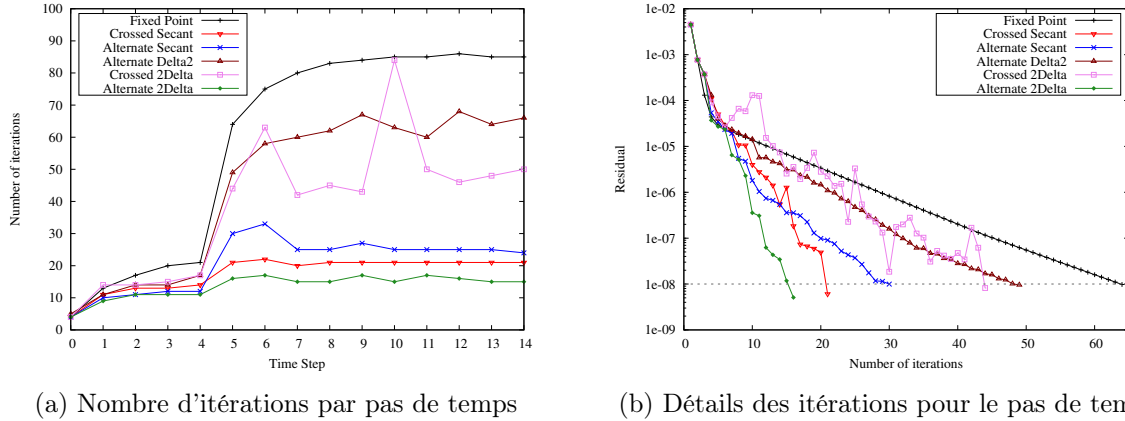


FIGURE II.1.6 – Détails des méthodes des résidus basées sur 2 et 3 itérations pour le cas test Polycristaux avec $\varepsilon = 10^{-8}$

L'approche $2\text{-}\delta$ alternée apparaît clairement comme la plus performante ici (ce résultat est confirmé dans l'autre cas test). La comportement chaotique en résidu des approches de type croisée semble confirmé. Le comportement de l'approche δ^2 croisée n'est également pas stable en fonction du problème de point fixe considéré (le pas de temps ici, cf. figure II.1.6a).

II.1.3.d Conclusions

L'introduction d'un formalisme générique pour les méthodes d'accélération vectorielle nous a permis de tester facilement diverses méthodes d'accélération basées sur des résidus de point fixe. Pour les cas tests considérés de dimension $d = 6$, la méthode dite $2\text{-}\delta$ alternée, déjà connue comme une alternative de la méthode d'Anderson avec $M = 2$ dans la littérature, apparaît comme la méthode d'accélération la plus performante. Elle améliore en particulier les performances des approches de type sécante.

Cette conclusion nous inciterait donc à penser que pour d plus grand (nombre d'inconnues) il faudrait alors travailler sur des méthodes $M\text{-}\delta$ alternées avec M plus grand que 2. Cependant, il est important de souligner que dans ce cas $M + 1$ couples d'itérés doivent être conservés, ce qui peut limiter les performances de l'approche pour des problèmes de grande dimension. Par ailleurs, plus on se rapproche de la solution, plus il est intéressant de réduire l'espace de minimisation aux derniers itérés. Un compromis sur M est donc à trouver, la valeur de 2 ou 3 semblant raisonnablement cohérente.

II.1.4 Directions de recherche

Le formalisme générique que nous avons introduit pour effectuer une accélération vectorielle de point fixe a depuis été utilisé avec succès dans la littérature pour des applications diverses telles que le couplage multiphysique ou multichamp [Viot *et al.*, 2018], la résolution mécanique non linéaire par transformée de Fourier rapide [Chen *et al.*, 2019 ; Marano *et al.*, 2019], la réduction de modèle pour des procédés de soudage [Lu *et al.*, 2018], la distribution de population [Cordero-Grande, 2020], les approches de type phase-field [Lamorgese et Mauri, 2017],...

Concernant la partie théorique du formalisme d'accélération basé sur les résidus, plusieurs points seraient intéressants à creuser. Premièrement, il serait utile de pouvoir démontrer la régularité de la transformation dans le cas où la fonction Z est uniquement basée sur les résidus de point fixe. Par ailleurs, il serait intéressant de travailler sur l'ordre de convergence des approches de type $M-\delta$ qui numériquement semble correspondre à celui de la sécante scalaire. Enfin, les approches alternées s'avèrent conduire à un comportement monotone décroissant du résidu de point fixe en fonction des itérations alors que les approches croisées présentent une convergence en itérations plus chaotique. Il faudrait travailler à la preuve de cette propriété qui semble être corrélée au caractère croisé ou non des suites dans la transformation Y .

Concernant la partie applicative, il serait intéressant de travailler sur le nombre M de résidus à conserver pour avoir une efficacité optimale des approches de type $M-\delta$. Ensuite, il faudrait à présent tester les approches qui se sont dégagées comme les plus performantes sur un couplage multiphysique. Il s'agirait notamment de vérifier que les approches $M-\delta$ alternées (de type Anderson) restent les plus efficaces.

Les premiers résultats de tests dans les applications de la plateforme PLEIADES font ressortir une tendance lorsque les itérations de point fixe standard ne convergent pas, cas de figure non étudié dans [RH15]. En effet, lorsque les itérations de point fixe divergent sous forme d'oscillations (rayon spectral inférieur à -1), la méthode de la sécante croisée semble la plus performante, voir figure II.1.7. Elle est finalement la seule méthode permettant de concurrencer efficacement la méthode de Steffensen pseudo-vectorielle (*i.e.* méthode de Steffensen scalaire appliquée à chaque composante du vecteur inconnu).

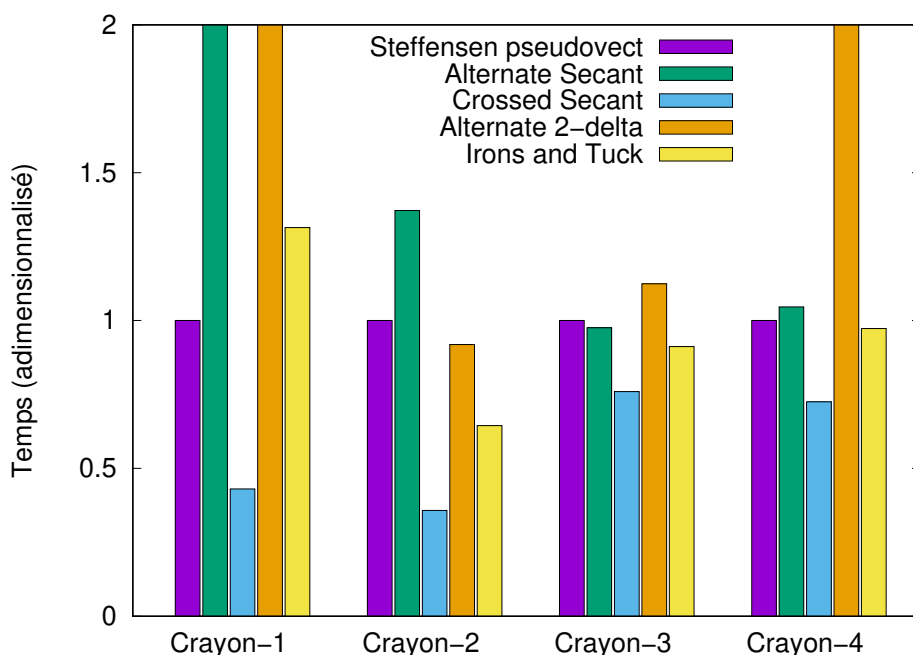


FIGURE II.1.7 – Accélération vectorielle du couplage multiphysique des applications PLEIADES

On peut y voir clairement l’analogie avec certaines propriétés des méthodes de relaxation, l’approche de la sécante croisée apparaissant clairement dans son écriture comme une méthode de relaxation dynamique, contrairement à l’approche de la sécante alternée. Des tendances similaires ont été obtenues lors de la résolution par point fixe du bilan de population d’un réacteur parfaitement agité [RLR⁺21]. Ce comportement très intéressant de l’approche de sécante croisée, en cas de divergence d’une suite vectorielle, reste à conforter.

Dans le cas d’un couplage multiphysique ou multimodèle de type point fixe, la question « théorico-applicative » de la justification de l’utilisation communément effectuée en pratique d’une accélération vectorielle à un sous-ensemble des inconnues (lorsque le nombre de modèle est supérieur à 2) dont le sous-couplage associé n’est alors plus un couplage de point fixe, reste ouverte.

Enfin, les modèles physiques couplés (cf. fonctions F_i) sont généralement basés sur des résolutions itératives internes. Des techniques basées sur des convergences partielles (ou lissages), même si intrusives et souvent heuristiques, ont montré leur intérêt en temps de calcul pour des systèmes fortement couplés [Senecal et Ji, 2017]. Elles évitent en effet une sur-résolution dans les différents solveurs aux premières itérations de point fixe externe. Ce processus se fait généralement au détriment du nombre d’itérations de point fixe externe. L’idée de combiner convergence partielle et accélération de point fixe est tentante mais malheureusement les résultats ne sont pas satisfaisants [Cattaneo et al., 2021] du fait de la non-unicité induite sur les fonctions F_i . Cela ouvre la voie à la mise en œuvre de méthodes d’accélération de point fixe robustes sur solutions bruitées ou de stratégies de couplage avec convergences partielles robustes. Dans ce cadre, je participe aux points d’avancement des travaux de thèse de Robin Delvaux (2019-2022) portant sur des algorithmes de couplage entre neutronique et thermohydraulique pour la physique des réacteurs nucléaires.

II.2 Réduction d'ordre de modèle pour la mécanique du contact

II.2.1 Introduction

La simulation numérique de phénomènes physiques passe le plus souvent par la résolution d'équations aux dérivées partielles (EDP). De nombreuses méthodes d'approximation numérique ont été développées pour résoudre toutes sortes d'EDP. Parmi les plus connues, on peut citer la méthode des éléments finis, des différences finies, des volumes finis, des éléments discrets, des éléments frontières, etc. Ces méthodes peuvent devenir très coûteuses pour des problèmes de grandes dimensions ou lorsque le problème présente des fortes non-linéarités. Pour réduire le temps de calcul, des moyens indépendants de l'évolution de la puissance des processeurs ont été développés. Le plus connu est le calcul parallèle dans le domaine de l'informatique mais cela nécessite de disposer d'un plus grand nombre de processeurs. Un autre moyen est la réduction d'ordre de modèles qui propose un complément, ou une alternative, aux méthodes d'approximation classiques dans le but de diminuer la taille du problème à résoudre.

Dans sa définition la plus générale, la réduction d'ordre de modèles consiste à proposer un modèle dont l'espace d'approximation des solutions est réduit, ROM pour Reduced-Order Model en anglais, comparé à un modèle d'ordre plein, abrégé FOM pour Full-Order Model en anglais, obtenu généralement par une méthode d'approximation numérique classique. L'intérêt de la réduction d'ordre de modèles (en terme notamment de temps de calcul) se mesure au facteur de réduction de l'espace d'approximation des solutions, permettant de conserver une solution acceptable (dans un sens à définir) pour un certain espace paramétrique.

C'est ainsi la construction de l'espace d'approximation réduit qui différencie les méthodes de réduction d'ordre de modèles. Deux catégories principales de méthodes existent dans la littérature :

- les méthodes dites *a priori* pour lesquelles l'espace d'approximation est construit à la volée, dont la méthode plus connue est certainement la Décomposition Propre Généralisée [Ammar *et al.*, 2006 ; Chinesta *et al.*, 2013] ou PGD (pour Proper Generalized Decomposition) ;
- les méthodes dites *a posteriori* qui utilisent des résultats de calculs obtenus avec le FOM, communément appelés snapshots d'après la terminologie de Sirovich [Sirovich, 1987], pour construire l'espace d'approximation réduit. Ces dernières rentrent dans le cadre des méthodes d'apprentissage automatique (ou « machine learning » en anglais).

Comme mentionné dans la section I.2, nous nous sommes intéressés dans le cadre de la thèse de Jules Fauque [Fauque, 2018] à la mise en place d'une méthode de réduction d'ordre de modèle permettant de réduire les temps de calcul du modèle mécanique éléments finis dans le cadre du couplage multiphysique de la plateforme PLEIADES. La méthode ROM devait être la moins intrusive possible et pouvoir être facilement mise en place dans un solveur existant, c'est pourquoi nous nous sommes appuyés sur une méthode *a posteriori*.

Dans ces méthodes, la base réduite engendrant l'espace d'approximation réduit est soit directement composée de snapshots, soit de vecteurs obtenus en extrayant avec une méthode de compression de données l'information la plus importante contenue dans ces snapshots.

La méthode de compression de données la plus connue est la décomposition orthogonale aux valeurs propres ou POD (pour Proper Orthogonal Decomposition) [Lumley, 1967 ; Sirovich, 1987] car elle permet d'obtenir une base réduite optimale. En effet, cette méthode s'appuie sur une approche de factorisation de matrice, la décomposition en valeurs singulières ou SVD (pour Singular Value Decomposition) [Eckart et Young, 1936] qui peut être vue comme la généralisation de la diagonalisation aux matrices rectangles. La base réduite est alors composée des l premiers vecteurs singuliers, car la SVD présente l'avantage majeur d'ordonner les vecteurs singuliers par ordre décroissant des valeurs singulières (représentant l'énergie transportée et directement liées à l'erreur d'approximation).

Une fois la base réduite construite par la méthode choisie, le ROM est obtenu par projection du FOM sur la base réduite.

Dans ce chapitre, afin d'éviter toute confusion, les tenseurs et hypermatrices sont soulignés autant de fois que leur ordre.

À titre d'illustration, considérons que le FOM se ramène à la résolution du problème discrétisé linéaire suivant (ce qui est un cas assez courant) :

$$\begin{cases} \text{Trouver } \underline{U} \in \mathbb{R}^N \text{ tel que} \\ \underline{K}\underline{U} = \underline{F} \end{cases} \quad (\text{II.2.1})$$

avec $\underline{K} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ et $\underline{F} \in \mathbb{R}^N$.

Pour obtenir le problème d'ordre réduit, on écrit la solution recherchée \underline{U} dans la base réduite discrète \underline{V} (de taille $N \times l$) : $\underline{U} = \underline{V}\underline{\gamma}$, où $\underline{\gamma}$ est le nouveau vecteur d'inconnues de taille l , $l \ll N$, contenant les degrés de liberté associés aux fonctions de la base réduite. Finalement, on projette le problème (II.2.1) à gauche sur la base réduite discrète, ce qui correspond à la discrétisation des fonctions tests de la base réduite dans la base complète. Le ROM s'écrit alors

$$\begin{cases} \text{Trouver } \underline{\gamma} \in \mathbb{R}^l \text{ tel que} \\ \underline{V}^T \underline{K} \underline{V} \underline{\gamma} = \underline{V}^T \underline{F}. \end{cases} \quad (\text{II.2.2})$$

En posant $\tilde{\underline{K}} = \underline{V}^T \underline{K} \underline{V}$ et $\tilde{\underline{F}} = \underline{V}^T \underline{F}$, on reconnaît un problème de type (II.2.1) mais de taille $l \times l$ au lieu de $N \times N$. Il est à noter cependant que la matrice $\tilde{\underline{K}}$ est en général pleine contrairement à la matrice \underline{K} qui est une matrice creuse.

Le traitement du contact en mécanique du solide occupe la majeure partie du temps de résolution. L'intérêt de la réduction d'ordre de modèles pour ce type de problème est donc évident. Nous avons besoin en plus dans notre cas de pouvoir traiter des non-linéarités matérielles. Ainsi d'une façon générale, nous voulons disposer d'une méthode de réduction d'ordre de modèle efficace sur des problèmes non linéaires avec inégalités variationnelles.

L'introduction de méthodes *a posteriori* pour des inégalités variationnelles est très récente et très limitée dans la littérature. Cependant, ces méthodes ne sont pas efficaces pour des comportements matériaux non linéaires.

Nous avons donc décidé de prendre le problème dans l'autre sens et de travailler sur l'extension à des inégalités variationnelles de méthodes de type hyper-réduction, particulièrement bien adaptées à des problèmes avec termes non linéaires. En effet, les méthodes *a posteriori* standard basées sur une projection du FOM (cf. équation (II.2.2)) ne sont plus efficaces sur des problèmes non linéaires résolus de manière itérative (algorithme de type Newton), car elles nécessitent la construction d'un ROM à chaque itération et l'évaluation de termes non linéaires de grande dimension. Les méthodes de type hyper-réduction (Empirical Interpolation Method–EIM [Barrault *et al.*, 2004], Discrete Empirical Interpolation Method–DEIM [Chaturantabut et Sorensen, 2010], cubature [Farhat *et al.*, 2014], HR-RID [Ryckelynck, 2009],...) viennent pallier ces limitations en réduisant la complexité du problème non linéaire à un certain nombre d'entrées qui ne dépend plus de la taille du FOM.

Du fait qu'elle soit à la fois peu intrusive et ait déjà fait ses preuves pour des problèmes de mécanique avec des matériaux non linéaires [Ryckelynck *et al.*, 2015 ; Ryckelynck *et al.*, 2016], c'est la méthode HR-RID, abrégée en HR dans la suite, que nous avons décidé d'étendre pour traiter le contact. Cette méthode repose toujours sur la projection du FOM sur une base réduite mais également sur la résolution du modèle sur un maillage réduit, appelé domaine d'intégration réduit ou RID (Reduced Integration Domain en anglais). Cette particularité permet de réduire considérablement le temps de calcul puisque la projection du FOM ne se fait que sur la base réduite restreinte au RID.

Dans [FRR18], nous avons introduit la méthode d'hyper-réduction hybride ou HHR (Hybrid Hyper-Reduced method) pour le traitement du contact (sans frottement) dans le cas élastostatique. Puis dans [FRR21], nous appliquons la méthode HHR au cas du contact avec non-linéarités matérielles. Ces contributions sont exposées dans les sections suivantes.

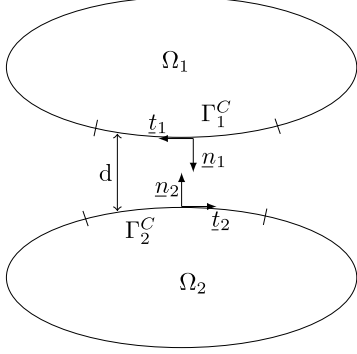
II.2.2 Hyper-réduction hybride pour la mécanique du contact élastique

II.2.2.a Rappel du problème de contact sans frottement en élastostatique

D'un point de vue mécanique, le contact est la notion d'interaction entre un ou plusieurs objets qui vont échanger de l'énergie. Il intervient à l'interface entre deux objets qui se rencontrent. Sa nature discontinue en fait un phénomène très non linéaire.

La formulation forte du problème de contact sans frottement en élastostatique (avec $\underline{\underline{C}}$ le tenseur d'élasticité d'ordre 4) est donnée en (II.2.3). On s'intéresse ici à un domaine $\Omega = \bigcup_i \Omega_i$ de frontière $\partial\Omega = \bigcup_i \partial\Omega_i$ ayant une normale extérieure unitaire \underline{n} . Cette frontière est partitionnée de telle sorte que $\partial\Omega = \Gamma^D \cup \Gamma^N \cup \Gamma^C$, avec $\Gamma^D \cap \Gamma^N = \emptyset$ et $\Gamma^D \cap \Gamma^C = \emptyset$ où Γ^C est la zone de contact potentiel, et Γ^D et Γ^N sont les frontières avec conditions aux limites de Dirichlet et Neumann respectivement. Les solides Ω_i sont espacés d'un jeu initial noté d . On note u_N le déplacement normal relatif calculé entre les frontières Γ_i^C (avec $\Gamma^C = \bigcup_i \Gamma_i^C$) potentiellement en contact.¹

Par souci de lisibilité, la variable d'espace a été omise mais toutes les inconnues et les conditions aux limites en dépendent.

$$(II.2.3) \quad \left\{ \begin{array}{ll} -\operatorname{div} \underline{\underline{\sigma}} = \underline{f} & \text{dans } \Omega, \\ \underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{\varepsilon}} & \text{dans } \Omega, \\ \underline{\underline{\varepsilon}} = \frac{1}{2} (\operatorname{grad} \underline{u} + (\operatorname{grad} \underline{u})^T) & \text{dans } \Omega, \\ \underline{u} = \underline{u}_0 & \text{sur } \Gamma^D, \\ \underline{\underline{\sigma}} \underline{n} = \underline{g} & \text{sur } \Gamma^N, \\ \underline{\underline{\sigma}} \underline{n} = F_N \underline{n} & \text{sur } \Gamma^C, \\ u_N \leq d, F_N \leq 0, (d - u_N) F_N = 0 & \text{sur } \Gamma^C. \end{array} \right.$$


La force normale de contact F_N (variant le long Γ^C) est une inconnue du problème de contact. Les conditions de la dernière ligne du problème (II.2.3) portent le nom de conditions de Hertz-Signorini-Moreau [Signorini, 1959] et transcrivent respectivement la non-pénétration, la non-adhésion et la condition de complémentarité. Ces conditions coïncident avec les conditions de Karush-Kuhn-Tucker [Karush, 1939 ; Kuhn et Tucker, 1951] en théorie de l'optimisation. En chaque point de Γ^C , l'espace admissible ne contient que deux statuts :

- contact : $u_N = d$ et $F_N \leq 0$
- décollement : $u_N < d$ et $F_N = 0$

Les inégalités présentes dans les conditions de Hertz-Signorini-Moreau conduisent à une formulation faible du problème (II.2.3) sous forme d'une inégalité variationnelle [Duvaut et Lions, 1976] :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Trouver } \underline{u} \in \mathcal{V}_C \text{ tel que} \\ a(\underline{u}, \underline{v} - \underline{u}) \geq l(\underline{v} - \underline{u}), \quad \forall \underline{v} \in \mathcal{V}_C \end{array} \right. \quad (II.2.4)$$

avec

$$\mathcal{V}_C = \{ \underline{v} \in \mathcal{V} \mid v_N \leq d \text{ sur } \Gamma^C \} \quad (II.2.5)$$

où \mathcal{V} , a et l sont respectivement l'espace des solutions, la forme bilinéaire et la forme linéaire du problème sans contact :

$$\mathcal{V} = \{ \underline{v} = \underline{r}(u_0) + \tilde{\underline{u}} \mid \tilde{\underline{u}} \in \mathcal{V}_0 \}, \quad \mathcal{V}_0 = \{ \underline{v} \in (H^1(\Omega))^m \mid \underline{v} = \underline{0} \text{ sur } \Gamma^D \}$$

1. Par exemple, dans le cas de 2 solides en contact, u_N est défini par $u_N = \underline{u}_1 \cdot \underline{n}_1 + \underline{u}_2 \cdot \underline{n}_2$, avec \underline{u}_i le déplacement sur Γ_i^C ($i = 1, 2$). Sous l'hypothèse des petites perturbations, on a $\underline{n}_1 = -\underline{n}_2$.

avec m la dimension de l'espace et $\underline{r}(\underline{u}_0)$ un relèvement de \underline{u}_0 dans Ω

$$\begin{aligned} a(\underline{u}, \underline{v}) &= \int_{\Omega} \underline{\varepsilon}(\underline{v}) : \underline{\underline{C}} : \underline{\varepsilon}(\underline{u}) \, d\Omega, \\ l(\underline{v}) &= \int_{\Omega} \underline{f}^T \underline{v} \, d\Omega + \int_{\Gamma^N} \underline{g}^T \underline{v} \, d\Gamma. \end{aligned}$$

À cause de l'inéquation variationnelle, le problème de contact est un problème intrinsèquement non linéaire.

Parmi les approches existantes pour traiter numériquement le contact, nous nous intéressons dans ce chapitre à la méthode des multiplicateurs de Lagrange qui permet de vérifier exactement l'ensemble des conditions de contact, notamment la condition de non-pénétration. La formulation faible (II.2.4) est ainsi équivalente au problème de point-selle suivant [Kikuchi et Oden, 1988 ; Chabrand *et al.*, 1998] :

$$\begin{cases} \text{Trouver } (\underline{u}, \lambda) \in \mathcal{V} \times \mathcal{W} \text{ tel que} \\ a(\underline{u}, \underline{v}) + b(\underline{v}, \lambda) = l(\underline{v}), & \forall \underline{v} \in \mathcal{V}_0 \\ b(\underline{u}, \kappa - \lambda) \leq \langle d, \kappa - \lambda \rangle_{H^{\frac{1}{2}}(\Gamma^C), H^{-\frac{1}{2}}(\Gamma^C)}, & \forall \kappa \in \mathcal{W} \end{cases} \quad (\text{II.2.6})$$

avec $\mathcal{W} = \{\kappa \in H^{-\frac{1}{2}}(\Gamma^C) \mid \kappa \geq 0\}$ où $H^{-\frac{1}{2}}$ dénote le dual de $H^{\frac{1}{2}}$, $b(\underline{v}, \kappa) = \langle v_N, \kappa \rangle_{H^{\frac{1}{2}}(\Gamma^C), H^{-\frac{1}{2}}(\Gamma^C)}$ et $\langle \cdot, \cdot \rangle_{H^{\frac{1}{2}}, H^{-\frac{1}{2}}}$ le produit de dualité.

Aussi, le multiplicateur de Lagrange λ obtenu en résolvant (II.2.6) est égal à l'opposé de la force de contact, $\lambda = -F_N$. Le problème discrétisé par éléments finis, correspondant au FOM dans la suite, s'écrit alors

$$\begin{cases} \text{Trouver } (\underline{U}, \underline{\Lambda}) \in \mathbb{R}^N \times (\mathbb{R}^+)^{N_\lambda} \text{ tel que} \\ \underline{\underline{K}} \underline{U} + \underline{\underline{B}}^T \underline{\Lambda} = \underline{F} \\ \underline{\underline{B}} \underline{U} \leq \underline{D} \\ \underline{\Lambda}^T (\underline{D} - \underline{\underline{B}} \underline{U}) = 0 \end{cases} \quad (\text{II.2.7})$$

où N et N_λ correspondent respectivement au nombre de degrés de liberté associés à la variable primale (\underline{U}) et à la variable duale ($\underline{\Lambda}$). Ici N_λ représente le nombre total de contacts potentiels. Les vecteurs ou matrices $\underline{\underline{K}} \in \mathbb{R}^{N \times N}$, $\underline{\underline{B}} \in \mathbb{R}^{N_\lambda \times N}$, $\underline{F} \in \mathbb{R}^N$, $\underline{D} \in \mathbb{R}^{N_\lambda}$ correspondent à la discrétisation des formes $a(\cdot, \cdot)$, $b(\cdot, \cdot)$, $l(\cdot)$ et du jeu d respectivement. La matrice $\underline{\underline{K}}$ est la matrice de rigidité usuelle et la matrice $\underline{\underline{B}}$ est appelée matrice de rigidité de contact. Chaque ligne de $\underline{\underline{B}}$ correspond à un contact potentiel et le produit $\underline{\underline{B}} \underline{U}$ correspond au déplacement relatif sur la zone de contact avec \underline{D} le jeu initial.

Le problème de point-selle (II.2.7) est bien posé. En effet, il vérifie la condition inf-sup ou Ladyzenskaia-Babuška-Brezzi (LBB) [Babuška, 1973 ; Brezzi, 1974] car par construction la rigidité de contact $\underline{\underline{B}}$ est de rang plein en ligne.

Remarque. *Le problème discrétisé (II.2.7) assure que la condition de complémentarité est vérifiée en tout point de la surface de contact discrète.* \square

L'approche de résolution la plus utilisée pour résoudre le problème (II.2.7) est une méthode d'activation des statuts [Abide *et al.*, 2016], ou active-set strategy en anglais, qui permet de se ramener d'une inégalité variationnelle à une égalité variationnelle que l'on sait résoudre par les méthodes de résolution standard. Cette méthode va itérativement activer/désactiver des statuts de contact jusqu'à trouver une solution qui respecte l'ensemble des conditions de contact. A chaque itération, les inconnues duales (multiplicateurs de Lagrange) sont définies uniquement sur la zone de contact activée, ce qui permet de naturellement vérifier l'équation de complémentarité.

II.2.2.b Méthode d'Hyper-Réduction Hybride

Par rapport au problème standard (II.2.1), le problème de contact mixte (II.2.7) comporte des inconnues supplémentaires qui sont les multiplicateurs de Lagrange. Pour réduire au plus l'ordre du modèle, il semble justifié de construire, en plus de la base réduite associée aux déplacements, une base réduite associée aux multiplicateurs de Lagrange. C'est ce qui est fait dans les articles [Haasdonk *et al.*, 2012] et [Balajewicz *et al.*, 2016]. Il faut noter que la base duale (associée aux multiplicateurs de Lagrange) doit être positive. En pratique, il est très difficile de trouver une bonne base réduite approximant les multiplicateurs de Lagrange. De plus, après projection du modèle FOM sur les deux bases réduites, le ROM vérifie des conditions de contact projetées. Ainsi les conditions de non-pénétration et de complémentarité ne sont alors plus vérifiées localement dans les méthodes existantes dans la littérature.

Dans [FRR18], nous avons proposé une extension de la méthode d'hyper-réduction (HR) [Ryckelynck, 2009] avec RID, domaine d'intégration réduit, au problème de contact élastique traité par multiplicateurs de Lagrange.

Grâce à la restriction du domaine au RID, le nombre de contacts potentiels est fortement diminué. Ainsi, nous avons choisi de prendre pour base duale réduite, la restriction de la base du FOM sur le RID. Naturellement, cette base duale permet d'obtenir une très bonne prévision des forces de contact sur le RID. Par ailleurs, la base duale réduite discrète étant égale à l'identité sur le RID, la projection sur cette base permet de respecter les conditions de contact sur le RID. La base primale réduite est quant à elle obtenue sur tout le domaine de façon optimale par POD.

La construction du RID, appelé Ω_A , est la même que celle préconisée dans [Ryckelynck, 2009], à savoir que le RID s'appuie sur les nœuds liés aux points d'interpolation sélectionnés par DEIM [Chaturantabut et Sorensen, 2010] à partir d'une ou plusieurs bases réduites, préférentiellement des bases POD (typiquement, la base réduite primale POD mais également une base réduite POD duale afin de capter les principales zones de contact,...).

Par contre, la définition de l'ensemble \mathcal{A} des nœuds intérieurs à Ω_A a dû être modifiée pour tenir compte d'une éventuelle partie Γ_I^C de $(\Gamma^C \cap \partial\Omega_A)$ où le jeu ne peut pas être calculé faute d'un point manquant en face, cf. figure II.2.1. En introduisant Ω_B le complémentaire de Ω_A dans Ω ($\Omega = \Omega_A \cup \Omega_B$), nous obtenons le nouvel ensemble \mathcal{A} donné par l'équation (II.2.8).

$$\mathcal{A} = \left\{ i \in \llbracket 1, N \rrbracket \mid \int_{\Omega_B} \varphi_i^T \varphi_i d\Omega + \int_{\Gamma_I^C} \varphi_i^T \varphi_i d\Gamma = 0 \right\}. \quad (\text{II.2.8})$$

Cette partie Γ_I^C de la frontière de contact potentiel est donc à considérer comme une frontière fictive du RID en complément de $\Omega_A \cap \Omega_B$:

$$\Gamma^I = (\Omega_A \cap \Omega_B) \cup \Gamma_I^C \quad (\text{II.2.9})$$

On nomme alors Γ_A^C la partie de $\Gamma^C \cap \partial\Omega_A$ où le jeu peut être calculé : $\Gamma_A^C = (\Gamma^C \cap \partial\Omega_A) \setminus \Gamma^I$.

Remarque. Dans la thèse de J. Fauque [Fauque, 2018], nous avons proposé une autre modification de l'ensemble \mathcal{A} basée cette fois sur une extension de Ω_A permettant de calculer le jeu sur tout le RID. Il s'agit d'ajouter à Ω_A les éléments s'appuyant sur les nœuds appariés aux nœuds de Γ_I^C . Avec cette nouvelle définition de Ω_A , la frontière Γ_I^C devient alors vide et $\Gamma_A^C = (\Gamma^C \cap \partial\Omega_A)$. Cette solution permet de traiter un plus grand nombre de contacts, mais agrandit la taille du RID. \square

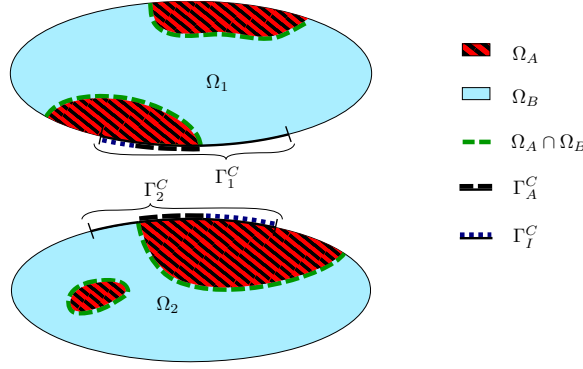


FIGURE II.2.1 – Problème de contact entre deux solides sur un domaine réduit.

En notant $\{\psi_k\}_{k=1}^l$ les l premiers vecteurs de la base POD primale, $\{\psi_k^A\}_{k=1}^l$ leur restriction à l'ensemble \mathcal{A} , la formulation faible du problème hyper-réduit hybride (ou HHR pour Hybrid Hyper-Reduced) s'écrit alors

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Trouver } (\underline{u}, \lambda) \in \mathcal{V}_{HR}^{\Omega_A} \times \mathcal{W}_{HR}^{\Omega_A} \text{ tel que} \\ a_{\Omega_A}(\underline{u}, \underline{v}) + b_{\Gamma_A^C}(\underline{v}, \lambda) = l_{\Omega_A}(\underline{v}), \quad \forall \underline{v} \in \text{vect}\{\psi_k^A\}_{k=1}^l \\ b_{\Gamma_A^C}(\underline{u}, \kappa - \lambda) \leq \langle d, \kappa - \lambda \rangle_{H^{\frac{1}{2}}(\Gamma_A^C), H^{-\frac{1}{2}}(\Gamma_A^C)}, \quad \forall \kappa \in \mathcal{W}_{HR}^{\Omega_A} \end{array} \right. \quad (\text{II.2.10})$$

avec $\mathcal{V}_{HR}^{\Omega_A} = \mathcal{V}_{POD} = \{v = r(\underline{u}_0) + \tilde{u} \mid \tilde{u} \in \text{vect}\{\psi_k\}_{k=1}^l\}$, $\mathcal{W}_{HR}^{\Omega_A} = \{\kappa \in H^{-\frac{1}{2}}(\Gamma_A^C) \mid \kappa \geq 0\}$ et $b_{\Gamma_A^C}(\underline{v}, \kappa) = \langle v_N, \kappa \rangle_{H^{\frac{1}{2}}(\Gamma_A^C), H^{-\frac{1}{2}}(\Gamma_A^C)}$.

De cette manière, la solution \underline{u} vérifie les équations de contact sur Γ_A^C .

Pour construire le ROM discret associé au problème HHR (II.2.10), nous avons besoin d'introduire les ensembles suivants :

$$\mathcal{A}_c = \{j \in \mathcal{A} \mid \exists i \in \llbracket 1, N_\lambda \rrbracket \text{ t.q. } (\underline{B})_{ij} \neq 0\}, \quad (\text{II.2.11})$$

$$\mathcal{A}_\lambda = \{i \in \llbracket 1, N_\lambda \rrbracket \mid \exists j \in \mathcal{A}_c \text{ t.q. } (\underline{B})_{ij} \neq 0\}, \quad (\text{II.2.12})$$

$$\mathcal{A}'_c = \{j \in \llbracket 1, N \rrbracket \mid \exists i \in \mathcal{A}_\lambda \text{ t.q. } (\underline{B})_{ij} \neq 0\}, \quad (\text{II.2.13})$$

avec \mathcal{A}_c l'ensemble des degrés de liberté (ddls) de \mathcal{A} localisés sur la zone de contact potentiel, \mathcal{A}_λ l'ensemble des ddls associés à la variable duale connectés à \mathcal{A}_c par la matrice \underline{B} et \mathcal{A}'_c l'ensemble des ddls associés à la variable primale connectés à \mathcal{A}_λ par \underline{B} . On note $N_\lambda^C = \text{card}(\mathcal{A}_\lambda)$.

Nous avons alors $\mathcal{A}_c \subseteq \mathcal{A}$ mais pas nécessairement $\mathcal{A}'_c \subseteq \mathcal{A}$. Par ailleurs, par définition $\mathcal{A}_c \subseteq \mathcal{A}'_c$. Le ROM associé à la méthode HHR s'écrit alors

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Trouver } (\underline{\gamma}, \underline{\Delta}[\mathcal{A}_\lambda]) \in \mathbb{R}^l \times (\mathbb{R}^+)^{N_\lambda^C} \text{ tel que} \\ \underline{V}[\mathcal{A}, :]^T \underline{K}[\mathcal{A}, \mathcal{A} \cup \mathcal{I}] \underline{V}[\mathcal{A} \cup \mathcal{I}, :] \underline{\gamma} + \underline{V}[\mathcal{A}_c, :]^T \underline{B}[\mathcal{A}_\lambda, \mathcal{A}_c]^T \underline{\Delta}[\mathcal{A}_\lambda] = \underline{V}[\mathcal{A}, :]^T \underline{F}[\mathcal{A}] \\ \underline{B}[\mathcal{A}_\lambda, \mathcal{A}'_c] \underline{V}[\mathcal{A}'_c, :] \underline{\gamma} \leq \underline{D}[\mathcal{A}_\lambda] \\ \underline{\Delta}[\mathcal{A}_\lambda]^T (\underline{D}[\mathcal{A}_\lambda] - \underline{B}[\mathcal{A}_\lambda, \mathcal{A}'_c] \underline{V}[\mathcal{A}'_c, :] \underline{\gamma}) = 0 \end{array} \right. \quad (\text{II.2.14})$$

où la notation $\underline{V}[\mathcal{A}, :]$ représente la restriction des lignes de \underline{V} à l'ensemble \mathcal{A} et \mathcal{I} désigne l'ensemble des ddls situés sur la frontière fictive Γ^I , cf. équation (II.2.15).

$$\mathcal{I} = \left\{ i \in \llbracket 1, N \rrbracket \mid \int_{\Gamma^I} \varphi_i^T \varphi_i d\Gamma \neq 0 \right\} \quad (\text{II.2.15})$$

Ainsi les ddls connectés aux ddls de \mathcal{A} via la matrice \underline{K} sont donc dans $\mathcal{A} \cup \mathcal{I}$.

On constate bien que la solution du système (II.2.14) vérifie les conditions de contact de Hertz-Signorini-Moreau dans le RID (sans projection).

Dans [FRR18], nous avons prouvé que, dans le cas où $\mathcal{A}_c = \mathcal{A}'_c$, le problème (II.2.14) était bien posé et consistant avec la formulation FOM. L'hypothèse $\mathcal{A}_c = \mathcal{A}'_c$ est vérifiée dans le cas d'un problème de contact de type obstacle ou lorsque le contact est numériquement traité par un algorithme nœud-à-nœud exigeant des maillages avec des nœuds en vis-à-vis. Cette démonstration se base sur la propriété suivante :

Propriété

└ Dans le cas où $\mathcal{A}_c = \mathcal{A}'_c$, si $\underline{\underline{B}}[\mathcal{A}_\lambda, \mathcal{A}_c] \underline{\underline{V}}[\mathcal{A}_c, \cdot]$ est de rang plein en ligne, alors le problème (II.2.14) est consistant avec la formulation EF (II.2.7).

Éléments de preuve : On s'appuie ici sur la condition inf-sup ou Ladyzenskaia-Babuška-Brezzi [Babuška, 1973 ; Brezzi, 1974] (LBB) discrète, étendue à l'ensemble de contacts potentiels (car les contacts actifs, vérifiant la condition d'égalité, sont a priori inconnus!).

Si la condition LBB discrète est vérifiée, étant donné que le terme $\underline{\underline{V}}[\mathcal{A}, \cdot]^T \underline{\underline{K}}[\mathcal{A}, \mathcal{A} \cup \mathcal{I}] \underline{\underline{V}}[\mathcal{A} \cup \mathcal{I}, \cdot]$ est bien défini par l'HR classique, alors le problème (II.2.14) admet une unique solution. De plus, le problème (II.2.14) est construit à partir du problème EF (II.2.7) en restreignant les vecteurs et matrices au RID, en projetant l'équation d'équilibre sur $\underline{\underline{V}}[\mathcal{A}, \cdot]$ et en remplaçant $\underline{\underline{U}}[\mathcal{A} \cup \mathcal{I}]$ par $\underline{\underline{V}}[\mathcal{A} \cup \mathcal{I}, \cdot]_\gamma$, d'où la consistance avec la formulation EF. ■

Le cas général où $\mathcal{A}'_c \subset \mathcal{A}_c$ le problème HR (II.2.14) est non trivial car il n'est plus symétrique, $(\underline{\underline{V}}[\mathcal{A}_c, \cdot]^T \underline{\underline{B}}[\mathcal{A}_\lambda, \mathcal{A}_c]^T)^T \neq \underline{\underline{B}}[\mathcal{A}_\lambda, \mathcal{A}'_c] \underline{\underline{V}}[\mathcal{A}'_c, \cdot]$. Ce cas fait partie des sujets de recherche à court terme que nous allons regarder.

II.2.2.c Autour de la méthode d'Hyper-Réduction Hybride

Base primale réduite hybride

D'après la propriété de la section II.2.2.b, pour que le problème HHR soit bien posé, il faut disposer d'une base primale vérifiant la condition LBB discrète étendue, à savoir que la matrice $\underline{\underline{B}}[\mathcal{A}_\lambda, \mathcal{A}_c] \underline{\underline{V}}[\mathcal{A}_c, \cdot]$ soit de rang plein en ligne. Une condition nécessaire pour vérifier cette condition est $l \geq N_\lambda^C$, soit que le nombre de vecteurs de la base réduite primale soit supérieur ou égal au nombre de contacts potentiels.

Si la condition LBB étendue n'est pas vérifiée, nous avons proposé dans [FRR18] de construire une base primale hybride afin de respecter cette condition. Cette base réduite primale hybride contient les modes POD habituels auxquels on rajoute quelques fonctions de forme EF. Ces fonctions de forme EF doivent être ici liées aux nœuds sur Γ_A^C afin d'augmenter le rang en ligne de $\underline{\underline{B}}[\mathcal{A}_\lambda, \mathcal{A}_c] \underline{\underline{V}}[\mathcal{A}_c, \cdot]$. Ainsi, la base primale réduite discrète contient $(\bar{l} - l)$ vecteurs unitaires de la base EF supplémentaires tels que $\text{card}(\mathcal{A}) \geq \bar{l} \geq \max(l, N_\lambda^C)$.

Concrètement, la stratégie primale hybride ne va modifier dans la méthode HHR (II.2.14) que la base réduite primale qui devient également hybride. Ainsi, la méthode d'hyper-réduction proposée devient doublement hybride, par la base duale et par la base primale. Nous nous retrouvons dans ce cas avec une stratégie de résolution hybride ROM/FOM, comme déjà utilisée dans d'autres méthodes de réduction d'ordre de modèles, généralement afin de mieux traiter localement des non-linéarités [Baiges et al., 2013 ; Radermacher et Reese, 2014 ; Ballani et al., 2018].

Dans la thèse de J. Fauque [Fauque, 2018] et dans l'article en préparation [FRR21], nous avons proposé un algorithme « glouton »² basé sur la minimisation du conditionnement de la matrice $\underline{\underline{B}}[\mathcal{A}_\lambda, \mathcal{A}_c] \underline{\underline{V}}[\mathcal{A}_c, \cdot]$ pour sélectionner les fonctions de forme EF à rajouter dans la base réduite

2. greedy algorithm en anglais, type d'algorithme bien connu en réduction d'ordre de modèles *a posteriori* pour la sélection des snapshots

primale hybride. Nous avons en effet remarqué que la notion de rang n'était pas suffisante pour garantir la qualité de la solution obtenue et qu'il fallait également s'intéresser au conditionnement de la matrice intervenant dans la condition LBB. Pour la norme de Frobenius, le conditionnement d'une matrice quelconque $\underline{\underline{A}}$ s'écrit :

$$\kappa(\underline{\underline{A}}) = \frac{\sigma_{\max}(\underline{\underline{A}})}{\sigma_{\min}(\underline{\underline{A}})} \quad (\text{II.2.16})$$

où σ_{\max} et σ_{\min} sont les valeurs singulières maximale et minimale de $\underline{\underline{A}}$ (cf. SVD). Ainsi le critère sur le conditionnement de la matrice $\underline{\underline{B}}[\mathcal{A}_\lambda, \mathcal{A}_c] \underline{\underline{V}}[\mathcal{A}_c, :]$ permet de garantir que la valeur singulière minimale de cette matrice n'est pas trop petite, en particulier au regard de la valeur singulière maximale.

Un exemple de mise en application de cet algorithme glouton (avec $\kappa_{\max} = 100$) est donné sur un exemple 2D sur les figures II.2.2 et II.2.3, en comparaison à des configurations où les ddls EF sont activés de façon arbitraire (tout en respectant le rang maximal en ligne) et à la solution du modèle EF d'ordre plein. Pour cet exemple 2D, le RID contient 30 éléments et 11 contacts potentiels.

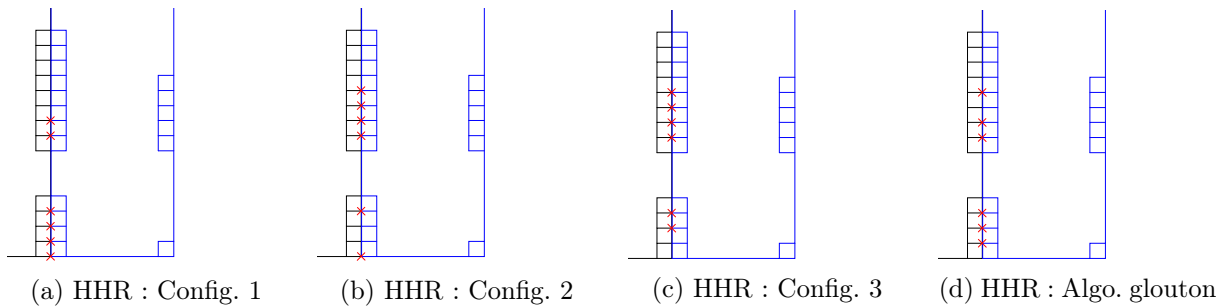
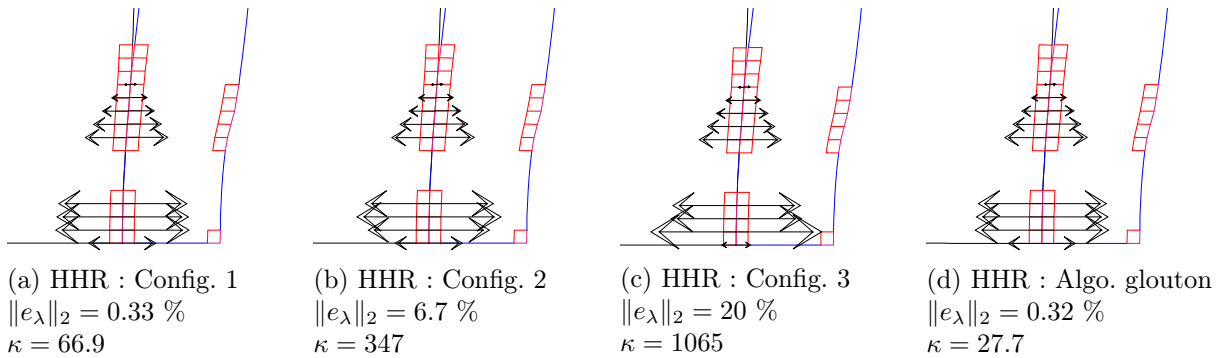


FIGURE II.2.2 – Méthode d'hyper-réduction hybride avec ddls primaux EF pris sur la zone de contact du RID pour être rajoutés dans la base réduite primale hybride (représentés par des croix rouges). Différentes configurations arbitraires ((a) à (c)) et configuration automatique (d) obtenue par l'algorithme glouton appliqué avec $\kappa_{\max} = 100$.

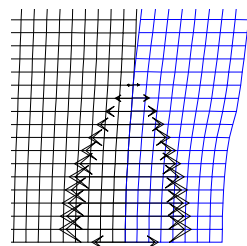


(a) HHR : Config. 1
 $\|e_\lambda\|_2 = 0.33 \%$
 $\kappa = 66.9$

(b) HHR : Config. 2
 $\|e_\lambda\|_2 = 6.7 \%$
 $\kappa = 347$

(c) HHR : Config. 3
 $\|e_\lambda\|_2 = 20 \%$
 $\kappa = 1065$

(d) HHR : Algo. glouton
 $\|e_\lambda\|_2 = 0.32 \%$
 $\kappa = 27.7$



(e) FOM : EF

FIGURE II.2.3 – Méthode d'hyper-réduction hybride. Solutions duales (sur la déformée en maillage) pour les différentes configurations des ddls primaux EF, représentés en figure II.2.2.

La figure II.2.3 confirme que l'erreur en norme 2 sur les multiplicateurs de Lagrange semble bien corrélée au conditionnement de la matrice intervenant dans la condition LBB. L'algorithme glouton conduit à ajouter 6 ddls EF sur Γ_A^C dans la base primale réduite hybride, pour un conditionnement de $\kappa = 27.7$. Dans ce cas, la méthode HHR permet une accélération du temps CPU par rapport au FOM de 63%.

Si tous les ddls EF sur Γ_A^C sont activés (soit 11 au total) alors le conditionnement vaut $\kappa = 1.44$ et l'erreur sur les multiplicateurs de Lagrange atteint $\|e_\lambda\|_2 = 0.21\%$. En contre-partie, l'accélération du temps CPU est de 50% donc moins intéressante qu'avec l'algorithme glouton. Cette comparaison montre qu'il est possible d'activer moins de ddls EF pour gagner en temps de calcul (notamment pour des cas tests 3D) tout en ayant une erreur duale faible et que l'algorithme glouton proposé est un bon moyen d'obtenir ces ddls EF de façon automatique.

Reconstruction des multiplicateurs de Lagrange en dehors du RID

Un des inconvénients de la méthode HHR est que les forces de contact (ou multiplicateurs de Lagrange) ne sont obtenues que sur le RID. Dans [FRR18], une méthode de reconstruction *a posteriori* des multiplicateurs de Lagrange sur toute la frontière de contact potentiel Γ^C du maillage initial a été introduite. Ces multiplicateurs sont cherchés dans une base induite par la matrice des snapshots de la variable duale.

Le post-traitement proposé repose alors sur la minimisation sous contrainte de positivité (pour assurer la condition de non-adhésion) à la fois de la projection de la solution duale HHR sur la base des snapshots restreinte au RID mais également de la condition de complémentarité appliquée sur tout le domaine à partir la solution HHR primale (qui par construction est définie sur tout le domaine) :

$$\min_{\underline{\gamma}_\lambda} \left\| \begin{pmatrix} \underline{S}_\lambda[\mathcal{A}_\lambda, :] \\ [D - \underline{BU}]_+ \odot \underline{S}_\lambda \end{pmatrix} \underline{\gamma}_\lambda - \begin{pmatrix} \underline{\Lambda}[\mathcal{A}_\lambda] \\ \underline{0} \end{pmatrix} \right\|_2^2 \quad \text{t.q.} \quad \underline{\gamma}_\lambda \geq 0. \quad (\text{II.2.17})$$

avec \underline{S}_λ la matrice contenant N_s ($N_s \leq N_\lambda^C + N_\lambda$) snapshots de la variable duale. Les symboles \odot et $[\cdot]_+$ désignent respectivement le produit terme à terme et la partie positive.

Les multiplicateurs de Lagrange sont alors définis en dehors du RID par le produit $\underline{S}_\lambda[[1, N_\lambda] \setminus \mathcal{A}_\lambda, :] \underline{\gamma}_\lambda$.

Comme on pourra le voir dans la section II.2.2.d, les résultats obtenus sont très satisfaisants. Il est cependant à noter que la condition de non-pénétration reste possiblement non vérifiée en dehors du RID, cf Eq. (II.2.14).

Indicateur d'erreur pour la sélection des snapshots

La qualité de la base primale réduite et par transitivité du RID repose sur la POD de la matrice des snapshots de la variable primale. Ces snapshots peuvent être obtenus à partir d'une grille régulière de l'espace paramétrique ou plus intelligemment à partir d'un algorithme glouton.

Un algorithme glouton est un algorithme itératif qui va chercher à chaque étape l'optimum local d'une fonction objectif. Dans le cas de la sélection des snapshots, la fonction objectif doit être un indicateur d'erreur. Cet indicateur d'erreur est propre à chaque méthode de réduction d'ordre de modèle.

Nous avons proposé, toujours dans [FRR18], un indicateur d'erreur simple mais efficace pour la méthode HHR. Il consiste en la somme des erreurs relatives primales et duales entre la solution HHR et une solution FOM approchée définie sur le RID. Cette solution FOM approchée est simplement obtenue en résolvant le problème FOM restreint au RID avec des conditions aux limites de Dirichlet sur Γ^I (cf. Eq. (II.2.9)) obtenues par interpolation des snapshots déjà sélectionnés :

$$\tilde{U}(\underline{\mu})[\mathcal{I}] = \sum_{\underline{\rho} \in \mathcal{S}_{\text{snap}}} \alpha_{\underline{\rho}}(\underline{\mu}) \underline{U}(\underline{\rho})[\mathcal{I}] \quad (\text{II.2.18})$$

avec $\alpha_\rho(\underline{\mu})$ les coefficients d'interpolation, $\underline{\mu}$ un point dans l'espace paramétrique étudié et $\mathcal{S}_{\text{snap}}$ les snapshots déjà effectués.

Cette approximation tend naturellement vers la solution FOM sur le RID lorsque l'erreur d'interpolation tend vers zéro.

Cette indicateur donne des résultats remarquables. Dans son implémentation la plus triviale, il repose sur une interpolation multilinéaire qui peut très vite devenir coûteuse lorsque la dimension de l'espace paramétrique augmente. Il serait certainement intéressant d'utiliser alors une interpolation plus sophistiquée comme une interpolation sur variété [Lopez *et al.*, 2018].

II.2.2.d Exemples numériques

La méthode HHR a été testée et vérifiée dans la thèse de J. Fauque [Fauque, 2018] sur différents types de problèmes de contact (obstacle, multicorps) et pour toutes les dimensions (1D, 2D, 3D). Cette méthode peu intrusive a par ailleurs été facilement implémentée dans le solveur EF Cast3M [Cast3M] du CEA à partir du solveur mécanique de contact existant. Nous présentons ici 2 illustrations.

Cas test 1D de contact avec obstacle

On s'intéresse tout d'abord au cas test académique d'une chaînette 1D élastique pendue par ses deux extrémités, subissant une gravité, et qui va rencontrer un obstacle indéformable. Cet exemple est couramment utilisé pour tester les méthodes ROM dédiées au contact, cf. [Haasdonk *et al.*, 2012 ; Balajewicz *et al.*, 2016 ; Bader *et al.*, 2016]. Nous avons pu sur cet exemple nous comparer à la méthode de projection sur bases réduites [Balajewicz *et al.*, 2016] (PBM pour Projection Based Method), qui utilise également la POD pour construire la base primale réduite mais une méthode de factorisation non négative de matrice pour construire la base duale réduite. Sur la figure II.2.4, nous avons reporté les solutions duales obtenues pour les 2 méthodes ROM, car c'est sur la solution duale que la méthode HHR apporte vraiment une nouveauté. La base primale HHR est composée dans ce cas de 9 modes POD et 5 fonctions de base EF, d'où les 2 comparaisons avec la méthode PBM. Le RID fait alors 28 nœuds pour un maillage FOM initialement de 100 nœuds.

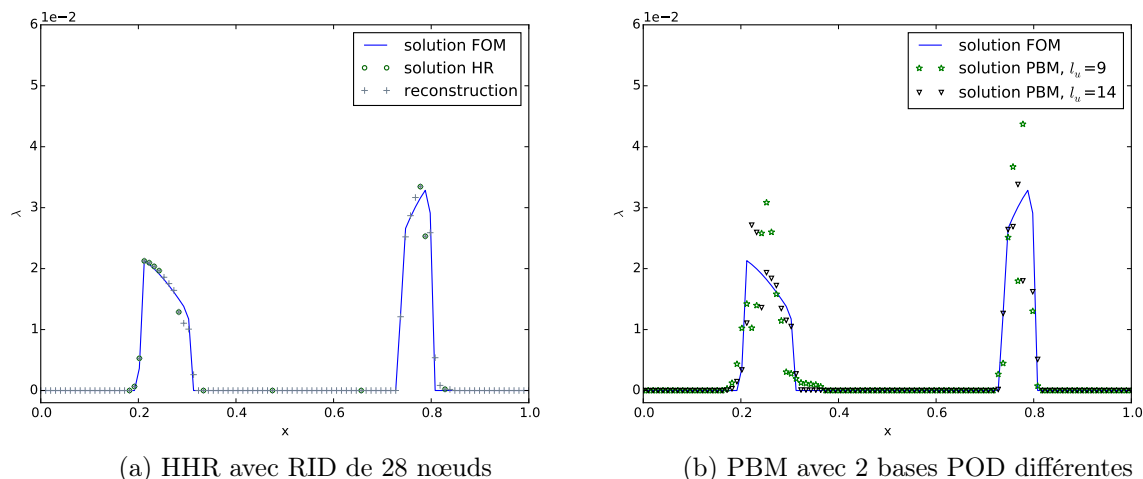


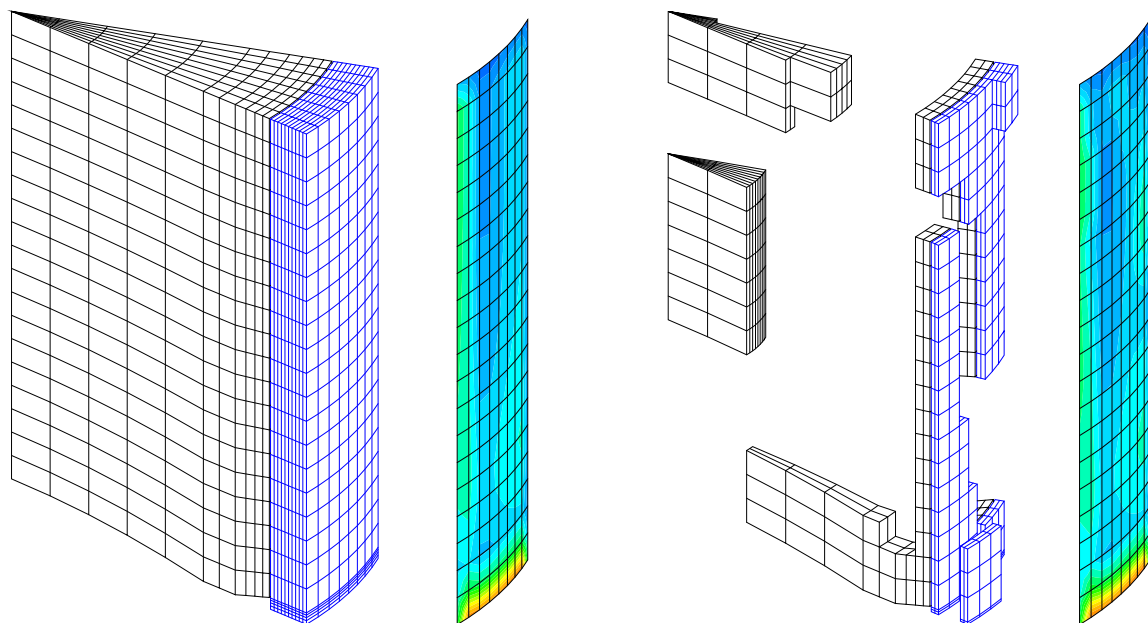
FIGURE II.2.4 – Solutions duales HHR et PBM à comparer avec la solution EF (FOM) en un point de l'espace paramétrique non utilisé pour les snapshots. Cas test 1D élastique.

Nous pouvons constater la très bonne approximation de la solution duale par la méthode HHR sur le RID, mais également sur tout le domaine grâce à la reconstruction proposée. Cela provient du fait de la non-projection sur une base duale réduite. En particulier l'erreur duale en norme 2 commise par le modèle HHR vaut 13 % contre 23 % pour le modèle obtenu par PBM pour le même nombre d'inconnues.

Cas test 3D de contact entre 2 solides

Le cas test 3D présenté ici est très proche de la simulation mécanique réalisée dans le code ALCYONE de la plateforme PLEIADES, voir section I.1.3. Il s'agit de modéliser le contact entre un fragment de pastille et la partie de gaine en regard. Un chargement de type dilatation thermique est appliqué au problème mécanique.

Une illustration des performances de la méthode HHR est donnée sur la figure II.2.5. Sur cette figure le maillage de la pastille est en noir et celui de la gaine en bleu.



(a) Maillage FOM : 3680 éléments (b) FOM : Forces de contact (c) RID : 670 éléments (d) HHR : Forces de contact

FIGURE II.2.5 – Méthode d'hyper-réduction hybride pour le contact mécanique 3D pastille-gaine.

Les résultats obtenus sont très satisfaisants, notamment au niveau des forces de contact qui sont très bien représentées par la méthode HHR. Le domaine de calcul est environ 6 fois plus petit et les temps de calculs sont réduits d'un facteur de l'ordre de 50 (avec projection en partie offline).

II.2.3 Hyper-réduction hybride pour la mécanique du contact avec non-linéarités matérielles

Dans la thèse de J. Fauque [Fauque, 2018] ainsi que dans l'article [FRR21], nous avons étendu l'HHR à la mécanique du contact avec lois de comportement non linéaires. Cette extension est assez naturelle étant donnée que l'HR est nativement construite pour traiter des comportements non linéaires.

II.2.3.a Formulation discrète

Le problème fort de contact avec non-linéarités matérielles diffère du problème (II.2.3) uniquement par la loi de comportement, appelée également équation constitutive, reliant le tenseur des contraintes $\underline{\underline{\sigma}}$ au tenseur des déformations $\underline{\underline{\varepsilon}}$, qui cette fois est non linéaire (que nous pouvons écrire formellement $\underline{\underline{\sigma}} = \mathcal{F}(\underline{\underline{\varepsilon}})$, avec \mathcal{F} un opérateur non linéaire).

La formulation variationnelle fait donc intervenir un terme non linéaire. Un algorithme itératif de

type Newton est alors généralement utilisé pour linéariser ce problème. Cet algorithme s'appuie sur la linéarisation de la contrainte via un développement de Taylor au premier ordre. Au final, la formulation EF du problème de mécanique du contact avec loi de comportement non linéaire s'écrit sur un pas de temps et à l'itération k de l'algorithme de linéarisation :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Trouver } (\delta \underline{U}^k, \underline{\Lambda}) \in \mathbb{R}^N \times (\mathbb{R}^+)^{N_\lambda} \text{ tel que} \\ \underline{K}^{k-1} \delta \underline{U}^k + \underline{B}^T \underline{\Lambda} = -\underline{R}^{k-1} \\ \underline{B} \delta \underline{U}^k \leq \underline{D} - \underline{B} \underline{U}^{k-1} \\ \underline{\Lambda}^T (\underline{D} - \underline{B} \delta \underline{U}^k) = \underline{\Lambda}^T \underline{B} \underline{U}^{k-1} \end{array} \right. \quad (\text{II.2.19})$$

avec \underline{K} la matrice de rigidité associée à l'opérateur de recherche (ou opérateur tangent) et \underline{R} le résidu du problème non linéaire. La convergence est généralement testée sur la valeur du résidu.

À chaque itération de linéarisation de l'algorithme incrémental, on résout ainsi un problème mixte de contact linéaire sur lequel l'HHR introduite en section II.2.2.b s'applique directement :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Trouver } (\delta \underline{\gamma}^k, \underline{\Lambda}[\mathcal{A}_\lambda]) \in \mathbb{R}^l \times (\mathbb{R}^+)^{N_\lambda^C} \text{ tel que} \\ \underline{V}[\mathcal{A},:]^T \underline{K}^{k-1}[\mathcal{A}, \mathcal{A} \cup \mathcal{I}] \underline{V}[\mathcal{A} \cup \mathcal{I},:] \delta \underline{\gamma}^k \\ \quad + \underline{V}[\mathcal{A}_c,:]^T \underline{B}[\mathcal{A}_\lambda, \mathcal{A}_c]^T \underline{\Lambda}[\mathcal{A}_\lambda] = -\underline{V}[\mathcal{A},:]^T \underline{R}^{k-1}[\mathcal{A}] \\ \underline{B}[\mathcal{A}_\lambda, \mathcal{A}'_c] \underline{V}[\mathcal{A}'_c, :] \delta \underline{\gamma}^k \leq \underline{D}[\mathcal{A}_\lambda] - \underline{B}[\mathcal{A}_\lambda, \mathcal{A}'_c] \underline{V}[\mathcal{A}'_c, :] \underline{\gamma}^{k-1} \\ \underline{\Lambda}[\mathcal{A}_\lambda]^T (\underline{D}[\mathcal{A}_\lambda] - \underline{B}[\mathcal{A}_\lambda, \mathcal{A}'_c] \underline{V}[\mathcal{A}'_c, :] \delta \underline{\gamma}^k) = \underline{\Lambda}[\mathcal{A}_\lambda]^T \underline{B}[\mathcal{A}_\lambda, \mathcal{A}'_c] \underline{V}[\mathcal{A}'_c, :] \underline{\gamma}^{k-1} \end{array} \right. \quad (\text{II.2.20})$$

avec les mêmes notations que celles introduites en section II.2.2.b.

En pratique, étant donné que le calcul du résidu \underline{R} repose sur l'évaluation de la loi de comportement locale, l'utilisation de la méthode HHR permet de n'effectuer cette évaluation que sur le RID, comme introduit dans l'HR standard. Ceci permet, comme explicité en introduction, un gain en temps de calcul considérable pour la partie comportement non linéaire. Enfin, le critère de convergence n'est aussi évalué que sur le RID.

L'algorithme (II.2.20) très générique repose ainsi sur la résolution proposée pour la partie linéaire. Il est indépendant de la loi de comportement choisie et reste peu intrusif dans un solveur non linéaire existant.

II.2.3.b Implémentation dans le solveur mécanique Cast3M

La méthode d'HHR pour le contact avec non-linéarités matérielles (II.2.20) a été implémentée avec succès dans le solveur mécanique Cast3M [Cast3M] du CEA.

Il est à noter que ce solveur est basé sur un algorithme de quasi-Newton particulièrement bien adapté à l'HHR. En effet l'opérateur de recherche est le tenseur d'élasticité. La matrice de rigidité \underline{K} est donc invariante en itération. Ainsi la projection sur le RID des matrices de rigidité et de contact n'est effectuée qu'une seule fois par pas de temps.

Le critère de convergence que nous avons proposé dans [MHRE18] pour la propagation instable de fissures a été adapté ici pour l'HHR. Ce critère porte en effet directement sur le résidu en contrainte, qui a plus de sens physiquement et qui est directement exploitable pour l'HHR. Ce critère est issu de l'analogie entre la résolution d'un problème de mécanique non linéaire et un algorithme de type prédicteur-correcteur. Il s'appuie sur l'erreur entre la contrainte prédite pour la linéarisation du problème et la contrainte calculée via l'intégration de la loi de comportement pour la mise à jour du résidu, cf. Eq. (II.2.21).

$$\max_{\text{pt de Gauss}} \left\{ |\underline{r}_\sigma^k| - \epsilon_r |\underline{\sigma}^k| \right\} < \epsilon_a \quad \text{avec} \quad \underline{r}_\sigma^k = \underline{\sigma}^k - \underline{\sigma}^{*k} = \underline{\sigma}^k - \left(\underline{\sigma}^{k-1} + \underline{\underline{H}}^{k-1} : \underline{\underline{\epsilon}}(\delta \underline{u}^k) \right) \quad (\text{II.2.21})$$

où $\underline{\underline{H}}$ est l'opérateur de recherche ($\underline{\underline{H}}^{k-1} \equiv \underline{\underline{C}}$ dans Cast3M), ϵ_r et ϵ_a sont respectivement les seuils associés à l'erreur relative et à l'erreur absolue.

Le résidu en force « classique » des algorithmes de type Newton portant sur \underline{R}^k (cf. Eq. (II.2.19)) correspond à la forme faible du résidu en contraintes ci-dessus. Ce critère peut être vu comme la formulation forte d'un critère en force. Il a l'avantage d'être efficace même en cas de stationnarité de la contrainte anélastique et de basculer automatiquement d'une erreur relative vers une erreur absolue quand les valeurs de contraintes deviennent petites.

Dans l'implémentation de l'HHR dans Cast3M, nous avons simplement restreint ce critère au RID.

II.2.3.c Exemple numérique

La méthode HHR a été appliquée à un cas test 2D axisymétrique de mécanique du contact dans Cast3M avec pour le premier solide (représentant le combustible) une loi de comportement élasto-plastique de type écrouissage isotrope linéaire et pour le second solide (représentant la gaine) une loi de comportement visco-plastique de type Norton permettant d'obtenir du fluage. Nous obtenons dans ce cas un RID de 420 éléments et 22 contacts potentiels pour un maillage initial de 6800 éléments et 101 contacts potentiels. On voit sur la figure II.2.6 que le RID se concentre autour de la zone de contacts actifs et des zones de plasticité (cf. construction du RID par DEIM avec une contribution d'une base réduite POD associée aux contraintes).

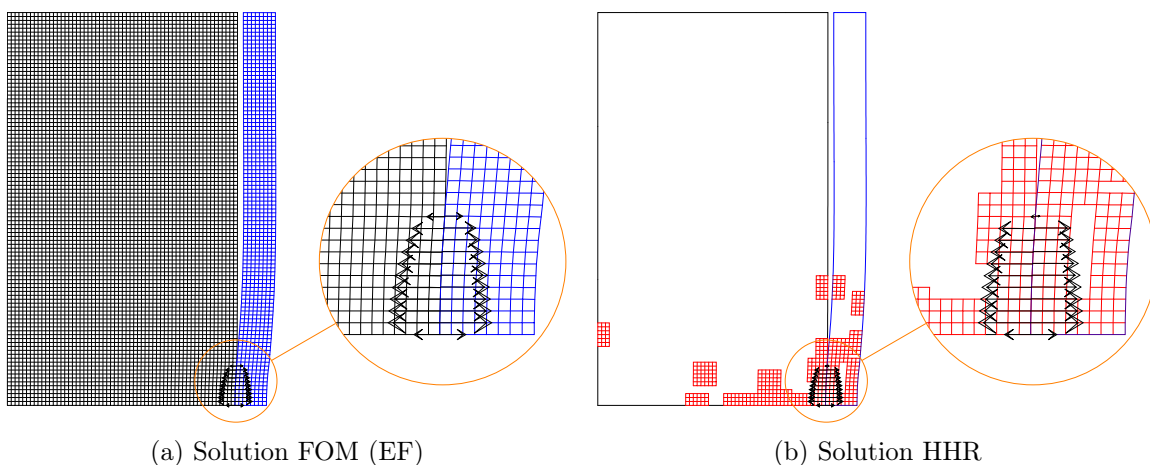


FIGURE II.2.6 – Méthode d'hyper-réduction hybride. Cas test 2D élasto-visco-plastique . Forces de contact à la fin de l'historique de chargement tracées sur les déformées avec un jeu amplifié par un facteur 10.

On constate sur la figure II.2.6 la très bonne approximation des forces de contact par la méthode HHR. L'erreur obtenue en fin d'historique vaut 11% sur les multiplicateurs de Lagrange et 6% pour les déplacements. L'erreur duale est concentrée sur la zone de changement de statut. Nous représentons sur la figure II.2.7 la composante σ_{rr} de la contrainte obtenue sur le RID mais également reconstruite sur tout le domaine par la technique classique de projection de la solution HHR sur une base réduite, voir [Ryckelynck *et al.*, 2015].

La solution HHR obtenue est très satisfaisante puisque l'erreur en norme 2 (calculée aux point de Gauss) vaut 4.6% sur le RID et 6.6% après reconstruction pour une accélération du temps de calcul d'un facteur 10.

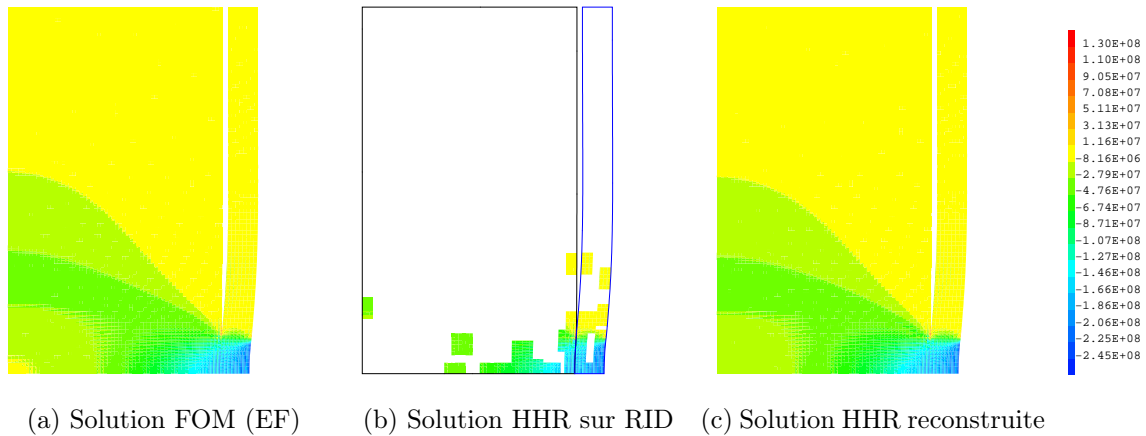


FIGURE II.2.7 – Méthode d’hyper-réduction hybride. Cas test 2D élasto-visco-plastique. Composante σ_{rr} de la contrainte à la fin de l’historique de chargement tracée sur les déformées avec un jeu amplifié par un facteur 10.

II.2.4 Directions de recherche

Nous avons introduit une méthode de réduction d’ordre de modèles dite méthode d’hyper-réduction hybride (ou HHR) permettant de traiter efficacement des problèmes de contact sans frottement, traités par multiplicateurs de Lagrange, avec non-linéarités matérielles. La méthode HHR est vraiment très prometteuse car facilement implémentable dans un solveur existant, indépendante de la dimension du problème et permettant un vrai gain en temps de calcul. De plus le caractère hybride de la base primale permet aussi d’utiliser cette approche pour des problèmes non linéaires sans contact.

Concernant les perspectives théoriques de ce travail, nous avons vu que la méthode HHR était pour l’instant limitée au cas du contact traité nœud à nœud ou de type obstacle, car le problème découlant n’est plus symétrique et n’est donc plus un problème de point-selle classique. Les géométries et cas tests (hypothèse des petites transformations) pouvant être traitées sont ainsi limités. Il faudrait donc étendre la méthode HHR pour le contact à des algorithmes de type nœud-à-surface ou surface-à-surface, beaucoup plus génériques. Plusieurs pistes sont envisageables : soit utiliser une méthode de Mortar (ou accrochage), soit rendre symétrique le système par une approche de point fixe où la partie non symétrique serait « explicitée » via l’itération précédente. Une autre perspective importante de ce travail est le traitement du contact frottant. On se retrouve dans ce cas avec des inconnues supplémentaires du type multiplicateurs de Lagrange. Il s’agirait donc dans un premier temps de les traiter avec la même approche hybride basée sur une base duale d’ordre plein restreinte au RID. Il faudrait alors veiller à ce que la taille du système complet ne devienne pas trop importante. Par ailleurs, étant donné que l’existence de l’unicité de la solution du problème de contact frottant n’est pas garantie, il faudra veiller à assurer la consistance de la solution HHR avec la solution Éléments Finis de référence.

Enfin, il serait intéressant de travailler sur une estimation *a priori* de l’erreur de la méthode HHR, en fonction notamment de la dimension des bases réduites.

Ces perspectives font l’objet de la thèse de S. Le Berre qui a démarré en octobre 2020.

Concernant la partie plus applicative, il serait intéressant d’étudier les performances de la méthode HHR sur des grands espaces paramétriques. En effet, l’approche hybride peut dans ce cas atteindre ses limites et une méthode de clustering à partir de petits espaces paramétriques pourrait certainement permettre de retrouver des solutions efficaces.

Une fois la méthode HHR étendue au contact frottant, nous envisageons de l’intégrer dans le schéma de couplage multiphysique de la plate-forme PLEIADES et ainsi caractériser le gain en

temps de calcul global. Après validation des résultats obtenus, ce nouveau schéma de couplage pourrait être utilisé pour l'accélération des études paramétriques (vérification/validation) et/ou la prise en compte de nouvelles situations dans la simulation du combustible nucléaire.

La méthode HHR pourrait également permettre de simuler en des temps de calcul plus raisonnables des phénomènes multiéchelles apparaissant notamment dans la simulation du comportement du combustible nucléaire. On peut penser en particulier à la prise en compte du comportement micro-mécanique de la structure via des algorithmes multiéchelles, où la réduction d'ordre de modèles à l'échelle de la microstructure a déjà prouvé son intérêt (cf. NTFA [Michel et Suquet, 2003] ou pRBMOR [Fritzen et Hodapp, 2016]).

Enfin de façon plus générale, la réduction d'ordre de modèles est une approche à fort potentiel notamment dans le cadre de « jumeaux numériques » (ou digital twin). Dans le contexte de la simulation des réacteurs nucléaires faisant intervenir des couplages multidisciplinaires (thermo-hydraulique, thermo-mécanique, neutronique, *etc* ...), il sera essentiel de disposer des méthodes de réduction d'ordre modèles robustes et fiables.

II.3 Modélisation multiphysique couplée du phénomène de rattrapage de jeu dans les réacteurs à neutrons rapides

II.3.1 Introduction

Dans le cadre de la thèse de M. Temmar [Temmar, 2019], nous nous sommes intéressés à la modélisation du comportement multiphysique sous irradiation du combustible des réacteurs à neutrons rapides refroidis au sodium (RNR-Na), cf. chapitre I. En particulier, nous nous sommes focalisés sur le phénomène de rattrapage du jeu pastille-gaine. En effet, la taille de jeu existant initialement entre la pastille et la gaine évolue au cours de l'irradiation (cf. section I.1.2). La modélisation fine de cette taille de jeu est de première importance, en plus de la connaissance des propriétés thermiques, pour pouvoir simuler précisément l'évacuation de la chaleur produite dans le combustible.

Dans la thèse de M. Temmar et dans l'article [TMRF20], nous avons identifié les phénomènes arrivant en début d'irradiation et conduisant à la fermeture du jeu pastille-gaine. Une simulation multiphysique 3D des phénomènes identifiés a permis d'en quantifier l'impact. À partir de ces simulations 3D, l'autre nouveauté du travail proposé consistait à introduire une modélisation réaliste de ces phénomènes en 1D à partir d'une formulation physique et ainsi prédictive. L'objectif était de remplacer la modélisation empirique utilisée jusqu'à présent dans GERMINAL [LMD⁺19], mais également dans les autres codes concurrents [Karahan et Buongiorno, 2010 ; Gao *et al.*, 2017 ; Ozawa et Abe, 2006 ; Veprev *et al.*, 2018].

En effet dans GERMINAL, comme détaillé dans [LMD⁺19], un modèle spécifique, appelé modèle de « délocalisation » (ou relocation en anglais), permet de représenter le mouvement 1D radial du combustible et ses impacts sur le transfert thermique entre pastille et gaine. Ce modèle introduit une déformation anélastique homogène fictive qui est prise en compte comme déformation libre dans la loi de comportement mécanique. Ce modèle de délocalisation est basé sur une équation empirique contenant de nombreux paramètres qui ont été ajustés sur des mesures expérimentales. Par construction, ce modèle permet d'obtenir un très bon accord calcul/mesure mais comme les phénomènes physiques responsables du mécanisme de fermeture du jeu ne sont pas clairement identifiés et modélisés, ce modèle de délocalisation, comme les autres modèles disponibles dans la littérature, reste non prédictif.

II.3.2 Nouveau modèle 1D de délocalisation et couplage multiphysique associé

II.3.2.a Identification des phénomènes de rattrapage de jeu

À partir d'observations expérimentales [Bailly *et al.*, 1997 ; Sens, 1972 ; Hoffmann, 1974], nous avons pu constater que la fermeture du jeu semblait liée à deux principaux phénomènes : la fragmentation du combustible et le transfert de masse dû à la restructuration du combustible sous forts température et gradient thermique.

Fragmentation du combustible

La fragmentation des pastilles est un phénomène déjà bien connu et modélisé dans les REP, mais peu étudié dans les conditions RNR-Na. Ce phénomène apparaît très tôt lors de l'irradiation en réacteur, dû au fort gradient radial de température (> 1000 K/cm).

Plus précisément, la dilatation différentielle entre la pastille et la gaine conduit à une première réduction de la taille initiale du jeu pastille-gaine (étape 1 sur la figure II.3.1). Puis les contraintes thermo-mécaniques induites par le fort gradient thermique dépassent la contrainte à rupture du combustible, ce qui conduit à la fragmentation de la pastille. L'équilibre mécanique du fragment sous l'effet des contraintes thermiques entraîne une déformation élastique qui génère une courbure

des surfaces inter-fragments. Cette courbure et la condition de contact entre les fragments de pastille induisent une augmentation significative du déplacement radial en comparaison avec une pastille non fragmentée (voir ΔU_r et étape 2 sur la figure II.3.1).

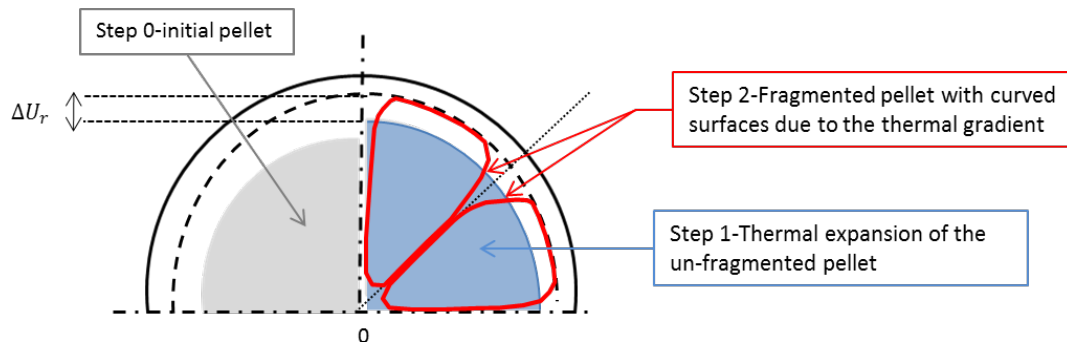


FIGURE II.3.1 – Représentation schématique de la dilatation thermique et de la fragmentation des pastilles de combustible

Le phénomène décrit précédemment s'accompagne dans le plan vertical d'une mise en diabolo (hourglass shape en anglais) du fragment de pastille du fait de la condition aux limites de surface libre sur le plan inter-pastille. La courbure axiale des fragments de pastille augmente significativement le déplacement radial au plan inter-pastille conduisant à fermer d'abord le jeu pastille-gaine dans ce plan. Ainsi le rattrapage du jeu dépend fortement de la position axiale entre les plans médian et inter-pastille comme déjà illustré pour les REP sur la figure I.5.

Restructuration du combustible

Le phénomène de restructuration du combustible, caractéristique des réacteurs RNR-Na et déjà connu pour conduire à la formation du trou central (cf. Section I.1.2), a été identifié dans [TMRF20] comme phénomène important pouvant expliquer le rattrapage de jeu pastille-gaine dans ce type de réacteurs.

Ce phénomène activé à fortes températures (> 1800 °C, cf. [Bailly *et al.*, 1997]) et sous fort gradient thermique apparaît en début de vie en réacteur. Il entraîne une modification du matériau induite par la migration des pores de la périphérie vers le centre de la pastille (à plus haute température) via un mécanisme d'évaporation-condensation. Par ailleurs, comme illustré sur la figure II.3.2, la restructuration du combustible permet de guérir partiellement les fissures issues de la fragmentation du combustible (cf. paragraphe précédent). Le principal phénomène permettant d'expliquer la guérison des fissures par transfert de masse serait également le processus d'évaporation-condensation [Hoffmann, 1974] conduisant à la migration des pores. Les fissures agiraient alors comme une source de pores lenticulaires (en plus des pores de fabrication). Cette explication est basée sur les observations expérimentales où plusieurs petits pores lenticulaires proches des surfaces des fissures ont pu être identifiés.

Des analyses micrographiques laissent supposer que le transfert de masse et la guérison des fissures observés dans la zone de restructuration conduisent à augmenter le volume de cette zone et, par conséquent, à l'ouverture circonférentielle des fissures en périphérie du combustible. Nous pensons que ce dernier point peut expliquer une augmentation du diamètre du combustible, en comparaison à un combustible qui ne subirait pas de restructuration, et ainsi conduire à un rattrapage du jeu pastille-gaine.

II.3.2.b Modélisation et simulation thermo-mécaniques 3D du rattrapage de jeu

Afin d'évaluer l'impact des phénomènes identifiés précédemment sur la taille du jeu, nous avons proposé une simulation thermo-mécanique 3D.

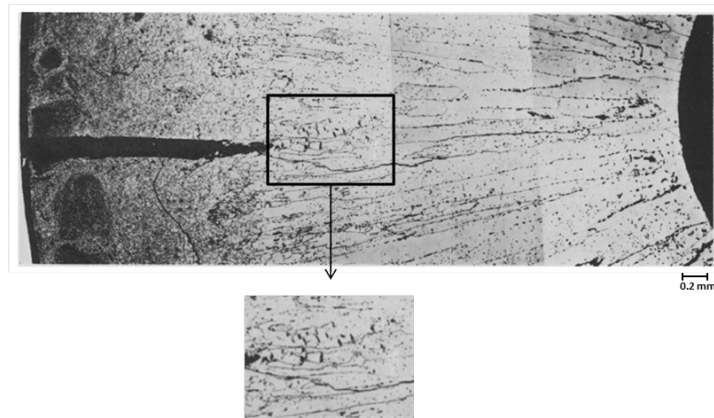


FIGURE II.3.2 – Guérison des fissures par production et migration de pores lenticulaires, source [Hoffmann, 1974]

Modélisation 3D

Concernant la modélisation, le phénomène de fragmentation du combustible est naturellement pris en compte via la géométrie du maillage qui représente un unique fragment (ou plus précisément 1/4 de fragment par les symétries considérées) et des conditions aux limites mécaniques de type contact unilatéral appropriées, cf. [Michel *et al.*, 2013] et figure II.3.3.

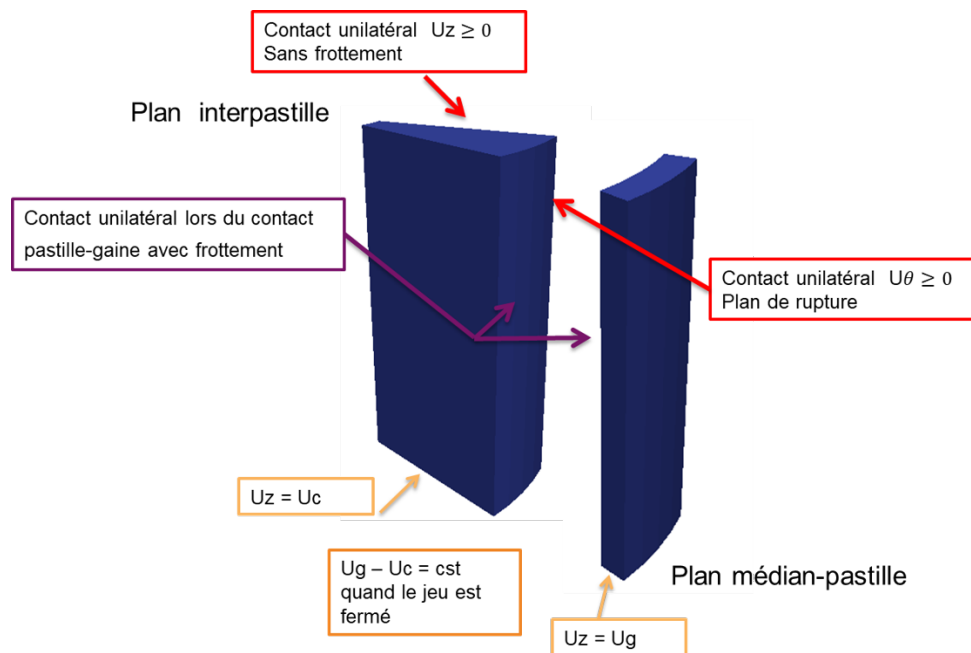


FIGURE II.3.3 – Représentation 3D d'un quart de fragment de pastille RNR-Na et conditions aux limites mécaniques

L'évolution géométrique liée au phénomène de transfert de masse dans la zone restructurée est simulée par une expansion volumique de la pastille dans cette zone, cf. figure II.3.4.

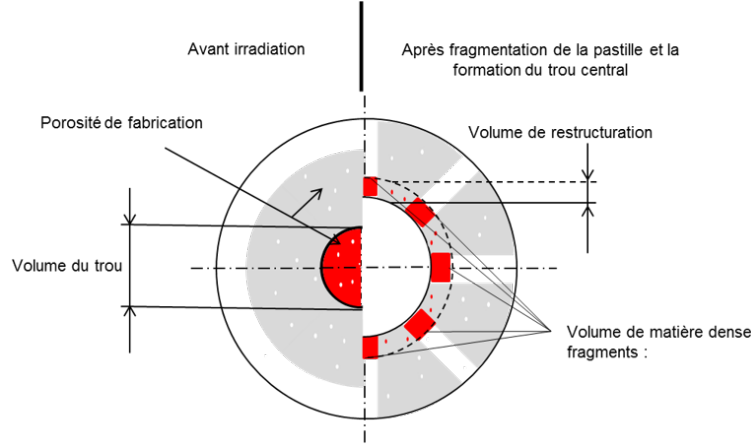


FIGURE II.3.4 – Principe du transfert de matière entre les fragments de combustible

Par conservation de la masse, nous pouvons déterminer le volume dense migrant dans le combustible. Il est donné par V_{tm} dans la relation (II.3.1).

$$V_{tm}(p,t) = V_{trou}(p,t) \left(1 - p_{ini}^{fab}\right) \quad (\text{II.3.1})$$

avec V_{trou} le volume du trou central défini par $p = 100\%$, p la porosité totale et p_{ini}^{fab} la porosité de fabrication initiale.

En supposant que les vitesses de migration des pores de fabrication et des pores de remplissage sont les mêmes, nous avons montré dans [TMRF20] que le rapport initial de porosité γ_{ini} était conservé au cours du temps :

$$\gamma_{ini} = \frac{p_{ini}^{rem}}{p_{ini}} = \frac{p^{rem}(x,t)}{p(x,t)} \quad (\text{II.3.2})$$

avec $p(x,t) = p^{rem}(x,t) + p^{fab}(x,t)$, $p^{rem}(x,t)$ la porosité de remplissage, x la variable d'espace et t celle de temps. Cela provient du fait que la porosité totale ainsi que chacune de ses contributions vérifient l'équation de migration (II.3.3) dont la solution ne dépend que de la vitesse $v_p(x,t)$ et de la porosité initiale p_{ini} .

$$\begin{cases} \frac{\partial p(x,t)}{\partial t} = -\text{div}(v_p(x,t)p(x,t)) \\ p(x,0) = p_{ini} \end{cases} \quad (\text{II.3.3})$$

Ainsi, nous pouvons déterminer le volume dense migrant entre les fragments V_{tm}^{rem} :

$$V_{tm}^{rem}(p,t) = \gamma_{ini} V_{tm}(p,t) = \gamma_{ini} V_{trou}(p,t) \left(1 - p_{ini}^{fab}\right) \quad (\text{II.3.4})$$

Suivant l'hypothèse que l'expansion volumique de la zone de restructuration est de forme parallélépipédique, on calcule l'épaisseur e par

$$e(p,t) = \frac{V_{tm}^{rem}(p,t)}{2N_{frag}h(R_{ZR} - R_{trou})} \quad (\text{II.3.5})$$

où N_{frag} est le nombre de fragments de pastille (en général 8), h la hauteur du combustible, R_{ZR} et R_{trou} les rayons de la zone de restructuration (délimitée par $T > 1800^\circ\text{C}$) et du trou central sur la configuration initiale. Le facteur 2 vient de la symétrie de notre géométrie 3D.

Afin de représenter la transformation géométrique associée au transfert de masse entre les fragments, nous appliquons un champ de déplacement u^e (dépendant de e) au maillage. Pour éviter une dégénérescence du maillage résultant, la transformation suivante est appliquée

$$u_\theta^e = e(p,t) \frac{\theta}{22.5}, \quad \forall \theta \in [0; 22.5], \quad u_r^e = u_z^e = 0 \quad (\text{II.3.6})$$

Cette modification du maillage est réalisée en amont du calcul mécanique. La condition de contact unilatéral définie sur le plan inter-fragment le long de la zone de restructuration doit alors porter sur $u_\theta^e + u_\theta^{MEC}$ où u_θ^{MEC} est la composante circonférentielle du déplacement solution du problème de mécanique. La mise à jour de la condition de contact unilatéral permet ainsi de simuler l'effet du transfert de masse inter-fragments sur le déplacement du fragment du combustible. Une illustration est donnée en figure II.3.5

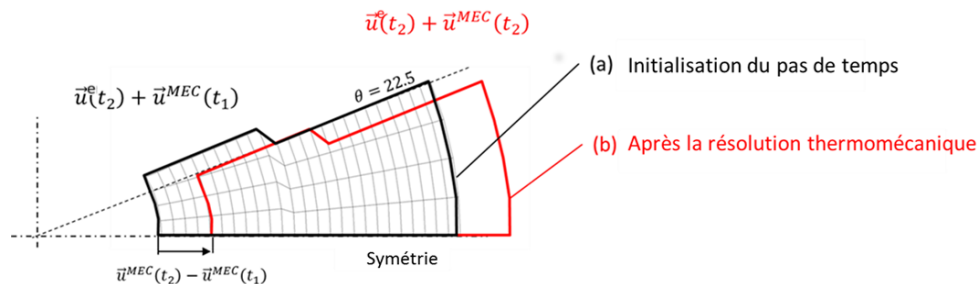


FIGURE II.3.5 – Illustration du déplacement radial d'un fragment 3D dû au transfert de matière simulé via une transformation géométrique.

Simulation 3D

Nous avons effectué la simulation couplée thermo-mécanique 3D grâce à l'application prototypique 3D LICOS [Helfer *et al.*, 2015a] de la plateforme PLEIADES. Un chaînage GERMINAL-LICOS nous permet de récupérer en entrée de LICOS les données nécessaires au calcul thermo-mécanique, en particulier celles provenant des modèles de thermo-hydraulique, neutronique et physico-chimie non représentés dans notre schéma multiphysique 3D. Pour les variables spatialisées, le champ 3D est obtenu via une technique de krigeage basée sur une hypothèse de géométrie cylindrique axisymétrique.

Le rayon du trou central, provenant du modèle de restructuration de GERMINAL, est une donnée d'entrée à la simulation 3D. Par cohérence du calcul de e par l'équation (II.3.5), il en est de même du rayon de la zone restructurée. Ainsi le rayon de la zone restructurée déduit de la simulation 3D permettra d'évaluer la validité des mécanismes de délocalisation proposés.

Le schéma de couplage mis en place est un couplage de point fixe avec accélération de convergence de type relaxation (cf. chapitre II.1), critère de convergence multiphysique sur la température (comme dans GERMINAL) et redécoupage automatique du pas de temps. Les modèles thermique et mécanique sont résolus via le solveur Cast3M [Cast3M] et sont identiques à ceux de GERMINAL [LMD⁺19].

La température à l'intérieur du combustible ne pouvant être mesurée en ligne, la comparaison calcul/mesure s'effectue à partir de données accessibles lors des examens post-irradiation, en particulier le rayon du trou central et de la zone restructurée puisque ces 2 mesures sont fortement corrélées aux températures atteintes dans le combustible.

La figure II.3.6 permet d'apprécier l'impact des phénomènes de délocalisation radiale du combustible proposés.

On voit ainsi que la fragmentation du combustible permet effectivement d'expliquer une partie du rattrapage du jeu pastille-gaine mais que la prise en compte du transfert de masse par évaporation-condensation est nécessaire pour retrouver des rayons de zone restructurée cohérents avec les mesures expérimentales.

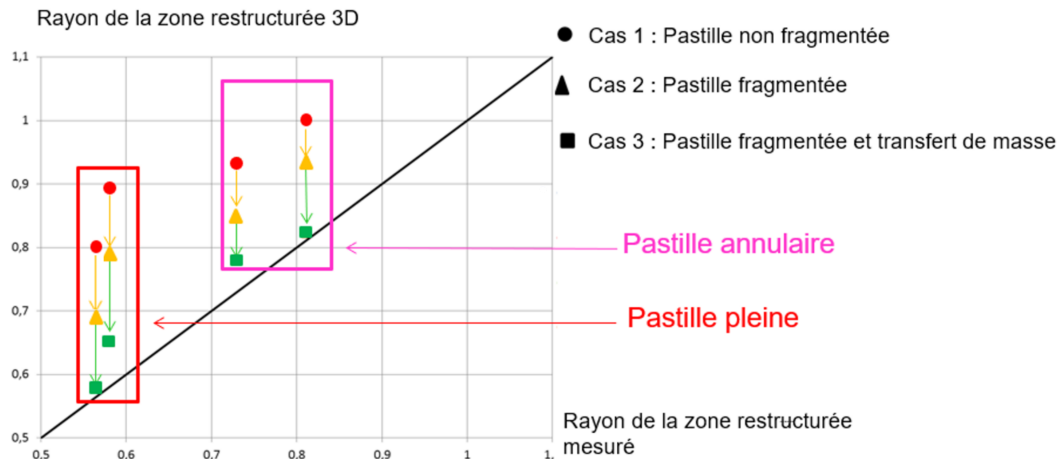


FIGURE II.3.6 – Couplage thermo-mécanique 3D. Impact des phénomènes de rattrapage de jeu identifiés via la comparaison calcul/mesure du rayon de la zone restructurée.

II.3.2.c Modélisation et simulation multiphysique 1D du rattrapage de jeu

Nous avons proposé dans [TMRF20] une nouvelle formulation 1D du modèle de délocalisation et un schéma de couplage revu.

Le nouveau modèle de délocalisation introduit une déformation de délocalisation décomposée en deux contributions, une provenant de la fragmentation du combustible et une du transfert de masse. Ainsi, nous avons

$$\underline{\underline{\varepsilon}}_{deloc}(T,p) = \underline{\underline{\varepsilon}}_{deloc}^{frag}(T) + \underline{\underline{\varepsilon}}_{deloc}^{tm}(T,p) \quad (\text{II.3.7})$$

avec T la température et p la porosité. Par souci de lisibilité, la dépendance en temps (t) est omise dans la suite.

Cette déformation de délocalisation est prise en compte dans le modèle mécanique comme une déformation libre homogène dans le plan.

La dépendance de $\underline{\underline{\varepsilon}}_{deloc}$ à la porosité permet ainsi au modèle de délocalisation de dépendre à présent du modèle de migration des porosités, ce qui n'était pas le cas dans l'ancien schéma de couplage de GERMINAL. Par ailleurs, dans le modèle de migration c'est à présent l'ensemble de la porosité qui migre avec une équation d'advection de type (II.3.3) où $p_{ini} = p_{ini}^{fab} + p_{ini}^{rempl}$. Ceci remplace le procédé empirique de prise en compte de l'évolution de la porosité de remplissage de GERMINAL [LMD⁺19]. Il est à noter ici que nous avons émis l'hypothèse forte que la vitesse de migration des porosités de remplissage et de fabrication était la même. Cela sous-entend que le phénomène supposé de nucléation de pores lenticulaires à partir des fissures est quasiment immédiat ou tout du moins très rapide vis-à-vis du phénomène de migration dans le combustible. La validité de cette hypothèse sera discutée dans la section II.3.3.

Déformation de délocalisation liée à la fragmentation

Les simulations 3D nous ont permis d'identifier que le phénomène de mise en diabolo de la pastille n'avait que très peu d'effet sur le déplacement radial du fragment au plan médian-pastille, plan considéré dans le code de calcul GERMINAL. Ainsi, nous avons considéré que la déformation de délocalisation liée à la fragmentation était due à l'écart de déplacement radial entre une pastille fragmentée et une pastille non fragmentée dans le plan (r,θ) . La déformation de délocalisation étant homogène [LMD⁺19], cette dernière est déduite de la valeur maximale de la différence de déplacement, soit au point $r = R_e$ (rayon externe du combustible) et $\theta = \pi/8$

(surface inter-fragments). Ainsi, nous pouvons écrire

$$\begin{aligned}\underline{\underline{\varepsilon}}_{deloc}^{frag}(T) &= \frac{\Delta u_r(R_e, \pi/8)}{R_e} (\underline{e}_r \otimes \underline{e}_r + \underline{e}_\theta \otimes \underline{e}_\theta) \\ &= \frac{u_r^{frag}(R_e, \pi/8) - u_r^{axi}(R_e, \pi/8)}{R_e} (\underline{e}_r \otimes \underline{e}_r + \underline{e}_\theta \otimes \underline{e}_\theta)\end{aligned}\quad (\text{II.3.8})$$

Les calculs analytiques permettant d'obtenir les déplacements de la pastille fragmentée u_r^{frag} et de la pastille non fragmentée u_r^{axi} dans le cas de pastilles initialement pleines ou annulaires sont détaillés dans [TMRF20]. Ils s'appuient sur une résolution mécanique élastique isotrope 2D dans le plan (r, θ) , avec uniquement un chargement thermique.

Pour la pastille non fragmentée, une hypothèse d'axisymétrie est retenue permettant d'obtenir facilement la solution analytique en déplacement.

Pour la pastille fragmentée, l'hypothèse d'axisymétrie n'étant plus valide, nous nous sommes appuyés sur l'approche proposée par Muskhelishvili [Muskhelishvili, 1963], déjà reprise et étendue pour des fragments de pastille pleine dans [Sercombe *et al.*, 2013]. Dans cette approche, le champ de déplacement peut être exprimé analytiquement en fonction de deux potentiels de la variable complexe $(z = x + iy)$.

Finalement, nous pouvons obtenir une formulation très générique de la déformation de délocalisation due à la fragmentation :

$$\underline{\underline{\varepsilon}}_{deloc}^{frag}(T) = k_{elas} \frac{\alpha \Delta T R_e^2}{\left(R_e^2 - R_i^2 + 2R_i^2 \ln\left(\frac{R_i}{R_e}\right)\right)} (\underline{e}_r \otimes \underline{e}_r + \underline{e}_\theta \otimes \underline{e}_\theta) \quad (\text{II.3.9})$$

avec k_{elas} un coefficient dépendant des paramètres élastiques du matériau et du type de pastille (annulaire ou pleine), α le coefficient de dilatation thermique, $\Delta T = T(R_i) - T(R_e)$ et R_i le rayon interne de la pastille. Le cas de la pastille pleine est obtenue en passant à la limite $R_i \rightarrow 0$.

Cependant l'expression analytique (II.3.9) n'est valable que pour un matériau élastique. Nous avons alors proposé de multiplier l'expression (II.3.9) par un paramètre appelé « kfit » qui va dépendre de la non-linéarité du matériau.

Ce paramètre empirique a été ajusté dans notre cas sur des simulations 3D par éléments finis (cf. section II.3.2.b), afin d'être représentatif de la loi de comportement non linéaire du combustible utilisée dans GERMINAL. Il est important de souligner que cet ajustement est effectué à partir d'une solution numérique de référence et non de valeurs expérimentales, ce qui permet de conserver le caractère prédictif du modèle.

Déformation de délocalisation liée au transfert de matière

La déformation de délocalisation induite par le transfert de masse $\underline{\underline{\varepsilon}}_{deloc}^{tm}$ est supposée homogène dans le plan (r, θ) et peut être obtenue à partir du taux d'expansion volumique dans la zone restructurée φ_{deloc}^{tm} via

$$\text{tr}(\underline{\underline{\varepsilon}}_{deloc}^{tm}(T, p)) = \varphi_{deloc}^{tm}(T, p) \quad (\text{II.3.10})$$

et ainsi

$$\underline{\underline{\varepsilon}}_{deloc}^{tm}(T, p) = \frac{1}{2} \varphi_{deloc}^{tm}(T, p) (\underline{e}_r \otimes \underline{e}_r + \underline{e}_\theta \otimes \underline{e}_\theta) \quad (\text{II.3.11})$$

Le taux d'expansion volumique φ_{deloc}^{tm} est défini par

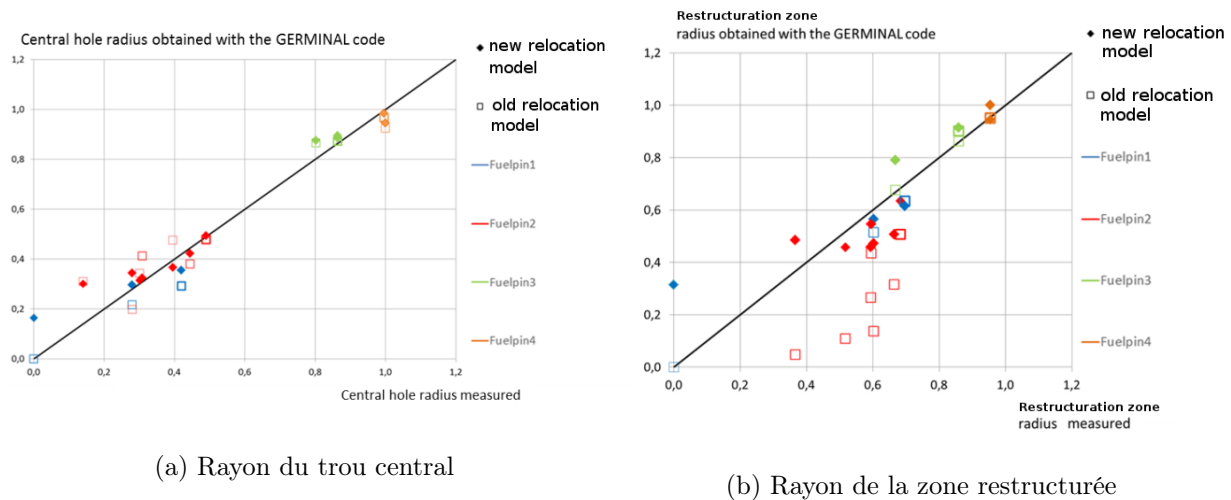
$$\varphi_{deloc}^{tm}(T, p) = \int_{V_{restr}(T) - V_{tm}^{rem}(p)}^{V_{restr}(T)} \frac{dV}{V} = \ln \left(\frac{V_{restr}(T)}{V_{restr}(T) - V_{tm}^{rem}(p)} \right) \quad (\text{II.3.12})$$

où V_{restr} est le volume caractérisant la quantité de matière dans la zone restructurée, elle-même définie par le critère $T > 1800$ °C, et V_{tm}^{rem} est le volume caractérisant la quantité de matière dense provenant de la migration de matière entre les fragments, cf. expression (II.3.4).

Remarque. Afin de considérer uniquement la transformation due au transfert de masse dans le calcul de la déformation de délocalisation, les volumes sont définis hors déformations thermique, mécanique et physico-chimique. □

Résultats numériques

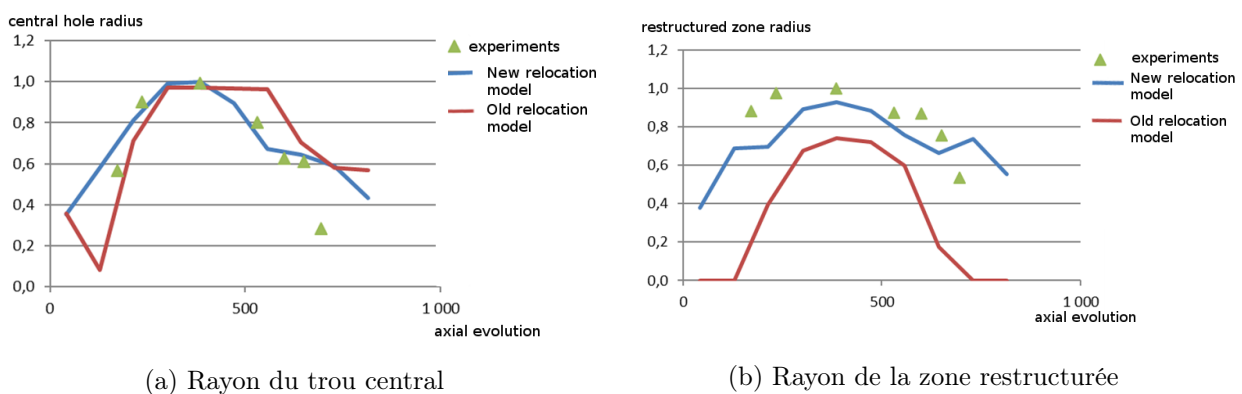
Le nouveau modèle de délocalisation, la mise à jour du modèle de migration des porosités ainsi que les couplages associés ont été portés dans GERMINAL. Les premiers résultats de validation obtenus sont très satisfaisants comme en témoignent les figures II.3.7 et II.3.8.



(a) Rayon du trou central

(b) Rayon de la zone restructurée

FIGURE II.3.7 – Nouveau modèle de délocalisation 1D pour les RNR-Na. Comparaison calcul/mesure sur plusieurs pastilles



(a) Rayon du trou central

(b) Rayon de la zone restructurée

FIGURE II.3.8 – Nouveau modèle de délocalisation 1D pour les RNR-Na. Comparaison calcul/mesure le long d'un profil axial

Les valeurs obtenues sont par ailleurs souvent meilleures (en particulier pour le rayon de la zone restructurée) que l'ancien modèle de GERMINAL alors que ce dernier a été ajusté sur les valeurs expérimentales. Ainsi le nouveau modèle à base physique proposé semble plus prédictif de la délocalisation des fragments en réacteur RNR-Na.

Cependant, ce modèle a été conçu pour les zones à fortes puissances, là où une restructuration du combustible avait lieu. On voit ainsi que dans les zones à puissance intermédiaire lorsqu'il n'y a pas ou peu de restructuration du combustible, le nouveau modèle a tendance à sur-estimer la

taille du trou central et de la zone restructurée. Dans ce cas, la température est sur-estimée car un phénomène de rattrapage de jeu n'a pas été pris en compte.

On pense ainsi que dans ces zones intermédiaires, la puissance étant similaire à celles des réacteurs REP, les gaz de fission ne sont plus totalement relâchés. Une contribution importante à la diminution de la taille du jeu serait due au gonflement de la pastille sous l'effet du gonflement gazeux, cf. section I.1.2. Un couplage de GERMINAL avec un modèle de gonflement gazeux est en cours d'étude actuellement pour vérifier cette hypothèse.

II.3.3 Vers la compréhension du phénomène de transport de matière autour des fissures

Dans la dernière partie de la thèse de M. Temmar [Temmar, 2019], nous avons tenté d'améliorer notre compréhension du phénomène de transport des porosités associées aux volumes libres des fissures. En particulier, nous avons essayé de vérifier la validité de l'hypothèse d'égalité des vitesses de migration des porosités de fabrication et des porosités associées aux volumes des fissures. Pour ces dernières l'expression homogénéisée de la vitesse ne permet pas de se prononcer sur la validité du mécanisme microscopique de flux de matière en phase vapeur dans les fissures (émission de porosités par les fissures).

Nous avons effectué des simulations 2D de migration de porosités sous gradient thermique imposé (représentatif du fonctionnement nominal en réacteur). Il s'agit de calculs homogénéisés de migration avec soit des porosités de fabrication supposées sphériques (porosités fermées) soit des fissures (porosités ouvertes). L'expression de la vitesse homogénéisée de migration \underline{v}_p est celle proposée par Sens [Sens, 1972] pour des porosités sphériques et s'apparente à une loi de Fourier avec conductivité non linéaire. Ainsi la nucléation sera assimilée à de l'advection de porosité dans le plan normal aux fissures.

Un schéma en temps de type Euler explicite et une discrétisation spatiale à base d'éléments finis quadrangulaires quadratiques (\mathcal{Q}_2) sont utilisés pour résoudre numériquement l'équation de transport (II.3.3). La condition CFL suivante est imposée :

$$\Delta t \leq \frac{\min(\Delta x, \Delta y)}{\max(|\underline{v}_p|)} \quad (\text{II.3.13})$$

Comme il s'agit d'un chaînage thermique/migration et non d'un couplage, des non-linéarités ont dû être rajoutées pour traiter les cas non physiques où $p > 1$ ou $p < 0$. Par ailleurs, des oscillations spatiales parasites apparaissent rapidement du fait de la résolution du problème d'advection pure à partir d'une discrétisation centrée du gradient (en éléments finis).

Cependant les premiers éléments de réponse sont déjà intéressants. Dans le cas de porosités fermées de type fabrication, seule une composante radiale (ou suivant l'axe des abscisses pour une géométrie cartésienne) de la vitesse de migration est présente. Cela conduit à transporter la porosité uniquement vers le centre de la pastille. On retrouve bien une zone de restructuration avec perte de porosité, cf. figure II.3.9a et une ébauche de création de trou central quelques instants plus tard.

Dans le cas des porosités ouvertes de type fissure, le gradient circonférentiel (ou suivant l'axe des ordonnées pour une géométrie cartésienne) de température induit une vitesse de migration circonférentielle non nulle qui conduit à transporter de la porosité dans le combustible dans un plan normal aux fissures. Puis les porosités créées dans le solide migrent ensuite radialement vers le centre du combustible (gradient radial prépondérant), cf. figure II.3.9b, ce qui conduit à former un trou central (cf. zone x1 sur la figure). On entrevoit également sur cette figure le phénomène de guérison des fissures par densification dans la zone de restructuration (entre les zones x2 et x3 sur la figure).

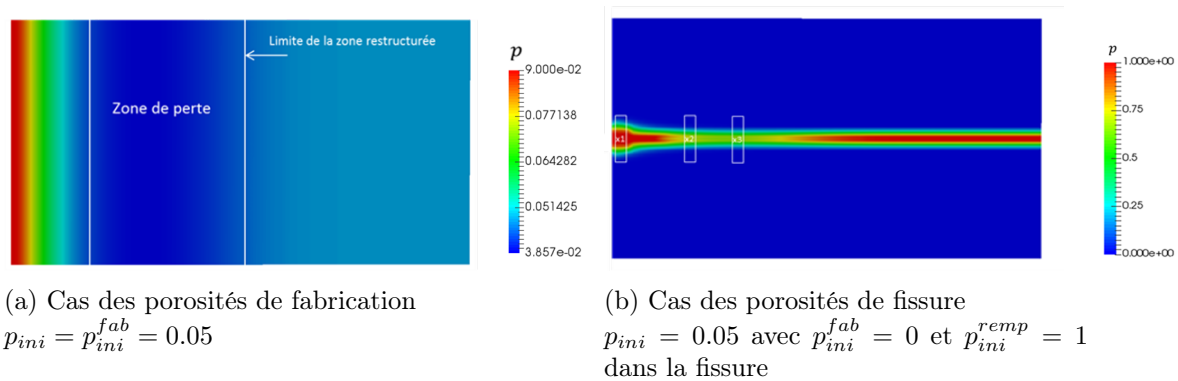


FIGURE II.3.9 – Évolution de la fraction volumique de porosité sous gradient thermique imposé (attention aux échelles différentes)

Grâce à ces premières simulations, nous avons pu constater que le volume de matière qui a migré vers le centre de la pastille, pour la même porosité initiale totale, était similaire quel que soit le type de porosités. Cela semble confirmer notre hypothèse selon laquelle le temps de nucléation de pores lenticulaires par les fissures est négligeable par rapport au temps de migration des porosités dans le combustible.

II.3.4 Directions de recherche

Ce travail de modélisation/simulation a permis clairement d'évaluer l'apport de modèles physiques avancés mais également d'approches numériques pertinentes pour améliorer la validité et la prédictabilité de codes industriels.

Concernant la simulation, il faut à présent tester le nouveau modèle 1D de délocalisation radiale de fragments de combustible proposé sur toute la base de validation de GERMINAL mais aussi dans d'autres codes combustibles concurrents pour vérifier sa validité.

Par ailleurs, concernant le phénomène de rattrapage du jeu, nous avons vu que dans le cas à puissances intermédiaires, notre modèle de délocalisation était insuffisant et qu'il fallait prendre en compte un autre phénomène physique. Nous émettons l'idée que ce phénomène soit lié au gonflement gazeux dans le combustible. Cette piste est à l'étude actuellement au CEA. L'idée est évidemment d'avoir une prédiction aussi fiable que possible de la température du combustible afin d'estimer au mieux les marges à fusion, qui sont un critère important de dimensionnement des aiguilles de combustible. Il serait aussi intéressant en parallèle d'améliorer les lois matériaux du combustible pour qu'elles tiennent compte de la modification microstructurale du combustible engendrée par la migration de porosités.

Enfin, l'idéal afin de valider nos simulations serait de disposer de moyens expérimentaux permettant de mesurer *in situ* la température du combustible au cours de l'irradiation. En effet les mesures post-irradiatoires actuelles ne permettent de valider qu'une petite partie des modèles proposés.

Concernant la modélisation, pour pouvoir évaluer précisément le déplacement radial des fragments, nous avons vu qu'il fallait pouvoir calculer la migration de porosités de forme complexe (non sphériques). Pour cela une première modélisation 2D homogénéisée à l'échelle de la pastille a été mise en place.

Il s'agit maintenant de travailler plus en profondeur sur les problèmes numériques rencontrés afin d'avoir une solution sur des temps de simulation plus longs. La solution envisagée est de reformuler le problème d'advection ainsi que le couplage avec la thermique pour que les valeurs extrêmes de la porosité dérivent naturellement de l'expression mathématique du système résolu. Par ailleurs, nous allons mettre en place une méthode de stabilisation permettant d'éliminer les

oscillations spatiales parasites [BRM22]. Nous nous orientons naturellement vers des méthodes de stabilisation basées sur un décentrement amont (dans la direction de la vitesse) du schéma de discrétisation du gradient et couramment utilisées en mécanique des fluides pour la résolution de l'équation de conservation de la quantité de mouvement, typiquement des approches de type SUPG [Brooks et Hughes, 1982] (Streamline Upwind Petrov Galerkin).

L'expression de la vitesse utilisée pour la migration des porosités issues des fissures (ou porosités allongées) dans notre modèle macroscopique repose sur une analyse stationnaire de l'évaporation-condensation dans une porosité sphérique. Une justification de cette hypothèse paraît nécessaire pour pouvoir valider et compléter les résultats de l'analyse macroscopique. Cette justification passerait par une description de type microscopique du transfert de masse en phase vapeur afin d'avoir une représentation réaliste de la forme des porosités de remplissage lors de la migration. Il faudra alors résoudre l'équation de diffusion en phase vapeur avec une réactualisation de la position des surfaces libres pour suivre l'évolution de la forme des porosités. Une méthode numérique de suivi d'interfaces devra alors être mise en place. Cette modélisation microscopique permettra notamment d'analyser finement le mécanisme de transport et de statuer sur la question de migration de porosité par transfert le long des surfaces libres ou par nucléation de volume libre dans le solide au voisinage de la fissure puis transport dans le solide. Ces travaux de simulation font l'objet du travail de post-doctorat de T. Barani qui a débuté en septembre 2020.

AUTOUR DES COUPLAGES MULTIÉCHELLES

SOMMAIRE DÉTAILLÉ DU CHAPITRE

III.1 Raffinement adaptatif de maillage multiniveau en mécanique des solides	59
III.1.1 Introduction	59
III.1.2 La méthode Local Defect Correction (LDC)	61
III.1.2.a Principe	61
III.1.2.b Algorithme bigrille	62
III.1.2.c Convergence et estimateur <i>a priori</i>	63
III.1.2.d Application de la méthode LDC	64
III.1.3 Extension de la méthode LDC à la mécanique des solides	64
III.1.3.a Élasticité linéaire et généralisation multiniveau	64
III.1.3.b Combinaison avec un estimateur d'erreur <i>a posteriori</i> et critère d'arrêt	67
III.1.3.c Comparaison avec les méthodes h-adaptatives	70
III.1.3.d Contact unilatéral avec frottement en élastostaticité	72
III.1.3.e Comportements matériaux non linéaires	76
III.1.3.f Vers de l'adaptation dynamique de maillage	78
III.1.4 Directions de recherche	80
III.2 Homogénéisation numérique de type éléments finis au carré hybride en mécanique non linéaire	83
III.2.1 Introduction	83
III.2.2 Algorithme éléments finis au carré (EF ²) hybride	84
III.2.2.a Rappel du problème mécanique non linéaire et résolution par la méthode des éléments finis	84
III.2.2.b Présentation de l'algorithme EF ² hybride	86
III.2.3 Vérification et utilisation de l'algorithme EF ² hybride	88
III.2.3.a Couplage multiphysique et multiéchelle dans PLEIADES	89
III.2.3.b Vérification de calculs sur la microstructure	89
III.2.3.c Utilisation du schéma EF ² comme calcul de référence	92
III.2.3.d Scalabilité des calculs EF ² hybrides	93
III.2.3.e Influence des conditions aux limites sur l'état micromécanique	94
III.2.4 Vers un algorithme de couplage numérique multiéchelle unifié	96
III.2.5 Directions de recherche	98

III.1 Raffinement adaptatif de maillage multiniveau en mécanique des solides

III.1.1 Introduction

La complexité croissante des géométries et phénomènes étudiés nous amène à devoir considérer des maillages de pas d'espace de plus en plus fins. Cependant, il est fréquent que l'erreur de discrétisation varie fortement localement autour de zones plus singulières. Ainsi, pour une précision voulue, cela permet de pouvoir utiliser des maillages non uniformément raffinés, c'est-à-dire avec localement des tailles de mailles ou des degrés de fonction de bases différents.

Bien que dans l'ingénierie des maillages localement raffinés définis *a priori* soient couramment utilisés, leur caractère généralement non optimal (en terme de nombre d'inconnues pour une précision voulue), non prédictif et non adaptatif a favorisé le développement de stratégies de raffinement adaptatif de maillage, connues sous le terme générique AMR (pour Adaptive Mesh Refinement) dans la littérature. Toutes les méthodes de type AMR consistent à réduire localement l'erreur de discrétisation spatiale de la forme $\mathcal{O}(h^p)$, avec h le pas d'espace et p le degré des fonctions de base polynomiales. Ainsi en raffinant uniquement localement le maillage, ces méthodes visent à retrouver globalement l'erreur de discrétisation en $\mathcal{O}(h_{fin}^{p_{fin}})$ associée à la partie la plus raffinée.

Nous pouvons distinguer deux grandes familles de méthodes d'adaptation dynamique de maillage :

- les méthodes adaptatives qui consistent à modifier le maillage initial afin d'obtenir un maillage global localement raffiné (taille d'élément, degré d'élément).

On retrouve dans cette catégorie les méthodes dites h-adaptatives [Demkowicz *et al.*, 1985 ; Belytschko et Tabbara, 1993 ; Díez et Huerta, 1999 ; ...], p-adaptatives [Babuska *et al.*, 1981 ; Babuška et Suri, 1987 ; ...], r-adaptatives [Tezuka et Okuda, 1988 ; Cao *et al.*, 2001 ; Huang et Russell, 2010 ; ...] et leurs combinaisons [Guo et Babuška, 1986 ; Demkowicz *et al.*, 1989 ; Sun et Zamani, 1992 ; Askes et Rodriguez-Ferran, 2001 ; ...] parmi lesquelles la méthode hp-adaptative est la plus connue.

La dénomination de ces méthodes provient directement du paramètre modifié dans l'erreur de discrétisation (h ou p), l'indice r signifiant quand à lui « relocalisation » pour se distinguer des méthodes h-adaptatives. Ces méthodes peuvent être appliquées de manière récursive si l'erreur souhaitée n'est pas atteinte.

Dans cette famille de méthodes, on range en général également les méthodes s-adaptatives [Fish, 1992 ; Yue et Robbins, 2005 ; Ben Dhia, 1998 ; ...] (s pour « superposition ») même si celles-ci sont plutôt proches du concept des méthodes multigrilles locales par l'ajout d'un maillage local supplémentaire. Cependant, dans ces approches, le problème composite complet est résolu.

Un résumé de principe des méthodes adaptatives est fourni sur la figure III.1.1a.

- les méthodes multigrilles locales ou méthodes multiniveaux [Bai et Brandt, 1987], qui consistent à ne pas modifier le maillage initial mais à rajouter récursivement des maillages locaux de pas d'espace de plus en plus fin, voir figure III.1.1b. La résolution se fait séparément sur chaque maillage (séparation des inconnues) au travers d'un processus itératif reliant les solutions des différents niveaux de maillage, cf. figure III.1.2.

Les méthodes multigrilles locales adaptatives tirent leur nom de leur similitude avec un processus multigrille [Brandt, 1977] inversé et localisé. Elles peuvent également être vues comme une méthode s-adaptative où les problèmes sur les différents maillages sont résolus séparément, ou encore dans le cas d'un raffinement hiérarchique comme une méthode h-adaptative hiérarchique où les éléments raffinés sont ajoutés sur des grilles distinctes. Il est à noter que le terme AMR vient historiquement d'une méthode de type multigrille locale [Berger et Olinger, 1984].

Les différentes méthodes multigrilles locales [Berger et Olinger, 1984 ; Hackbusch, 1984 ; Angot *et al.*, 1992 ; McCormick, 1984 ; Cavin *et al.*, 2005 ; ...] se discriminent essentiellement par les opérateurs de transfert entre les niveaux de maillage.

Ce type d'approches est très générique puisqu'on peut aisément modifier le solveur, le type et l'ordre des éléments, et même le modèle entre les différents maillages. De même les niveaux de maillage ne doivent pas forcément être générés de façon hiérarchique (voir par exemple [Nefedov et Mattheij, 2002]).

Ainsi, les méthodes multigrilles locales peuvent être vues comme des méthodes de décomposition de domaine avec recouvrement et sont donc également très proches des méthodes de patch [Duval *et al.*, 2018]. Lorsqu'elles sont utilisées en approche de type multimodèle, les méthodes multigrilles locales sont également appelées méthodes globales/locales [Whitcomb, 1991 ; Gendre *et al.*, 2009 ; Passieux *et al.*, 2013 ; ...]

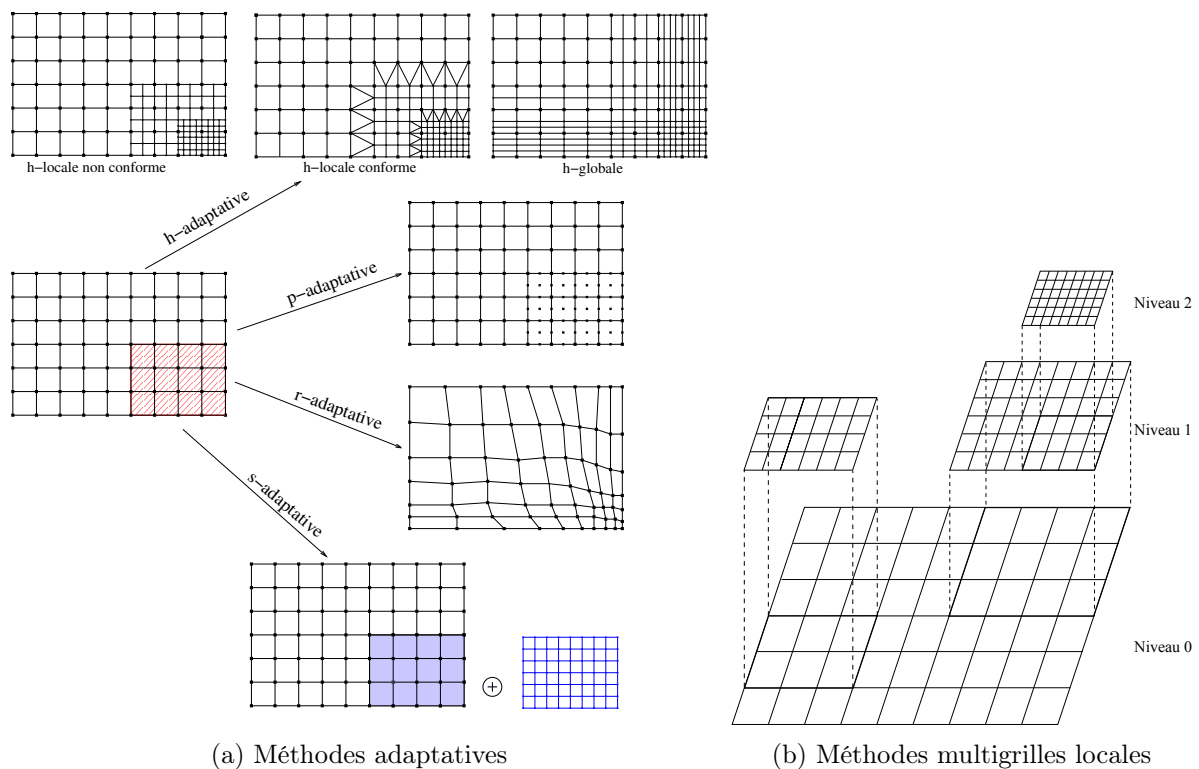


FIGURE III.1.1 – Schéma de principe des méthodes de raffinement adaptatif de maillage

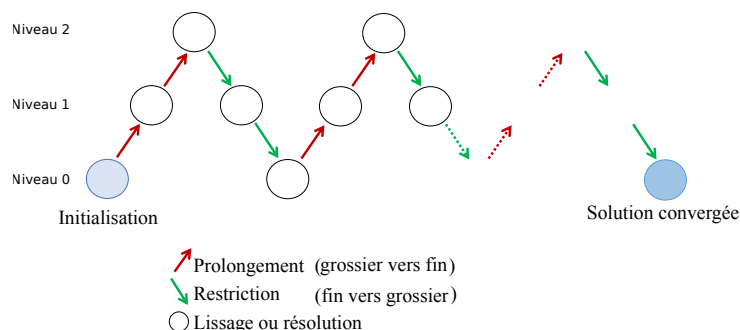


FIGURE III.1.2 – Représentation du processus multigrille local

D'une façon générale, les méthodes consistant à raffiner localement le pas de maillage permettent d'améliorer la solution de problèmes présentant des singularités [Babuška et Szabo, 1982], alors que les méthodes travaillant sur l'ordre des fonctions d'interpolation permettent d'obtenir une vitesse de convergence plus élevée [Babuska *et al.*, 1981]. Il est à noter qu'en pratique dans

les logiciels industriels l'ordre maximal d'interpolation est souvent limité.

Étant donné que nous voulons résoudre un problème avec singularités locales de façon la moins intrusive possible dans la plateforme PLEIADES [Plancq *et al.*, 2004 ; Marelle *et al.*, 2013] et en particulier dans son solveur mécanique à base Cast3M [Cast3M], nous nous sommes donc intéressés à des méthodes de raffinement de pas de maillage. Par ailleurs, nous voulions une méthode de raffinement adaptatif efficace pour résoudre des problèmes de mécanique quasi-statique, impliquant des solveurs implicites et donc la résolution de systèmes linéaires. Ainsi, les méthodes multigrilles locales nous ont paru très prometteuses car elles permettent de ne traiter que des systèmes de tailles limitées. Nous espérons ainsi pouvoir atteindre des tailles locales de maille plus fines en des temps de calculs plus raisonnables qu'avec des méthodes adaptatives.

III.1.2 La méthode Local Defect Correction (LDC)

Dans ce travail, nous avons choisi de nous focaliser sur la méthode Local Defect Correction (LDC) [Hackbusch, 1984] car cette méthode semble être la plus adaptée aux problèmes de mécanique des solides résolus par une discrétisation en éléments finis.

III.1.2.a Principe

Les opérateurs de transfert impliqués dans le processus multigrille local (cf. figure III.1.2) sont pour la méthode LDC :

- opérateur de prolongement (*grossier* \rightarrow *fin*) : projection de la solution grossière sur la frontière fictive (ou interne) du maillage fin afin de définir des conditions aux limites de Dirichlet sur cette partie de frontière ;
- opérateur de restriction (*fin* \rightarrow *grossier*) : projection de la solution fine sur le maillage grossier pour déterminer un résidu qui est ajouté comme correction au second membre du problème grossier.

Les opérateurs de projection sont à déterminer en fonction du type de problème traité, notamment vis-à-vis de l'ordre de convergence attendu sur la solution. On le verra plus en détails en section III.1.2.c.

Considérons le problème (\mathcal{P}) aux dérivées partielles générique suivant :

$$(\mathcal{P}) \quad \begin{cases} \mathcal{L}(u) = f & \text{dans } \Omega \\ \text{Conditions aux limites} & \text{sur } \partial\Omega \end{cases} \quad (\text{III.1.1})$$

avec \mathcal{L} un opérateur différentiel en espace (généralement non linéaire), f le second membre et u l'inconnue du problème.

La méthode multiniveaux LDC consiste alors à définir un ensemble de domaines emboîtés Ω_l , $0 \leq l \leq l^*$, $\Omega_l \subset \Omega_{l-1}$, avec la convention $\Omega_0 = \Omega$ où chaque domaine Ω_l est discrétisé par un maillage (ou grille) G_l de frontière Γ_l et de pas de discrétisation $h_l < h_{l-1}$. Le problème discret (\mathcal{P}_l^i) résolu sur chaque grille G_l à chaque itération $i > 0$ de la méthode LDC, peut alors s'écrire de façon générique

$$(\mathcal{P}_l^i) \quad \begin{cases} \mathcal{L}_l(u_l^i) = f_l + r_l^i & \text{dans } G_l \\ \text{Conditions aux limites de } (\mathcal{P}) & \text{sur } \Gamma_l \cap \partial\Omega \\ u_l^i = g_l^i & \text{sur } \Gamma_l \setminus \partial\Omega \end{cases} \quad (\text{III.1.2})$$

avec \mathcal{L}_l l'opérateur discret associé à $\mathcal{L}|_{\Omega_l}$ et f_l la discrétisation de $f|_{\Omega_l}$.

Ainsi, au cours du processus itératif, seuls le champ de valeurs Dirichlet g_l^i sur $\Gamma_l \setminus \partial\Omega$ et la correction du second membre r_l^i sont modifiées via l'opérateur de prolongement et de restriction respectivement. La méthode LDC est donc peu intrusive car ces opérateurs agissent uniquement dans des phases de pré- et post-traitement. Le fait de ne pas avoir à modifier l'opérateur différentiel discret au cours des itérations permet d'obtenir des temps de calculs très compétitifs (cf. conservation de la factorisation de la matrice du problème linéarisé).

III.1.2.b Algorithme bigrille

Dans la littérature l'algorithme LDC est habituellement décrit en bigrille ($l^* = 1$), cf. algorithme III.1.1. Les opérateurs de prolongement P_0^1 et de restriction R_1^0 utilisés sont en général des opérateurs d'interpolation. Contrairement au processus multigrille standard [Brandt, 1977], l'opérateur de restriction ne doit pas être le transposé de celui de prolongement : $R_1^0 \neq (P_0^1)^T$. Par ailleurs, deux ensembles A_0 et \dot{A}_0 de nœuds de G_0 sont définis pour mener à bien l'étape de restriction, voir [Hackbusch, 1984] et les figures III.1.3b et III.1.3c. L'ensemble A_0 contient les nœuds de G_0 strictement inclus dans le domaine discrétisé par G_1 . L'ensemble \dot{A}_0 est constitué des nœuds intérieurs à $A_0 \cup \Gamma_0$ au sens du schéma de discrétisation (i.e. tel que $\forall x \in \dot{A}_0$, le calcul de $\mathcal{L}_0(u_0^i)(x)$ ne fasse intervenir que des valeurs de $u_0^i(y)$ avec $y \in A_0 \cup \Gamma_0$).

Algorithme III.1.1 : Algorithme LDC bigrille

Initialisations

$r_0^0 = 0, r_1^i \equiv 0 \quad \forall i$
 Calcul de u_0^0 solution du problème (\mathcal{P}_0^0) défini sur G_0
 $i = 0$

Tant que ($i < i_{max}$) *et* (*non convergence*) **faire**

Mise à jour

$i = i + 1$
 $u_0^i = u_0^{i-1}$

Prolongement Résolution sur la grille fine G_1

Détermination des valeurs Dirichlet sur $\Gamma_1 \setminus \partial\Omega$:

$$g_1^i(x) = (P_0^1(u_0^i))(x)|_{\Gamma_1 \setminus \partial\Omega}$$

Calcul de u_1^i solution du problème (\mathcal{P}_1^i) .

Restriction Correction sur la grille grossière G_0

Restriction de la solution fine u_1^i sur A_0 :

$$\tilde{u}_0^i(x) = (R_1^0(u_1^i))(x) \quad \forall x \in A_0$$

Calcul du résidu local grossier sur \dot{A}_0 :

$$d_0^i(x) = (\mathcal{L}_0(\tilde{u}_0^i) - f_0)(x) \quad \forall x \in \dot{A}_0$$

Correction de la solution grossière u_0^i par résolution du problème (\mathcal{P}_0^i) avec

$$r_0^i(x) = \chi_{\dot{A}_0} d_0^i(x)$$

où $\chi_{\dot{A}_0}$ est la fonction caractéristique de \dot{A}_0

Test de convergence :

$$\frac{\|u_0^i - u_0^{i-1}\|}{\|u_0^{i-1}\|} \leq \epsilon$$

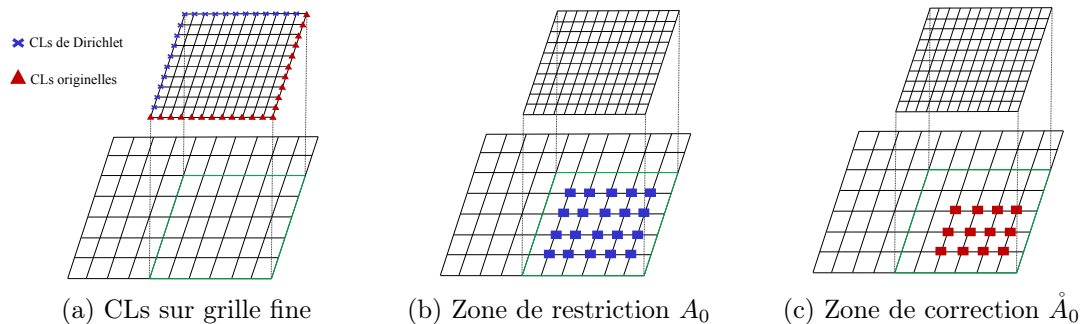


FIGURE III.1.3 – Ensemble de nœuds associés aux opérateurs de transfert de la méthode LDC

Remarques. *Concernant l'étape de restriction :*

- la définition du résidu d_0^i est similaire à celle utilisée dans l'algorithme multigrille FAS [Brandt, 1977] en considérant que le résidu associé à la résolution du problème fin est négligeable devant d_0^i . Ceci implique que la résolution sur la grille fine doit être suffisamment précise (voir [Khadra et al., 1996] par exemple).
- on retrouve ici la notion de troncature car le résidu d_0^i peut être vu comme une estimation de l'erreur de troncature à partir de la solution fine ;
- lorsque l'opérateur \mathcal{L} est linéaire, la méthode conduit à résoudre une équation d'erreur sur l'ensemble \dot{A}_0 . □

L'algorithme multiniveau est généralement décrit dans la littérature comme une simple généralisation de l'algorithme bigrille. Nous verrons dans la section III.1.3.a que la formalisation de cet algorithme multiniveau nécessitait cependant d'être précisée.

III.1.2.c Convergence et estimateur *a priori*

D'un point de vue théorique, il a été prouvé par Hackbusch [Hackbusch, 1984] que la méthode LDC bigrille appliquée à un problème elliptique linéaire (typiquement pour l'opérateur Laplacien) converge vers la solution du problème continu. Une première estimation locale de l'erreur est également proposée sous la forme d'une somme des erreurs de discrétisation sur chacune des grilles et des erreurs liées à l'ordre des opérateurs de transfert choisis. Par la suite, il a été démontré dans [Ferket et Reusken, 1996] que la méthode LDC pouvait être vue comme un couplage partitionné de point fixe permettant de résoudre de façon conforme des stratégies h-adaptatives hiérarchiques. Toujours dans [Ferket et Reusken, 1996] un estimateur *a priori* de l'erreur en norme infinie de la méthode LDC bigrille a été obtenu pour un schéma différences finies à l'ordre 2. En généralisant l'analyse faite par Ferket et Reusken à tout type de discrétisation et d'ordre de convergence, on peut s'attendre à l'estimateur d'erreur *a priori* suivant pour une norme choisie

$$\|u_c - u\| \leq C_0 h_0^k + C_1 h_1^k + C_2 h_0^j \quad (\text{III.1.3})$$

avec u_c la solution LDC composite, k l'ordre de l'erreur de discrétisation pour la norme choisie (on suppose ici le même ordre de discrétisation sur les 2 grilles) et j l'ordre des opérateurs de transfert (ou projection).

Les deux premiers termes du membre de droite correspondent aux erreurs de discrétisation spatiale hors et dans la région de raffinement Ω_1 respectivement. Typiquement, on a en général une convergence en $k = p$ en norme H^1 , ou $k = p + 1$ en norme L^2 (avec p le degré des fonctions de base). Le troisième terme est l'erreur liée aux opérateurs de prolongement et restriction. L'erreur de pollution [Babuška et al., 1997], liée à l'influence de la partie non raffinée du domaine sur la partie raffinée, est ici comprise dans le terme $C_0 h_0^k$. On voit clairement que cette erreur peut devenir prépondérante si la zone de raffinement et/ou le pas de maillage h_1 choisis sont trop petits.

Lorsque la zone de raffinement contient les erreurs les plus importantes, nous avons $C_1 \gg C_0$ et $C_1 \gg C_2$. Ainsi en prenant soin d'utiliser des opérateurs de transfert d'ordre $j \geq k$, on peut s'attendre à ce que l'erreur LDC composite soit contrôlée par l'erreur de discrétisation du maillage local le plus fin. En généralisant cette fois à plusieurs niveaux de maillage, on retrouve la propriété souhaitée pour une méthode AMR, à savoir une convergence de l'erreur en fonction du pas de maillage local le plus fin, cf. section III.1.1. Numériquement, ce résultat a été retrouvé dans la littérature pour des problèmes de type diffusion avec plusieurs niveaux de raffinement (voir [Khadra et al., 1996], [RAB07] par exemple).

III.1.2.d Application de la méthode LDC

La méthode LDC, initialement introduite sur l'opérateur Laplacien, a beaucoup été étudiée et appliquée en thermique et en mécanique des fluides [Belliard et Grandotto, 2003 ; Anthonissen *et al.*, 2005 ; Minero *et al.*, 2006 ; Kramer *et al.*, 2009 ; ...]. Malgré son fort potentiel, elle n'avait jamais été appliquée en mécanique des solides.

Dans les thèses de L. Barbié [Barbié, 2013], H. Liu [Liu, 2016] et D. Koliesnikova [Koliesnikova, 2021], nous avons ainsi travaillé à l'extension de la méthode LDC en mécanique des solides : en élasticité ou pour des comportements non linéaires, et au cas du contact avec ou sans frottement. De façon à automatiser la procédure de raffinement, le couplage avec un estimateur d'erreur *a posteriori* a également été étudié.

Il est à noter que parallèlement à nos travaux, les auteurs [Biotteau *et al.*, 2010 ; Biboulet *et al.*, 2013] se sont également intéressés à l'extension d'approches multigrilles locales à la mécanique des solides. Il s'agit dans ce cas d'une approche de type Full MultiGrid (FMG) locale, très proche de la méthode LDC. Les niveaux de raffinement sont alors rajoutés de façon progressive après convergence des cycles multiniveaux précédents.

III.1.3 Extension de la méthode LDC à la mécanique des solides

III.1.3.a Élasticité linéaire et généralisation multiniveau

Nous nous sommes dans un premier temps intéressés à l'extension de la méthode LDC à la mécanique des solides élastostatique dont le problème fort s'écrit

$$(\mathcal{P}) \begin{cases} -\operatorname{div} \underline{\underline{\sigma}} = \underline{f} & \text{dans } \Omega, \\ \underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{\varepsilon}} & \text{dans } \Omega, \\ \underline{\underline{\varepsilon}} = \frac{1}{2} (\operatorname{grad} \underline{u} + (\operatorname{grad} \underline{u})^T) & \text{dans } \Omega, \\ \text{Conditions aux limites} & \text{sur } \partial\Omega \end{cases} \quad (\text{III.1.4})$$

avec $\underline{\underline{C}}$ le tenseur d'élasticité d'ordre 4, $\underline{\underline{\sigma}}$ le tenseur des contraintes d'ordre 2, $\underline{\underline{\varepsilon}}$ le tenseur des déformations linéarisé d'ordre 2, et \underline{u} le champ de déplacement. En exprimant les composantes du tenseur d'élasticité, on obtient la loi de Hooke (III.1.5) reliant le tenseur des contraintes au tenseur des déformations :

$$\underline{\underline{\sigma}} = \lambda \operatorname{tr}(\underline{\underline{\varepsilon}}) \underline{\underline{I}} + 2\mu \underline{\underline{\varepsilon}} \quad (\text{III.1.5})$$

avec $\underline{\underline{I}}$ la matrice identité et (λ, μ) les coefficients de Lamé reliés au module d'Young (E) et au coefficient de poisson (ν) par la relation :

$$\lambda = \frac{E\nu}{(1-2\nu)(1+\nu)}, \quad \mu = \frac{E}{2(1+\nu)}$$

Ainsi, le problème (\mathcal{P}) est linéaire en déplacement.

L'extension de la méthode LDC au problème d'élasticité linéaire est assez directe, cf. Algorithme III.1.1. Cette extension a été introduite et analysée dans [BRL14]. Dans ce papier, nous nous sommes également penchés sur la généralisation multiniveau de l'algorithme LDC. En effet, comme évoqué précédemment, l'algorithme LDC est écrit classiquement pour deux niveaux. Il peut facilement être étendu à plusieurs grilles en générant les sous-problèmes récursivement. Il est à noter par exemple que la définition de \hat{A}_l doit être à présent l'ensemble des nœuds intérieurs à $A_l \cup (\Gamma_l \cap \Gamma)$ au sens du schéma de discrétisation pour éviter de tenir compte des nœuds avec conditions aux limites fictives dans le terme de correction.

Cependant cette généralisation pose la question du second membre et donc de la correction à

utiliser durant l'étape de prolongement. Celle-ci n'est jamais clairement explicitée dans la littérature car elle n'est pas le point-clé de l'étape de prolongement mais surtout car très peu d'articles introduisent un algorithme multiniveau général.

Deux possibilités dépendant de la façon de considérer les niveaux intermédiaires apparaissent. L'hypothèse de récursivité de l'algorithme multiniveau revient à considérer chaque niveau intermédiaire comme un niveau grossier à partir duquel un nouvel algorithme bigrille est appliqué. Ainsi, le second membre de l'étape de restriction précédente est utilisé pour l'étape de prolongement. Il faut donc appliquer le résidu de l'étape de prolongement précédente, cf. Eq. (III.1.6)

$$\text{Étape de prolongement } i : r_l^i = r_l^{i-1}, \quad 0 < l \leq l^* \quad (\text{III.1.6})$$

avec l^* le nombre de niveau de l'algorithme LDC.

L'autre hypothèse consiste à avoir une vision globale du cycle multigrille (cf. figure III.1.2). Les niveaux intermédiaires jouent le rôle de niveaux fins durant l'étape de prolongement et de niveaux grossiers durant l'étape de restriction. Par conséquent, le résidu est réinitialisé à zéro à chaque nouvelle étape de prolongement :

$$\text{Étape de prolongement } i : r_l^i = 0, \quad 0 < l \leq l^* \quad (\text{III.1.7})$$

Remarque. *Le niveau le plus fin n'étant jamais corrigé, nous avons $r_{l^*}^i \equiv 0, \forall i$. Ainsi les deux hypothèses précédentes sont cohérentes avec l'algorithme bigrille.* \square

Nous avons vérifié sur plusieurs cas dans [BRL14] la convergence en maillage de la méthode LDC. Nous nous sommes mis dans le cas d'éléments bilinéaires ($p=1$). Il en est ressorti que la méthode LDC converge bien en $\mathcal{O}(h_{l^*}^k)$ tant que l'erreur de pollution (due à l'erreur de discrétisation sur la partie non raffinée du maillage) n'est pas atteinte. Pratiquement, la convergence en $\mathcal{O}(h_{l^*}^k)$ veut dire que le même niveau d'erreur est obtenu avec un pas local h_{l^*} sur le sous-maillage de niveau l^* (généré à partir d'un maillage grossier de pas h_0) qu'avec un unique maillage global uniformément raffiné avec le même pas h_{l^*} .

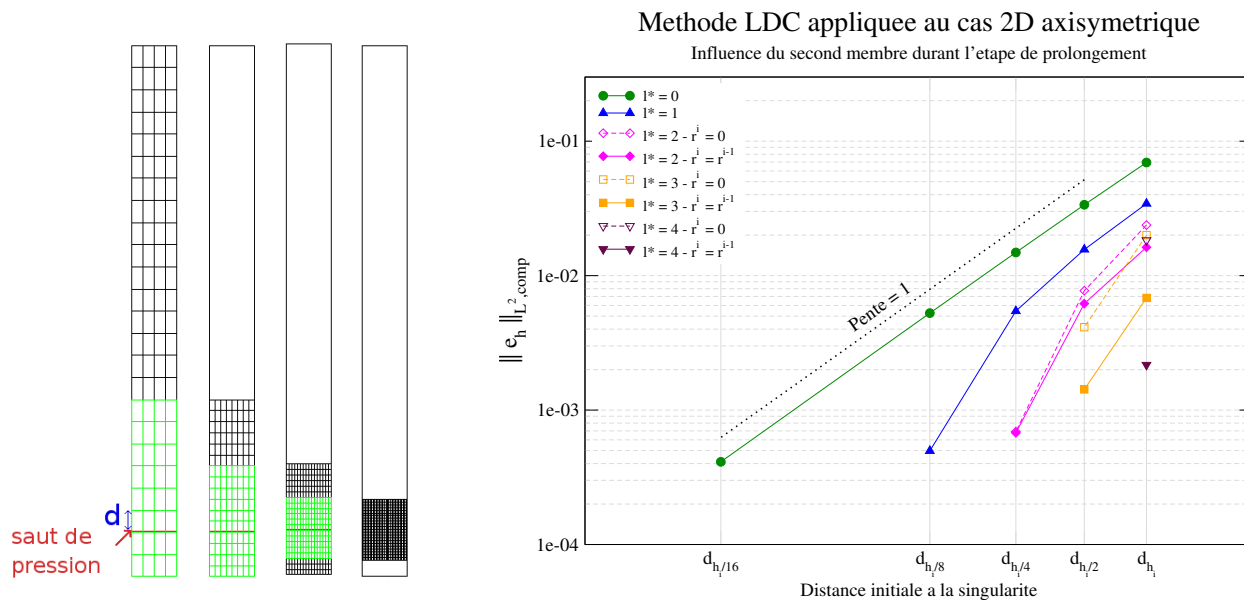
Par ailleurs, nous avons également étudié dans [BRL14] l'influence des deux hypothèses de généralisation multiniveau (cf. Eqs (III.1.6) ou (III.1.7)). Il a été constaté que le choix du résidu à appliquer à l'étape de prolongement n'a que peu d'influence sur l'erreur de la solution LDC convergée sur le maillage grossier. Cependant, l'hypothèse multiniveau a un impact important sur la précision de la solution LDC composite, c'est-à-dire la solution tenant compte de l'ensemble des sous-niveaux. Il apparaît clairement que l'utilisation de la correction du second membre précédente (hypothèse (III.1.6)) est requise pour obtenir une solution précise sur tous les sous-niveaux ($l^* > 1$) de raffinement.

L'analyse fine a montré que les deux choix de second membre durant l'étape de prolongement conduisent à une transmission de résidus corrects lors de l'étape de restriction mais que seul le second membre corrigé permet également d'avoir les bonnes valeurs de conditions aux limites de Dirichlet sur les sous-niveaux et donc également les bonnes solutions.

Nous illustrons ici les propos précédents sur un cas test 2D axisymétrique, représentatif de la modélisation 2Drz de la plateforme PLEIADES, cf. figure I.7. Nous nous sommes concentrés sur l'étude de la gaine seule. Ainsi le contact entre la pastille et la gaine est modélisé par une discontinuité de pression le long de la paroi interne de la gaine. Il est à noter que les maillages générés hiérarchiquement ne sont pas adaptés à cette discontinuité de pression, cf. figure III.1.4a. Cela est en cohérence avec le contexte industriel où la position exacte du contact n'est pas connue *a priori* et peut varier au cours du calcul. La position de la discontinuité de pression est donc approchée par le maillage de façon conservative par rapport aux critères de sûreté. Nous la noterons d_h dans la suite car elle dépend du pas de maillage h au premier ordre. L'erreur de discrétisation est donc la somme de 2 termes : l'erreur liée à la modélisation de la singularité et l'erreur du schéma de discrétisation. Pour des éléments finis bilinéaires (\mathcal{Q}_1), l'adaptation de la démonstration faite dans [Ram08] permet d'attendre une convergence à l'ordre 1 ($k = 1$)

en $\mathcal{O}(d_h)$ en norme L^2 . Ainsi à l'aide du processus multiniveau LDC, nous espérons atteindre une convergence en $\mathcal{O}(d_{h_{l^*}})$, cf. section III.1.2.c, jusqu'à ce que l'erreur de pollution devienne prépondérante. Dans ce cas, les opérateurs de transfert utilisés sont une interpolation basée sur les fonctions de base pour l'étape de prolongement et la restriction canonique pour l'étape de restriction.

Sur la figure III.1.4b, nous avons reporté l'erreur en norme L^2 entre la solution LDC composite et une solution EF de référence calculée sur un maillage très fin (pas de maillage de $2 \mu m$ soit environ 2 millions de ddl), adapté à la discontinuité de pression (solution analytique non disponible).



(a) Exemple de maillages générés - Zones d'intérêt définies *a priori* (maillage courant en noir, zone à raffiner en vert).

(b) Comparaison des 2 stratégies d'algorithme multiniveau sur la norme L^2 de la solution LDC composite.

FIGURE III.1.4 – Illustration de l'algorithme LDC multiniveau - Cas test 2D axisymétrique - Pas de maillage initial : $h_0 = h_i = 327 \mu m$

Nous constatons sur cette figure qu'afin d'obtenir la convergence souhaitée en $\mathcal{O}(d_{h_{l^*}})$, il faut utiliser le second membre corrigé $r^i = r^{i-1}$ durant l'étape de prolongement (courbes en trait plein sur la figure III.1.4b).

Les niveaux de raffinement sont générés *a priori* avec une heuristique indépendante du pas de maillage initial (5 bandes d'éléments de part et d'autres de la discontinuité de pression), cf. figure III.1.4a. Ainsi, plus le maillage initial est grossier, plus l'erreur de pollution est atteinte rapidement en terme de nombre de sous-niveaux, cf. figure III.1.4b.

Dans [BRL14], nous avons également montré que les 2 hypothèses multiniveaux conduisaient à des convergences très rapides en nombre de cycles (2 ou 3 typiquement) et donc à des temps de calculs comparables. Ainsi en conclusion, nous utilisons à présent l'algorithme LDC multiniveau avec second membre corrigé à l'étape de prolongement qui est détaillé dans l'algorithme III.1.2. Toujours concernant les performances, nous avons également constaté que plus la précision souhaitée était importante, plus il était avantageux, d'un point de vue du temps de calcul et nombre de degrés de liberté total, d'utiliser un maillage initial grossier et de nombreux sous-niveaux, et ce tant que l'erreur de pollution n'est pas atteinte. Lorsque l'erreur de pollution est atteinte, le raffinement de maillage devient inefficace. Cela sous-entend que les sous-niveaux de maillage n'étaient pas suffisamment étendus ou bien positionnés pour atteindre l'erreur souhaitée. Dans la littérature, il existe peu d'estimateurs de l'erreur de pollution (voir par exemple [Oden et Feng,

1996]) et le temps de calcul associé à ces estimateurs est équivalent à ceux d'estimateurs d'erreur *a posteriori* permettant d'avoir directement une estimation de l'erreur de discrétisation. Ainsi nous nous sommes intéressés par la suite à la combinaison de la méthode LDC avec un estimateur d'erreur *a posteriori* pour essayer de générer les sous-niveaux de façon optimale vis-à-vis de l'erreur souhaitée et ainsi éviter les écueils liés à l'erreur de pollution.

Algorithme III.1.2 : Algorithme LDC multiniveau

Initialisations

$r_l^0 = 0, \forall l = 0, \dots, l^*$
 Calcul de u_0^0 solution du problème (\mathcal{P}_0^0) défini sur G_0
 $i = 0$

Tant que ($i < i_{max}$) *et* (*non convergence*) **faire****Mise à jour**

$i = i + 1$
 $u_0^i = u_0^{i-1}$

Prolongement *Vers la grille* G_{l^*} **Pour** $l = 1, \dots, l^*$

Détermination des valeurs Dirichlet sur $\Gamma_l \setminus \partial\Omega$:

$$g_l^i(x) = (P_{l-1}^l(u_{l-1}^i))(x)_{|\Gamma_l \setminus \partial\Omega}$$

Mise à jour de la correction du second membre :

$$r_l^i = r_l^{i-1}$$

Calcul de u_l^i solution du problème (\mathcal{P}_l^i) .

Restriction *vers la grille* G_0 **Pour** $l = l^* - 1, \dots, 0$

Restriction de la solution u_{l+1}^i sur A_l :

$$\tilde{u}_l^i(x) = (R_{l+1}^l(u_{l+1}^i))(x) \quad \forall x \in A_l$$

Calcul du résidu local sur \hat{A}_l :

$$d_l^i(x) = (\mathcal{L}_l(\tilde{u}_l^i) - f_l)(x) \quad \forall x \in \hat{A}_l$$

Correction de la solution u_l^i par résolution du problème (\mathcal{P}_0^i) avec

$$r_l^i(x) = \chi_{\hat{A}_l} d_l^i(x)$$

où $\chi_{\hat{A}_l}$ est la fonction caractéristique de \hat{A}_l

Test de convergence :

$$\frac{\|u_0^i - u_0^{i-1}\|}{\|u_0^{i-1}\|} \leq \epsilon$$

III.1.3.b Combinaison avec un estimateur d'erreur *a posteriori* et critère d'arrêt

Nous avons travaillé dans les thèses [Barbié, 2013 ; Liu, 2016] à l'automatisation de la génération des sous-niveaux de maillage afin d'être indépendants de la connaissance *a priori* de l'utilisateur et d'éviter d'être limités par l'erreur de pollution (cf. section précédente). Pour ce faire, nous nous sommes intéressés aux estimateurs d'erreur *a posteriori* [Verfürth, 1996 ; Ainsworth et Oden, 2011] qui ont pour but d'estimer l'erreur de discrétisation à partir d'un résultat de calcul. Les estimateurs disponibles en mécanique des solides sont principalement basés sur les résidus d'équilibre [Babuška et Rheinboldt, 1978], le lissage des contraintes [Zienkiewicz et Zhu, 1987] ou la relation de comportement [Ladevèze et Leguillon, 1983]. L'idée ici n'était pas

de comparer en détail les performances des estimateurs d'erreur *a posteriori* mais de choisir un estimateur simple et efficace pour la procédure de raffinement de maillage multiniveau. En effet, il est important que le temps de calcul requis par l'estimateur d'erreur *a posteriori* reste faible devant le temps de calcul de la solution multiniveau LDC.

Nous nous sommes ainsi focalisés sur l'estimateur basé sur le lissage des contraintes de « Zienkiewicz et Zhu » [Zienkiewicz et Zhu, 1987], en raison de la simplicité de sa mise en œuvre, de son rapport qualité/coût et de ses bons résultats, notamment dans des pratiques industrielles. L'idée sous-jacente des estimateurs basés sur le lissage des contraintes est que le gradient discret, obtenu via une résolution par éléments finis, est discontinu le long de la frontière inter-éléments, ce qui n'est pas le cas du gradient de la solution analytique. Ainsi, ce type d'estimateur consiste à construire un gradient lissé supposé être une meilleure approximation du gradient réel et à définir l'erreur à partir de la différence entre le gradient lissé et le gradient discret. La famille des estimateurs de Zienkiewicz et Zhu (ZZ) [Zienkiewicz et Zhu, 1987 ; Zienkiewicz et Zhu, 1992a ; Zienkiewicz et Zhu, 1992b] est une méthode de lissage particulière où le gradient lissé est décomposé sur la base des fonctions de forme de la solution. Les valeurs nodales du gradient lissé sont obtenues soit par projection [Zienkiewicz et Zhu, 1987] soit par une approximation polynomiale non nodale basée sur des points particuliers [Zienkiewicz et Zhu, 1987 ; Zienkiewicz et Zhu, 1992a]. Nous nous intéressons ici à l'approche par projection qui est la plus efficace en temps de calcul et performante pour des discrétisations d'ordre peu élevé. En mécanique des solides, nous travaillons directement sur les contraintes (reliées au gradient via la loi de comportement), et l'estimateur ZZ s'écrit alors en norme énergie sur chaque élément K du maillage (ou de la grille) G :

$$\xi_K = \left(\int_K (\underline{\sigma}_h^s - \underline{\sigma}_h) : (\underline{\varepsilon}_h^s - \underline{\varepsilon}_h) dK \right)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{III.1.8})$$

avec $\underline{\sigma}_h^s$ le tenseur des contraintes lissé, $\underline{\sigma}_h$ le tenseurs des contraintes discret, $\underline{\varepsilon}_h^s$ le tenseur des déformations associé au tenseur des contraintes lissé via le tenseur d'élasticité $\underline{\varepsilon}_h^s = \mathbf{C}^{-1} \underline{\sigma}_h^s$ et $\underline{\varepsilon}_h$ le tenseur des déformations discret.

L'erreur globale estimée sur le maillage G est alors obtenue en sommant les contributions élémentaires :

$$\xi_G = \left(\sum_{K \in G} \xi_K^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{III.1.9})$$

L'utilisation d'un estimateur d'erreur *a posteriori* s'insère naturellement dans la première étape de prolongement de la méthode LDC (voir Algorithme III.1.2) afin de construire automatiquement les grilles G_l , $0 < l \leq l^*$ au cours du processus de raffinement. Ce couplage a été détaillé dans [LRL17]. L'estimateur d'erreur est alors appliqué sur la solution du niveau précédent ($l-1$) pour détecter les éléments à raffiner afin de créer le maillage G_l . Ce choix de couplage revient à générer tous les niveaux LDC durant la première étape de prolongement, donc avant que les valeurs Dirichlet n'aient pu être corrigées. Dans le cas d'un estimateur de type ZZ basé sur le lissage de contraintes, ce choix n'a pas d'incidence sur les zones de raffinement obtenues, comme discuté dans la thèse de L. Barbié [Barbié, 2013] où il a été montré qu'un algorithme de type FMG (Full MultiGrid) local (cf. [Biotteau et al., 2010]) avec ajout progressif des niveaux après convergence des cycles précédents ne changeait pas les zones détectées.

Dans [BRL14], nous nous sommes intéressés à une détection qualitative des éléments à raffiner basée sur le maximum d'erreur. Ainsi les éléments L du maillage G_{l-1} respectant l'estimateur d'erreur suivant seront raffinés pour générer le sous-maillage de niveau plus fin G_l :

$$\xi_L > \alpha \max_{K \in G_{l-1}} \xi_K, \quad 0 \leq \alpha \leq 1 \quad (\text{III.1.10})$$

Ce type de méthode de détection des éléments à raffiner nécessite un critère d'arrêt *a priori*, typiquement un nombre d'étapes de raffinement (ou de niveau de raffinement dans notre cas) [Bank

et al., 1983 ; Coorevits *et al.*, 1995 ; Fournier *et al.*, 2013 ; ...]. Par ailleurs, nous avons montré dans [BRL14], que la valeur optimale du paramètre α dépendait de l'erreur souhaitée et du problème traité. Aucune corrélation simple ne semble exister entre la valeur du paramètre α et l'erreur voulue.

Nous avons alors voulu nous appuyer sur une détection quantitative des éléments à raffiner afin de pouvoir relier les maillages à générer avec l'erreur souhaitée par l'utilisateur. Au vu de l'estimateur de ZZ (cf. Eq (III.1.8)) portant sur la norme énergie, nous avons voulu relier cet estimateur avec l'erreur en contraintes souhaitée. Par ailleurs, la majorité des méthodes de raffinement adaptatif se focalise sur l'erreur globale finale obtenue, alors qu'en pratique c'est également l'erreur locale qu'on souhaite contrôler. Nous avons ainsi proposé dans [RLL19], un critère de détection relié à l'erreur locale relative en norme énergie :

$$\frac{\xi_K}{\left(\int_K \underline{\sigma}_h : \underline{\varepsilon}_h \, dK + \int_K (\underline{\sigma}_h^s - \underline{\sigma}_h) : (\underline{\varepsilon}_h^s - \underline{\varepsilon}_h) \, dK\right)^{\frac{1}{2}}} > \epsilon_\Omega \quad (\text{III.1.11})$$

avec ϵ_Ω l'erreur maximale relative en contraintes souhaitée par l'utilisateur.

Remarque. *Le terme de gauche de l'inégalité (III.1.11) est proche d'une norme relative. Le terme additionnel au dénominateur, similaire à celui introduit dans [Zienkiewicz et Zhu, 1987], permet de borner à 1 le rapport même en cas de faibles valeurs de contraintes.* \square

Nous avons par ailleurs démontré que si le seuil ϵ_Ω était respecté sur l'erreur locale alors il l'était automatiquement sur l'erreur globale. Ceci permet de s'appuyer sur le critère de détection (III.1.11) également pour arrêter la génération automatique des sous-niveaux.

Cependant en pratique, en cas de singularité locale ou de concentration de contraintes, il se peut que le processus de raffinement soit infini car il y aura toujours des éléments dont l'erreur estimée est supérieure au seuil fixé. Nous avons ainsi introduit dans [RLL19] un nouveau critère d'arrêt géométrique du processus de raffinement. Il consiste à stopper la génération des sous-niveaux lorsque la taille de la zone détectée est inférieure à un pourcentage δ du domaine initial :

$$\text{mes}(\Omega_l) \leq \delta \text{mes}(\Omega) \quad (\text{III.1.12})$$

Ce critère est indépendant de l'erreur souhaitée et permet de déterminer la région critique pour laquelle le raffinement de maillage local devient inefficace. Combiné à une détection quantitative de la zone à raffiner, ce critère d'arrêt permet de contrôler la zone où l'erreur locale n'est pas respectée. Ainsi, ce critère fournit une caractérisation automatique de la singularité par le maillage. Nous avons comparé ce critère d'arrêt à d'autres critères géométriques, notamment celui basé sur un nombre minimal d'éléments, et montré qu'il était le plus efficace (respect de l'erreur demandée avec moins d'éléments) et effectivement indépendant du problème traité.

Sur le même cas test 2D axisymétrique que précédemment, cf. section III.1.3.a, nous obtenons pour un seuil $\epsilon_\Omega = 1\%$ et un critère d'arrêt de $\delta = 0,5\%$ de la mesure du domaine, les maillages présentés sur la figure III.1.5. L'erreur réelle globale finale obtenue est alors de 0.899%.

Pour une erreur donnée, la stratégie LDC/ZZ proposée permet d'obtenir des sous-maillages raffinés cohérents quel que soit le pas de maillage initial. C'est donc une approche qui semble robuste.

Notre stratégie de raffinement a également été appliquée avec succès pour atteindre une erreur absolue sur la contrainte de Von Mises en norme infinie. Ce type de seuil local, très peu étudié dans la littérature est pourtant d'un grand intérêt en ingénierie (plasticité, viscoplasticité, etc.)

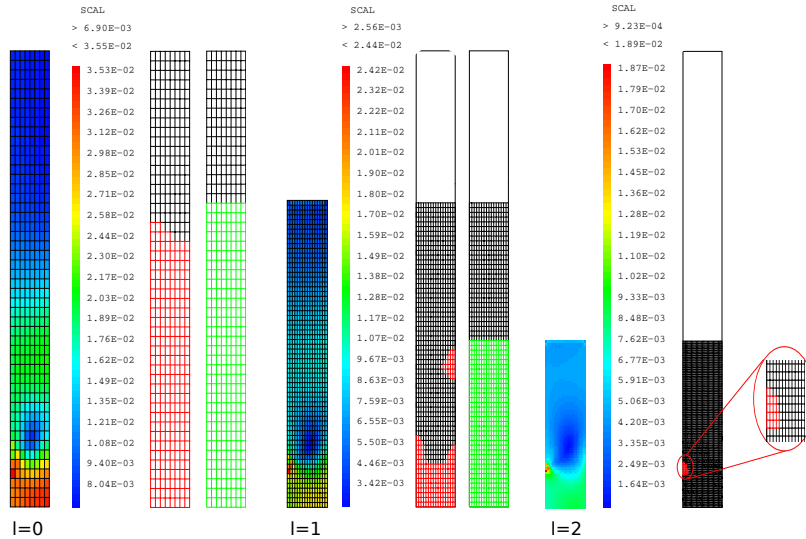


FIGURE III.1.5 – Combinaison LDC avec estimateur *a posteriori* ZZ - Exemple de maillages structurés générés automatiquement - Seuil d'erreur $\epsilon_\Omega = 1\%$ et critère d'arrêt de 0,5% de la mesure du domaine initial.

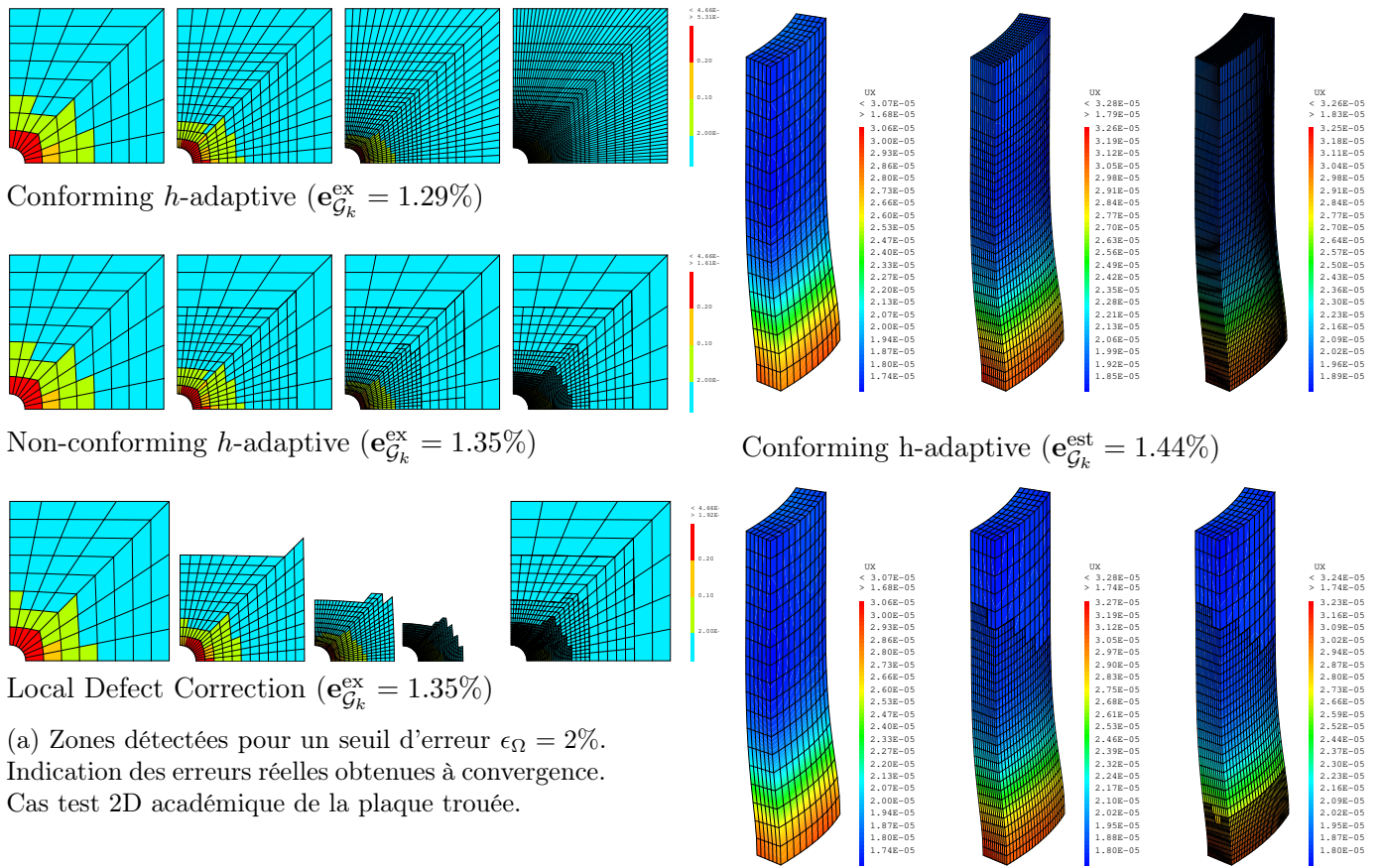
III.1.3.c Comparaison avec les méthodes h-adaptatives

Dans le cadre de la thèse de D. Koliesnikova [Koliesnikova, 2021], nous avons voulu positionner en terme d'efficacité la méthode LDC par rapport aux méthodes de raffinement de maillage h-adaptatives habituellement utilisées en mécanique des solides.

En effet, tout comme les méthodes h-adaptatives, la méthode LDC travaille sur le pas de maillage local, mais exploite une résolution multiniveau. Hormis l'analyse théorique de [Ferket et Reusken, 1996] déjà mentionnée en section III.1.2.c, il n'y a jamais eu de contribution dans la littérature sur les différences de performances entre les approches LDC et h-adaptatives. Nous avons donc effectué cette comparaison dans le cadre de l'élasticité linéaire dans [KRL21a] et pour des maillages à base d'éléments finis quadrangulaires (2D) ou hexaédriques (3D) de type \mathcal{Q}_1 (bi ou trilineaires), éléments très attractifs en terme de performance. Nous avons proposé un cadre algorithmique générique commun pour pouvoir comparer de façon honnête les différentes méthodes de raffinement de maillage : même estimateur d'erreur, même critère de détection, même solveur linéaire, même critère d'arrêt. Seules les spécificités de chaque méthode induisent donc des différences de performances (mesurées ici en temps CPU et espace de stockage). Ces spécificités sont liées au traitement des éléments raffinés : ajout de nœuds non conformes pour les méthodes h-adaptatives locales, propagation du raffinement pour les méthodes h-adaptatives globales, processus multi-niveau pour LDC, cf. figure III.1.1.

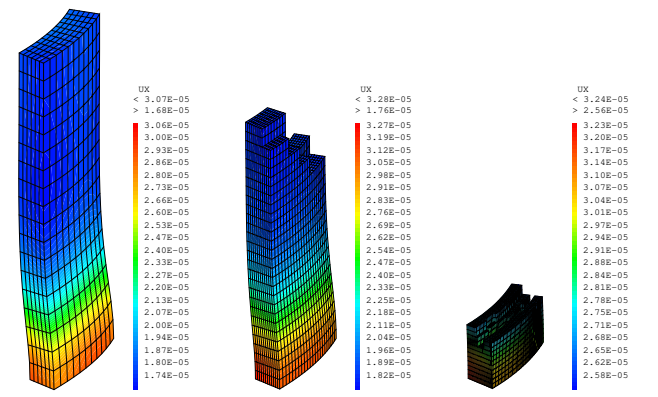
Il ressort de ce travail une très grande similitude des zones d'éléments à raffiner, ce qui est en cohérence avec le fondement des méthodes de raffinement de pas de maillage, cf. figures III.1.6a et III.1.6b. La méthode LDC se détache par des temps de calcul plus faibles liés à la taille limitée des systèmes à résoudre, cf. figure III.1.6c. L'accélération du temps de calcul peut atteindre en 3D un facteur 2 par rapport à la méthode h-adaptative locale qui est la plus utilisée dans la littérature, et un facteur dépassant 10 par rapport à la méthode h-adaptative globale (quand celle-ci parvient à aller jusqu'au bout du processus AMR). Concernant l'espace de stockage, comme attendu, les plus faibles valeurs sont obtenues pour la méthode h-adaptative locale, mais le surcoût introduit par LDC reste faible. Ainsi, la méthode LDC apparaît clairement comme la méthode la plus efficace pour atteindre une précision donnée. Elle permet de conserver un raffinement local tout en évitant les difficultés liées à la gestion des maillages non conformes.

Dans ce cadre, nous avons également comparé dans [KRL21a] différents critères de détection des zones à raffiner. Nous nous sommes focalisés sur des critères permettant de contrôler l'erreur locale (par élément). Il est apparu que la stratégie de détection et de contrôle de la zone de

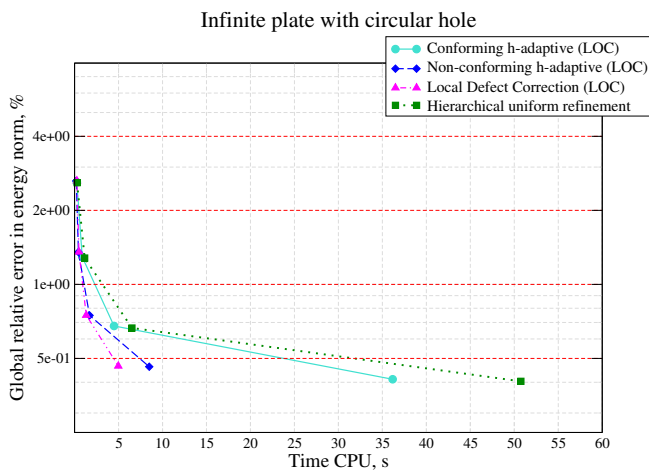


(a) Zones détectées pour un seuil d'erreur $\epsilon_\Omega = 2\%$. Indication des erreurs réelles obtenues à convergence. Cas test 2D académique de la plaque trouée.

Non-conforming h-adaptive ($e_{G_k}^{est} = 1.93\%$)



Local Defect Correction ($e_{G_k}^{est} = 1.95\%$)



(c) Temps de calculs pour différents seuils $\epsilon_\Omega = 4; 2; 1; 0.5\%$. Cas test 2D académique de la plaque trouée.

(b) Zones détectées et déplacements u_x obtenus pour un seuil d'erreur $\epsilon_\Omega = 4\%$. Indication des erreurs estimées obtenues à convergence. Cas test 3D industriel de l'interaction pastille-gaine.

FIGURE III.1.6 – Comparaison des résultats obtenus pour différentes stratégies AMR sur des cas tests 2D et 3D.

singularité que nous avons proposée dans [RLL19] (cf. section III.1.3.b) était la plus efficace. Nous nous sommes également intéressés aux différentes stratégies de ratio de maillage à imposer entre deux étapes (ou niveaux) de raffinement. Il apparaît pour toutes les méthodes AMR étudiées que la meilleure stratégie est celle consistant à imposer *a priori* un ratio de raffinement fixe de 2 à chaque étape du processus. Elle permet un raffinement progressif cohérent avec une estimation d'erreur de plus en plus précise. Cependant, il semble intéressant de travailler sur des stratégies efficaces de détermination d'un ratio ajusté de pas de maillage permettant de diminuer le nombre d'itérations de raffinement (ou sous-niveaux). Malheureusement, actuellement ce gain se fait au détriment du temps de calcul du fait du raffinement excessif de certaines zones.

III.1.3.d Contact unilatéral avec frottement en élastostaticité

Dans cadre de la thèse de H. Liu [Liu, 2016], nous avons proposé une extension de la méthode LDC à des problèmes élastostatiques de contact unilatéral avec frottement. En reprenant les notations introduites pour le contact unilatéral en section II.2.2.a, le problème fort de contact unilatéral frottant statique s'écrit pour une loi de Coulomb quasi-statique avec frottement sec [Coulomb, 1785 ; Raous *et al.*, 1988]

$$\left\{ \begin{array}{ll} -\operatorname{div} \underline{\underline{\sigma}} = \underline{f} & \text{dans } \Omega, \\ \underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{\varepsilon}} & \text{dans } \Omega, \\ \underline{\underline{\varepsilon}} = \frac{1}{2} (\operatorname{grad} \underline{u} + (\operatorname{grad} \underline{u})^T) & \text{dans } \Omega, \\ \underline{u} = \underline{u}_0 & \text{sur } \Gamma^D, \\ \underline{\underline{\sigma}} \underline{n} = \underline{g} & \text{sur } \Gamma^N, \\ \underline{\underline{\sigma}} \underline{n} = F_N \underline{n} + \underline{F}_T & \text{sur } \Gamma^C, \\ u_N \leq d, F_N \leq 0, (d - u_N) F_N = 0 & \text{sur } \Gamma^C, \\ |\underline{F}_T| \leq \mu |F_N| \text{ et } \begin{cases} |\underline{F}_T| < \mu |F_N| \Rightarrow \underline{u}_T = 0 \\ |\underline{F}_T| = \mu |F_N| \Rightarrow \exists q > 0, \underline{u}_T = -q \underline{F}_T \end{cases} & \text{sur } \Gamma^C \end{array} \right. \quad (\text{III.1.13})$$

avec μ le coefficient de frottement et $|\cdot|$ la norme euclidienne.

Il est à noter que cette formulation est également valide pour des chargements monotones.

En chaque point de la surface de contact potentiel Γ^C , il n'existe que deux statuts de frottement possibles (en cas de contact) :

- statut d'adhérence : $|\underline{F}_T| < \mu |F_N|$, le déplacement tangentiel est alors nul,
- statut de glissement : $|\underline{F}_T| = \mu |F_N|$, le déplacement tangentiel est alors non nul et colinéaire et de direction opposée à la force de contact tangentielle.

La formulation faible du problème (III.1.13) se présente sous forme d'inégalité quasi-variationnelle. L'existence et l'unicité du problème de contact frottant est encore un problème ouvert.

Formellement, le problème (III.1.13) peut s'écrire sous la forme suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Trouver } \underline{u} \in K_d \text{ tel que} \\ \mathcal{L}(\underline{u}) = \underline{\hat{f}} + \underline{F}(\underline{u}) \end{array} \right. \quad (\text{III.1.14})$$

avec $K_d = \{v \in (H^1(\Omega))^3, v_N \leq d \text{ sur } \Gamma^C\}$, \mathcal{L} l'opérateur différentiel obtenu en substituant la relation de comportement et le tenseur de déformations linéarisé dans les équations d'équilibre et les conditions aux limites, $\underline{\hat{f}}$ le second membre associé à l'équation d'équilibre et aux conditions aux limites sur Γ^D et Γ^N et $\underline{F}(\underline{u})$ le second membre de la condition aux limites sur Γ^C vérifiant

les conditions de contact frottant. Pour plus de détails sur cette formulation, le lecteur peut se référer par exemple à [Alart et Curnier, 1991].

On retrouve ainsi une formulation sur laquelle il semble possible d'appliquer la méthode LDC. La difficulté consiste alors à traiter proprement dans l'algorithme multiniveau itératif le terme $\underline{F}(\underline{u})$ de condition aux limites sur la surface de contact potentiel Γ^C obtenu au cours de la résolution du système.

L'extension de la méthode LDC aux problèmes de contact consiste en plusieurs points :

- redéfinition de la surface interne où appliquer l'opérateur de prolongement pour définir les conditions aux limites de Dirichlet sur les sous-niveaux.

En effet, le jeu et donc la condition de non-pénétration ne peuvent être évalués qu'entre des surfaces appairées. La surface de contact potentiel Γ_l^C au niveau l est donc définie par l'ensemble des points de $\Gamma^C \cap \Gamma_l$ qui peuvent être appairés.

Il faut donc étendre la définition de la frontière fictive, initialement définie par $\Gamma_l \setminus \partial\Omega$ (cf. Algorithme III.1.2), à $\Gamma_{f,l}^C = (\Gamma^C \cap \Gamma_l) \setminus \Gamma_l^C$. Dans la suite, nous appellerons $\Gamma_{f,l}$ cette frontière fictive où des conditions aux limites sont à imposer : $\Gamma_{f,l} = (\Gamma_l \setminus \partial\Omega) \cup \Gamma_{f,l}^C$.

Remarque. *On retrouve ici les mêmes ingrédients que ceux introduits en réduction d'ordre de modèle pour définir la surface de contact potentielle sur le domaine d'intégration réduit, cf. section II.2.2.b. Comme suggéré dans la méthode d'hyper-réduction hybride, nous pouvons également étendre le sous-niveau Ω_l de sorte à n'avoir que des nœuds appairés sur $\Gamma^C \cap \Gamma_l$ et ainsi ne pas avoir à introduire la frontière fictive $\Gamma_{f,l}^C$. La définition introduite ci-dessus se veut plus générale et évite de devoir trop élargir les niveaux de raffinement.* \square

- redéfinition des ensembles de nœuds A_l et \mathring{A}_l intervenant dans l'étape de restriction.

En effet, les conditions aux limites sur la surface de contact potentielle doivent pouvoir être corrigées au niveau du dessus car elles font parties des inconnues du problème. Ainsi, A_l est à présent défini comme l'ensemble de nœuds de $(G_l \setminus \Gamma_{f,l})$ inclus dans le domaine défini par $(G_{l+1} \setminus \Gamma_{f,l+1})$ et \mathring{A}_l comme l'ensemble des nœuds intérieurs à A_l au sens du schéma de discrétisation. Ainsi, on voit que les ensembles A_l et \mathring{A}_l proposés ici permettent de corriger les nœuds de $\Gamma_l \cap \partial\Omega$ où une condition aux limites du problème originel est imposée. Cette modification est essentielle pour les problèmes de contact mais permet également d'améliorer la solution sur les frontières avec conditions de Neumann non homogènes.

- redéfinition du résidu local sur \mathring{A}_l .

Pour tenir compte du problème de contact générique, cf. Eq (III.1.14), il faut considérer que le second membre f_l introduit dans le problème (III.1.2) peut varier au cours des itérations :

$$\underline{f}_l^i = \hat{\underline{f}}_l + \underline{F}_l(\underline{u}_l^i) \quad (\text{III.1.15})$$

où $\hat{\underline{f}}_l$ joue le rôle du second membre habituel dans l'algorithme LDC standard.

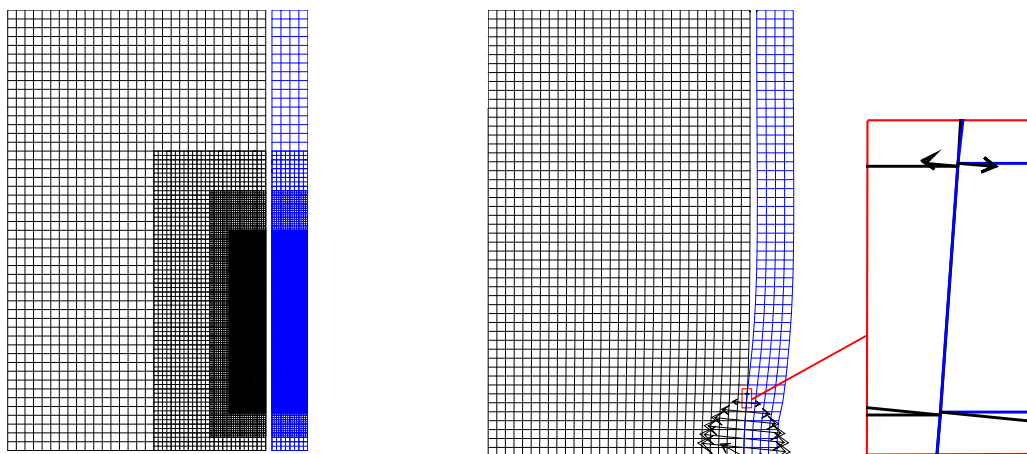
Le résidu défini sur \mathring{A}_l à l'étape de restriction s'écrit alors :

$$\begin{aligned} \underline{d}_l^i(x) &= \left(\mathcal{L}_l(\tilde{\underline{u}}_l^i) - \hat{\underline{f}}_l - (\underline{F}(\underline{u}))_l^i \right) (x) \quad \forall x \in \mathring{A}_l \\ \underline{r}_l^i(x) &= \chi_{\mathring{A}_l} \underline{d}_l^i(x) \end{aligned} \quad (\text{III.1.16})$$

où $(\underline{F}(\underline{u}))_l^i$ désigne les forces de contact effectives sur G_l , obtenues à l'étape de prolongement. Nous avons choisi d'évaluer ces forces de contact dans le résidu comme un terme source connu au niveau l , à la fois pour se rapprocher de la partie standard du second membre (cf. $\hat{\underline{f}}_l$) mais surtout pour être indépendant de l'algorithme de résolution du problème de contact choisi. Ainsi seul le déplacement continue à être restreint dans l'algorithme LDC (cf. $\tilde{\underline{u}}_l^i$), même si une formulation mixte est utilisée lors de la résolution. Dans ce dernier cas, on évite la restriction des multiplicateurs de Lagrange où une conservation des forces devrait être assurée.

Il est important de souligner que contrairement aux méthodes multigrilles standard appliquées à des problèmes de contact [Lebon, 1995], l'algorithme proposé échange uniquement des déplacements entre les niveaux, ce qui est très confortable au niveau implémentation et semble plus robuste.

Plusieurs exemples de raffinement adaptatif de maillage sur des problèmes de contact avec ou sans frottement, via l'algorithme LDC étendu, ont été proposés dans [Liu, 2016 ; LRL17]. Nous présentons ici quelques résultats saillants. La résolution a été effectuée via le solveur éléments finis Cast3m [Cast3M] à l'aide d'une méthode des statuts [Abide *et al.*, 2016], basée sur une formulation mixte du problème de contact avec frottement. Les résultats présentés ci-après sont tous obtenus via une combinaison de LDC avec l'estimateur a posteriori ZZ, telle que définie en section III.1.3.b. Sur la figure III.1.7a, on peut constater que la stratégie proposée génère les sous-niveaux de plus en plus localisés autour de la zone de changement de statut de contact. En effet, on peut voir sur la figure III.1.7b que les trois statuts de contact sont bien présents (décollement, adhérence, glissement). Ici les sous-niveaux ont été élargis pour avoir $\Gamma_{f,l}^C = \emptyset$. L'erreur finale composite obtenue après raffinement LDC est dans ce cas de 3,49% donc bien inférieure au seuil $\varepsilon_\Omega = 5\%$ demandé.



(a) Exemple de superposition de sous-niveaux pour $\varepsilon_\Omega = 5\%$

(b) Forces de contact avec zoom local et amplification du jeu d'un facteur 50.

FIGURE III.1.7 – Méthode LDC appliquée à un problème 2D(r,z) de contact frottant - Coefficient de frottement $\mu = 0.2$ - Maillage initial de pas $h_0 = 200 \mu m$ et jeu initial $d = 2 \mu m$

Les principales conclusions générales obtenues dans [LRL17], pour différents cas tests, différents maillages initiaux et différents seuils d'erreur ε_Ω sont les suivantes :

- le processus LDC réduit considérablement les erreurs initiales par ajout de sous-niveaux locaux,
- la génération des sous-niveaux s'arrête automatiquement et conduit à toujours respecter les tolérances prescrites,
- pour un seuil ε_Ω donné, des maillages locaux similaires sont obtenus pour des pas de maillages fins équivalents,
- il semble y avoir un maillage initial optimal en terme de temps CPU qui dépend de la localisation des sous-niveaux et de la vitesse de convergence des \wedge -cycles.

Nous nous sommes également intéressés au cas du contact entre frontières courbes dans le cas d'un problème de contact dû à une dilatation thermique différentielle. Dans ce cas, afin que le contact soit bien pris en compte dans les sous-niveaux $l > 1$, il faut considérer un raffinement quasi-hiérarchique afin de déplacer les nœuds additionnels sur la frontière de contact courbe Γ^C , cf. figure III.1.8. Ce dernier permet une meilleure représentation géométrique des frontières courbes au cours du processus de raffinement.

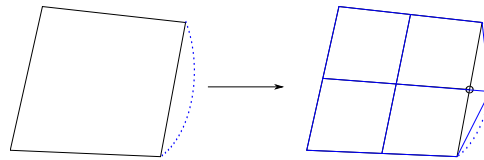
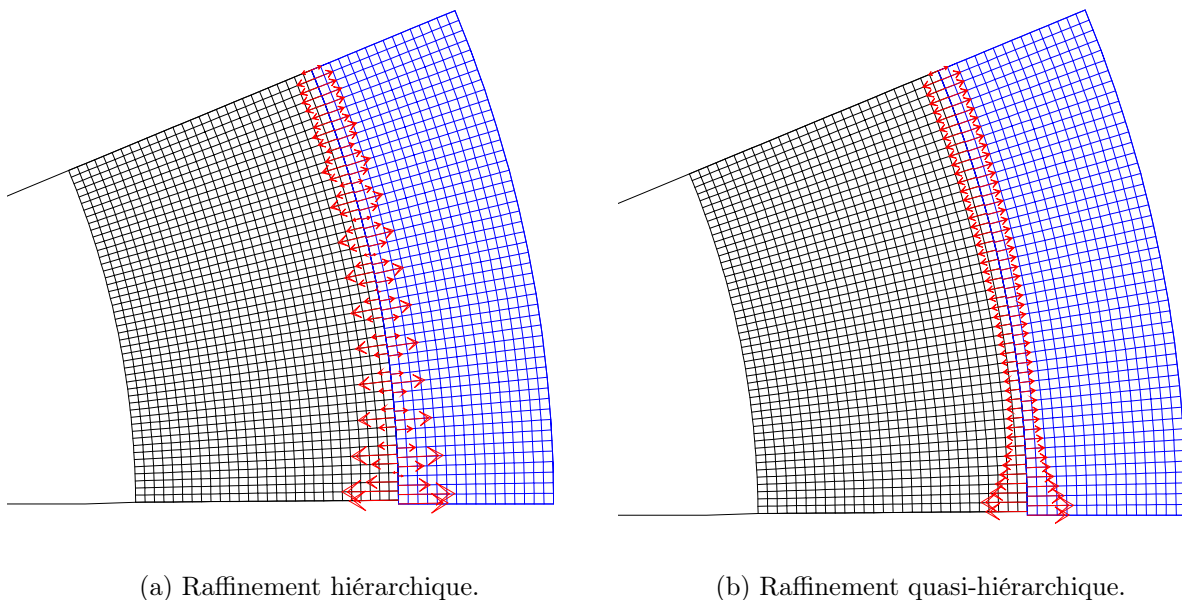


FIGURE III.1.8 – Exemple de raffinement quasi-hérarchique sur des frontières courbes

La raffinement quasi-hérarchique n'est appliqué que sur les frontières de contact potentiel car il a été vu dans [BRL14] que sur les frontières avec conditions aux limites naturelles (Γ^D et Γ^N), un raffinement hiérarchique n'induisait pas d'erreur du premier ordre.

Cette légère modification du processus de raffinement est ainsi quasiment transparente vis-à-vis de l'algorithme LDC. En effet, elle intervient uniquement au moment de la génération des sous-niveaux. L'opérateur de prolongement n'est pas impacté étant donné qu'il ne s'applique pas sur la frontière de contact potentiel et l'opérateur de restriction canonique n'est pas non plus modifié car les nœuds déplacés sont par construction des nœuds fins additionnels.

L'utilité de ce raffinement quasi-hérarchique sur les forces de contact obtenues est illustré sur la figure III.1.9.



(a) Raffinement hiérarchique.

(b) Raffinement quasi-hérarchique.

FIGURE III.1.9 – Méthode LDC appliquée à un problème 2D(r,θ) de contact sans frottement - Maillage initial de pas $h_0 = 200 \mu\text{m}$ et jeu initial $d = 2\mu\text{m}$ - Seuil d'erreur prescrit $\varepsilon_\Omega = 1\%$ - Forces de contact obtenues sur le deuxième sous-niveau ($l = 2$).

Comme mentionné dans [Wriggers et Scherf, 1998], on retrouve dans le cas d'un raffinement hiérarchique des discontinuités de forces de contact (cf. Fig III.1.9a) qui sont uniquement le résultat de l'ajout de nœuds sur les polygones discrétisant les 2 arcs de la frontière de contact. Ce problème de discontinuité n'est donc pas lié à la méthode LDC mais est un problème générique lié à la discrétisation du domaine de calcul raffiné.

L'application d'un raffinement quasi-hérarchique fait disparaître ces discontinuités et un résultat cohérent est retrouvé, cf. Fig III.1.9b. Les erreurs obtenues respectent alors les seuils de tolérance demandés (par exemple 0,62% pour le cas illustré précédemment).

Nous avons ainsi introduit au cours des sections III.1.3.a à III.1.3.d un outil de raffinement multiniveau adaptatif de maillage, efficace pour des problèmes élastostatiques avec ou sans contact frottant. Nous nous intéressons à présent à son extension à des comportements matériaux non linéaires afin de pouvoir être utilisé dans des solveurs mécaniques à vocation industrielle.

III.1.3.e Comportements matériaux non linéaires

Nous nous sommes intéressés dans la thèse de L. Barbié [Barbié, 2013] à l'extension de la méthode LDC à la mécanique non linéaire des solides (sans contact). Une non-linéarité de comportement se traduit au niveau du problème fort par une relation non linéaire entre le tenseur des contraintes et celui des déformations. Pour des raisons de simplicité de formulation et sans perte de généralité, nous écrirons formellement la relation de comportement

$$\underline{\underline{\sigma}} = \mathcal{F}(\underline{\underline{\varepsilon}}) \quad (\text{III.1.17})$$

avec \mathcal{F} un opérateur non linéaire.

À notre connaissance la méthode LDC n'avait encore jamais été appliquée à la mécanique non linéaire des solides. De façon plus générale, très peu d'auteurs [Biotteau *et al.*, 2010 ; Biotteau *et al.*, 2012] se sont intéressés à l'utilisation de méthodes multigrilles locales dans ce cadre.

Par contre les méthodes multigrilles locales, et plus particulièrement la méthode LDC, ont déjà été appliquées de façon assez naturelle à des équations aux dérivées partielles spatio-temporelles [Berger et Olinger, 1984 ; Berger et Colella, 1989 ; Belliard et Grandotto, 2003 ; Minero *et al.*, 2006 ; ...]. En effet, dans ce cas la discrétisation de la dérivée temporelle conduit à résoudre un problème en espace. En mécanique des solides, la non-linéarité temporelle doit être résolue localement, ce qui nécessite une modification différente de l'algorithme LDC.

Les problèmes non linéaires étant traditionnellement résolus à l'aide d'un processus itératif (de type Newton, pour ne citer que lui), se pose alors la question de l'imbrication de l'algorithme LDC itératif dans le processus de résolution itératif du problème non linéaire. Si la question a du sens dans le cas d'un solveur multigrille standard [Henson, 2003], en mécanique non linéaire des solides il apparaît évidemment de devoir résoudre le problème non linéaire à chaque niveau de raffinement afin de disposer du calcul local précis du comportement du matériau. Par ailleurs, d'après [Henson, 2003], nous bénéficierons de meilleures performances.

Dans le cadre du processus LDC appliqué à la mécanique non linéaire quasi-statique, le résidu intervenant à l'étape de restriction peut s'écrire :

$$\underline{\underline{d}}_l^i(x) = (\underline{\underline{F}}_{int}(\underline{\underline{\sigma}}_l^i) - \underline{\underline{F}}_{ext})(x) \quad \forall x \in \mathring{A}_l \quad (\text{III.1.18})$$

où $\underline{\underline{F}}_{int}$ et $\underline{\underline{F}}_{ext}$ correspondent respectivement aux forces internes et externes associées à la discrétisation du problème quasi-statique non linéaire.

Remarque. *Au regard du problème (III.1.2), les forces internes correspondent aux termes volumiques de la formulation variationnelle liés à l'inconnue du problème (provenant de l'intégration de l'opérateur différentiel) tandis que les forces externes correspondent à l'intégration du terme source et aux termes de bord.* \square

La difficulté réside alors dans l'obtention du tenseur des contraintes « restreint » $\underline{\underline{\sigma}}_l^i$. Deux possibilités s'offrent à nous :

- soit ce tenseur est calculé en appliquant la loi de comportement matérielle non linéaire au champ de déplacement restreint $\underline{\underline{u}}_l^i$:

$$\underline{\underline{\sigma}}_l^i = \mathcal{F}(\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{u}}_l^i)) \quad (\text{III.1.19})$$

- soit les contraintes calculées sur le niveau fin sont restreintes sur le maillage grossier :

$$\underline{\underline{\sigma}}_l^i = \hat{R}_{l+1}^l(\underline{\underline{\sigma}}_{l+1}^i) \quad (\text{III.1.20})$$

avec \hat{R}_{l+1}^l un opérateur de restriction de la variable duale.

La deuxième stratégie complexifie la procédure de projection car elle travaille sur la variable duale évaluée aux points d'intégration (points de Gauss). Afin d'être le plus générique possible et de continuer à travailler sur la variable primale, nous avons choisi la première stratégie. L'algorithme proposé dans [BRL15] est alors très proche de l'algorithme LDC standard : aucune variable duale ni variable interne ne doit être projetée, ce qui rend cet algorithme très facile de mise en œuvre.

Remarque. Si dans les codes (industriels) existants, il n'est souvent pas possible d'avoir accès facilement à l'intégration de la loi de comportement pour obtenir le tenseur des contraintes de l'équation (III.1.19), nous avons proposé dans [BRL15] une implémentation non intrusive de l'algorithme LDC dans un solveur non linéaire existant. Cette implémentation consiste à appliquer le déplacement restreint $\underline{\tilde{u}}_1^i$ (et un déplacement nul en dehors de la zone de raffinement) comme des conditions de Dirichlet du problème non linéaire sur le niveau grossier. La résolution de ce problème contraint en déplacement se résume alors à l'intégration de la loi de comportement. Les efforts internes obtenus sur la partie raffinée correspondent alors directement aux forces internes $F_{int}(\underline{\tilde{\sigma}}_1^i)$ recherchées. \square

A titre illustratif, nous reprenons ici l'exemple étudié dans [BRL15] sur un cas test 2D(r, θ). Il s'agit de traiter un comportement de type fluage de Norton sur un historique de chargement (linéaire) donné. La relation de comportement s'écrit alors $\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{C}} : (\underline{\underline{\varepsilon}} - \underline{\underline{\varepsilon}}^{vp})$, où la déformation non linéaire $\underline{\underline{\varepsilon}}^{vp}$ est reliée à la contrainte par l'intermédiaire de sa vitesse, définie par $\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}^{vp} = \left(\frac{J}{K}\right)^{n-1} \underline{\underline{\sigma}}_d$, avec $\underline{\underline{\sigma}}_d$ le tenseur déviatorique des contraintes, J son second invariant (contrainte équivalente de Von Mises), K et n deux coefficients donnés. Les valeurs $n = 5$ et $K = 2,6 \cdot 10^{11} \text{Pa}^{5/4} \text{s}^{1/4}$ ont été choisies afin d'avoir un comportement non linéaire proche de celui de la loi de comportement de la gaine utilisée au CEA [Michel *et al.*, 2008]. Le but de cet exemple est de vérifier que la solution LDC obtenue reste précise au cours du processus de résolution incrémental en temps quand la loi de comportement dépend de l'historique. La figure III.1.10 illustre la convergence en maillage obtenue après plus d'une centaine de pas de temps de chargement.

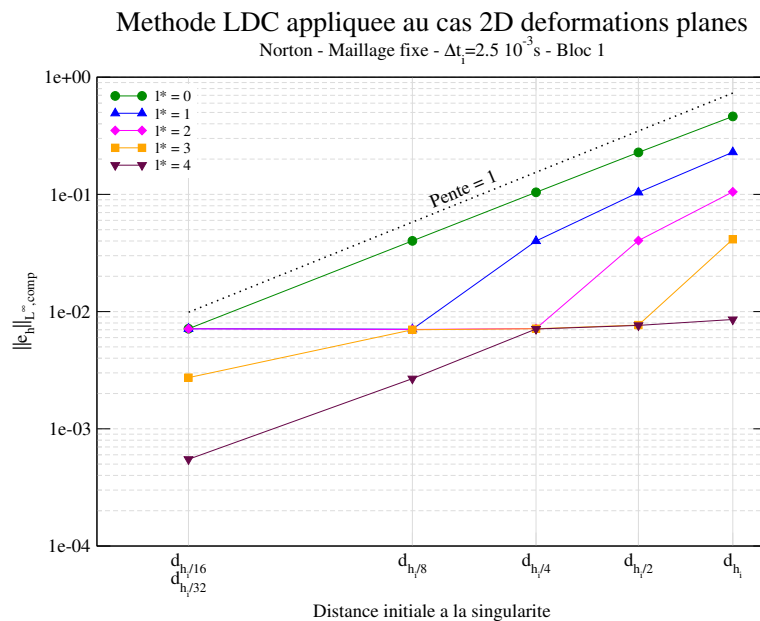


FIGURE III.1.10 – Méthode LDC appliquée à un comportement non linéaire de type fluage de Norton - Cas test 2D(r, θ) - Convergence en maillage en fonction de la distance initiale à la singularité - Maillage fixé *a priori*

La convergence optimale en $O(d_{h_{fin}})$ est retrouvée, ce qui confirme que l'extension de l'algorithme proposée est efficace et que l'erreur commise par la méthode LDC ne semble pas se cumuler au fil du temps pour ce type de comportement non linéaire.

Nous avons également comparé sur la figure III.1.11 la déformation équivalente anélastique entre une stratégie de raffinement h-adaptative globale et la méthode LDC. Pour ce cas test, la partie anélastique représente environ 60% de la déformation totale. Les distributions sont très similaires avec une erreur relative de moins de 0.5% pour environ trois fois moins de nœuds totaux avec la stratégie multiniveau LDC.

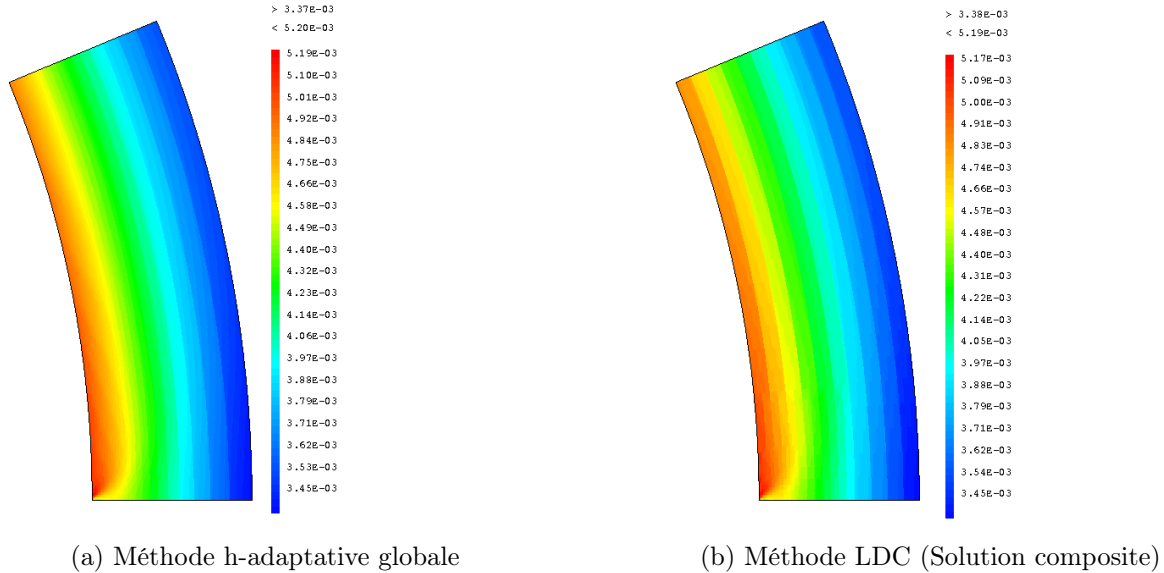


FIGURE III.1.11 – Comparaison de méthodes AMR pour un comportement non linéaire de type fluage de Norton - Cas test $2D(r,\theta)$ - Déformation anélastique équivalente.

Cependant les temps de calculs de la méthode LDC restent encore à optimiser car ils ne sont pas à la hauteur du gain en nombre de degrés de liberté. Ceci est dû au nombre important d'intégrations de la loi de comportement non linéaire à effectuer au cours des Δ -cycles. Ce coût pourrait être grandement réduit s'il était possible de fournir une estimation de la contrainte (obtenue aux itérations précédentes) au solveur d'intégration. Ce point est encore à travailler.

III.1.3.f Vers de l'adaptation dynamique de maillage

Dans la section précédente, nous nous sommes intéressés à l'extension de l'algorithme LDC pour des comportements non linéaires dépendant du temps. Cependant, sur les exemples étudiés le maillage raffiné a été fixé à partir d'une estimation de l'erreur au premier pas de temps.

La gestion de l'adaptation dynamique de maillage doit à présent être traitée. En effet, un des intérêts du raffinement adaptatif pour les problèmes non linéaires à singularités locales tient dans le fait de pouvoir remailler automatiquement la structure en cours de calcul en fonction de l'évolution du problème traité.

La méthode LDC offre par construction la possibilité au cours du temps de déraffiner sans difficulté jusqu'au maillage initial grossier puisque celui-ci sous-tend tous les calculs multiniveaux. Lors de l'adaptation dynamique de maillage, un certain nombre d'opérations de projection entre maillages sont nécessaires. En ce qui concerne la projection entre les niveaux de maillage de LDC pour définir les conditions initiales du nouveau pas de temps, nous avons suivi de suivre la stratégie introduite dans [Biotteau *et al.*, 2012] et illustrée pour un maillage 1D sur la figure III.1.12. Pour un pas de temps et un niveau de raffinement donnés, les informations de fin de pas de temps précédent provenant du même niveau de raffinement sont utilisées si elles sont disponibles, sinon les informations du niveau grossier le plus raffiné disponible sont utilisées. Les niveaux plus fins que le niveau considéré ne sont pas utilisés.

Une fois la stratégie de projection multiniveau établie, la question de la projection des champs

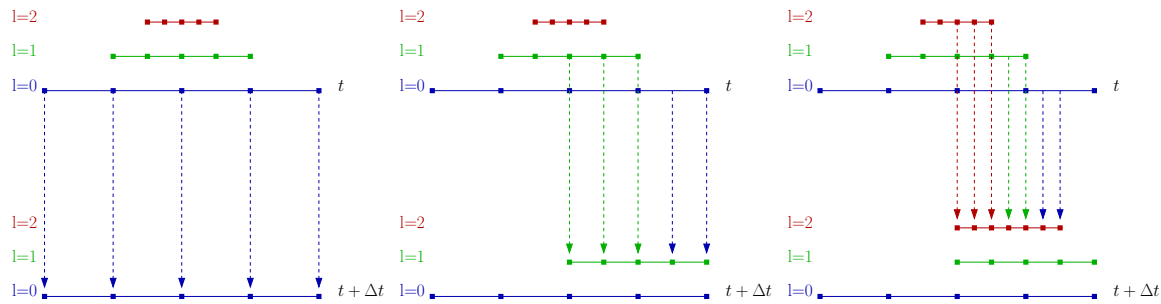


FIGURE III.1.12 – Adaptation dynamique de maillage pour la méthode LDC - Illustration de la transmission des informations entre niveaux entre deux pas de temps

revient à une problématique générale aux méthodes AMR et donc les stratégies choisies ne sont pas spécifiques à la méthode LDC. Dans la thèse de L. Barbié [Barbié, 2013], nous avons utilisé une projection basée sur les fonctions de forme pour les déplacements et une stratégie non diffusive pour les variables définies aux points d'intégration, à savoir l'application directe de la valeur du point de Gauss le plus proche du maillage (ou niveau) projeté. L'optimisation du nombre de projections a également été regardée, à savoir la projection de tous les champs ou uniquement de ceux nécessaires avec une reconstruction des autres. Comme attendu, la deuxième stratégie est un peu moins précise mais évite un rééquilibrage de la solution au début du pas de temps.

Les premiers résultats obtenus sont prometteurs, comme en témoigne la courbe sur la figure III.1.13, où sont comparées les contraintes équivalentes de Von Mises maximales obtenues au cours du temps avec un raffinement uniforme et un raffinement multiniveau adaptatif dynamique de même pas local fin de maillage. Il s'agit d'un cas de fluage de Norton où la position de la discontinuité de pression (représentant l'ouverture du fragment de combustible) évolue avec le temps. Les zones à raffiner sont détectées avec l'estimateur ZZ tel qu'introduit en section III.1.3.b avec un critère basé sur le maximum d'erreur (cf. Eq. (III.1.10)). Pour ce cas test, le nombre de sous-niveaux a été fixé à 2. Le maillage initial assez grossier entraîne une adaptation dynamique du maillage (effectuée tous les 10 pas de temps) très localisée. L'écart maximal en fin de calcul entre les 2 stratégies de raffinement est de l'ordre de 3% pour un maillage 12 fois plus léger en nombre de nœuds pour la méthode LDC.

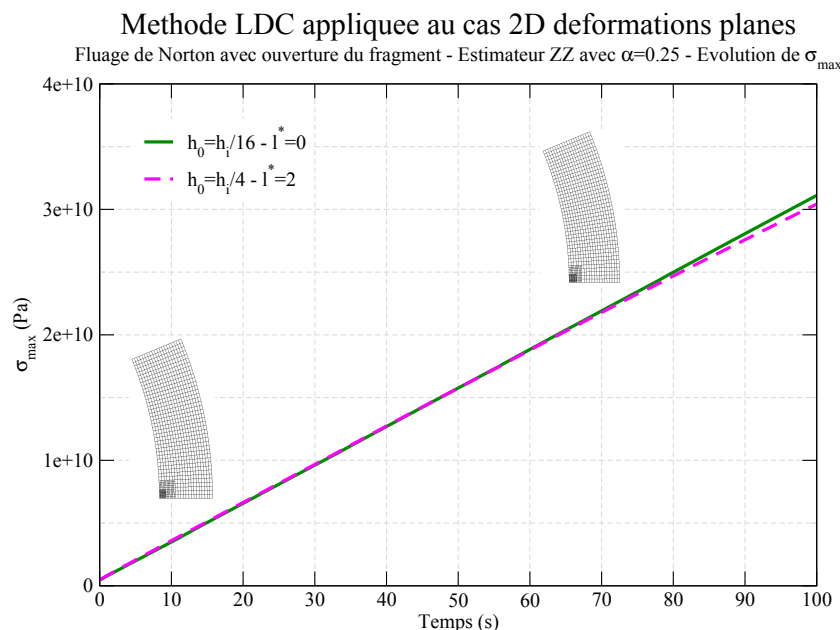


FIGURE III.1.13 – Adaptation dynamique de maillage avec la méthode LDC - Évolution de la contrainte de Von Mises maximale au cours du temps - Cas 2D(r, θ) - Fluage de Norton.

Ces stratégies de projection et de remaillage restent encore à optimiser notamment vis-à-vis des temps de calcul et de la propagation de l'erreur. Il faudra ensuite les tester sur des évolutions plus marquées de la zone de singularité. C'est l'objet de la dernière partie de la thèse de D. Koliesnikova [Koliesnikova, 2021].

III.1.4 Directions de recherche

Nous avons introduit une méthode de raffinement adaptatif multiniveau performante pour la mécanique des solides quasi-statique (impliquant la résolution d'un système linéaire). Nous avons étendu la méthode Local Defect Correction (LDC) tout d'abord à l'élasticité linéaire, en proposant au passage un algorithme LDC multiniveau générique et précis, au cas du contact avec et sans frottement, puis à des comportements matériaux non linéaires. Nous avons également proposé une combinaison de cette approche avec un estimateur *a posteriori* d'erreur pour rendre la génération du maillage automatique et nous nous sommes intéressés à l'adaptation dynamique du maillage au cours du temps.

Les résultats obtenus montrent la précision de la stratégie proposée et la validité des algorithmes introduits. A précision équivalente, l'intérêt de la méthode LDC en terme de nombre de degrés de liberté des systèmes à résoudre vis-à-vis des méthodes h-adaptatives classiques est indiscutable. Le gain en temps de calcul de la méthode LDC apparaît aussi clairement en élasticité mais doit être amélioré en non linéaire du fait notamment du nombre important d'intégrations de la loi de comportement à effectuer au cours des itérations LDC en plus de celles de Newton. Sur ce point, des pistes autour d'une estimation initiale de la contrainte sont notamment à étudier. Le nombre d'itérations (\wedge -cycles) de la méthode LDC reste très raisonnable dans nos applications (typiquement 3 à 4). Cependant il pourrait être intéressant de se rapprocher de conditions aux interfaces de type Robin, montrées optimales en terme de convergence pour des méthodes de décomposition de domaine et déjà appliquées avec succès dans les approches globales/locales [Gendre *et al.*, 2011]. Ces conditions ne sont pas souvent disponibles dans les codes existants de mécanique des solides, mais une analogie avec des conditions de type ressort peut être faite.

Concernant les comportements non linéaires, les résultats atteints pour un fluage de type Norton sont très satisfaisants mais il faudrait confirmer ces performances sur des comportements non linéaires avec plus de variables internes afin de confirmer la validité de l'extension LDC proposée qui ne s'appuie pas sur la restriction inter-niveaux des variables internes.

La question de la qualité de la solution LDC au cours du temps lors de l'adaptation dynamique de maillage est également encore à consolider. Nous en venons naturellement à la question du contrôle de l'erreur au cours de l'historique. En effet, il est illusoire de garantir la non-accumulation de l'erreur sur l'ensemble des pas de temps. Dans le cas qui nous intéresse, à l'erreur de discrétisation s'ajoutent l'erreur numérique due à la résolution itérative du problème non linéaire et l'erreur liée au transfert des champs. Ces problématiques sont des domaines de recherche actifs pour les méthodes AMR. Par ailleurs, il est rare que l'erreur réelle commise sur l'ensemble de l'historique soit vérifiée.

Les derniers travaux de thèse de D. Koliesnikova [Koliesnikova, 2021] laissent à penser que l'utilisation de l'estimateur d'erreur ZZ sur la solution globale permet de mieux estimer l'erreur que des versions incrémentales de ce dernier. Le transfert des champs définis aux points d'intégration a été amélioré en proposant une stratégie robuste consistant à passer localement par les nœuds des éléments. Par ailleurs, une piste prometteuse concernant le contrôle de l'erreur due aux projections entre maillages a été proposée. Elle est basée sur la prise en compte d'un résidu de déséquilibre à la première itération de résolution de l'algorithme de type Newton. Cette stratégie peut être vue comme un pseudo-pas de temps de rééquilibrage. Ainsi le nombre de remaillages reste limité et permet de diminuer l'erreur de discrétisation [KRL21b]. Combiner cette approche avec un critère d'arrêt automatique sur l'erreur algébrique [Di Pietro *et al.*, 2014 ; Daniel *et al.*, 2018 ; ...] permettrait de gagner encore en efficacité en évitant les sur-résolutions dans l'algo-

rithme de Newton.

La question du raffinement adaptatif en temps (cf. méthode pararéelle [Maday et Mula, 2020], ...) se pose également et sa combinaison optimale avec le raffinement en espace reste encore à étudier. Nous avons essayé dans la thèse de L. Barbié [Barbié, 2013] de proposer un raffinement en temps calqué sur le raffinement d'espace, comme introduit en mécanique des fluides dans [Berger et Olinger, 1984 ; Berger et Colella, 1989], consistant à adapter uniquement localement le pas de temps en fonction du pas d'espace et ainsi alléger les temps de calcul. Les résultats obtenus restent encore à consolider au niveau précision des solutions obtenues.

Par ailleurs, il serait intéressant de mettre en musique tous les ingrédients développés autour de la méthode LDC sur un cas test complet, à savoir le raffinement adaptatif dynamique au cours du temps de matériaux non linéaires pouvant entrer en contact frottant. Le cas industriel de l'interaction mécanique pastille-gaine semble le cas d'application parfait. Les premiers éléments de validation apportés au travers des différentes étapes laissent clairement entrevoir la possibilité d'utiliser des maillages locaux beaucoup plus fins que dans le cas d'un unique maillage global raffiné localement. Nous espérons ainsi pouvoir simuler précisément mais également valider ou mieux comprendre certains phénomènes jusqu'ici non atteignables par la simulation.

Un dernier point concerne le passage au calcul haute performance pour la méthode multiniveau LDC. En effet, cette étape est nécessaire si on envisage de réaliser des simulations 3D de phénomènes complexes localisés.

Les algorithmes multiniveaux ont été écrits de façon séquentielle entre les niveaux de raffinement, de façon similaire à une résolution de type Gauss-Seidel. Ces algorithmes peuvent être facilement modifiés pour exploiter une parallélisation utilisant une résolution de type Jacobi. Cependant, la vitesse de convergence en itération est alors inévitablement plus lente [Lemke et Quinlan, 1992], mais pour un temps de calcul qu'on espère attractif. L'idée est donc de travailler sur une parallélisation de l'algorithme LDC, en particulier sur la répartition de charge dans le cas de l'adaptation dynamique de maillage et du contact. Ces problématiques ne sont actuellement pas triviales en HPC. Ce sujet fait l'objet d'une thèse qui devrait débiter en 2021.

III.2 Homogénéisation numérique de type éléments finis au carré hybride en mécanique non linéaire

III.2.1 Introduction

La simulation numérique du comportement mécanique d'un matériau à microstructure hétérogène est basée sur des méthodes dites « d'homogénéisation ». Ces méthodes consistent à identifier le comportement effectif macroscopique tenant compte de l'hétérogénéité de la microstructure, cf. figure III.2.1a. L'échelle microscopique est alors décrite par un Volume Élémentaire Représentatif (VER). Le VER doit être grand devant la taille des hétérogénéités pour être représentatif de la microstructure mais petit devant l'échelle de la structure afin de pouvoir appliquer le principe fondamental de séparation d'échelles à la base des méthodes d'homogénéisation [Hill, 1963 ; E, 2011]. En effet, le comportement effectif est alors déterminé à partir de moyennes volumiques du comportement local sur le VER.

Parmi la grande famille des méthodes d'homogénéisation en micromécanique, nous pouvons distinguer les méthodes analytiques [Eshelby, 1959 ; Hashin et Shtrikman, 1963 ; Mori et Tanaka, 1973 ; Bensoussan *et al.*, 1979 ; Sanchez-Palencia, 1980 ; Allaire, 1992 ; ...] des méthodes d'homogénéisation numérique [Guedes et Kikuchi, 1990 ; Feyel, 1999 ; Miehe *et al.*, 1999 ; E et Engquist, 2003 ; Efendiev et Hou, 2009 ; ...]. Les approches analytiques consistent à rechercher un milieu homogénéisé équivalent avec éventuellement des correcteurs permettant d'avoir des détails sur les fluctuations microscopiques. Ces approches ont l'avantage de représenter à l'échelle macroscopique l'effet de paramètres microstructuraux sans avoir à mailler la microstructure, ce qui représente un gain important en temps de calcul.

Une des grandes problématiques de l'homogénéisation mathématique [Bensoussan *et al.*, 1979 ; Allaire, 1992 ; ...] est de construire et justifier rigoureusement les méthodes d'homogénéisation, mais également d'estimer finement leur taux de convergence. D'un point de vue pratique, ces approches théoriques consistent essentiellement à proposer et à évaluer des développements asymptotiques, dont l'évaluation numérique repose généralement *in fine* sur des calculs numériques sur VER. Les premiers progrès en homogénéisation mathématique ont été obtenus sous l'hypothèse forte de périodicité, dont la compréhension n'a cessé d'être approfondie depuis. Introduites également dans les années 1980, les méthodes mathématiques basées sur l'homogénéisation stochastique ont connu un essor plus tardif [Gloria *et al.*, 2015 ; Armstrong *et al.*, 2019]. D'abord focalisée sur les équations elliptiques linéaires (par exemple l'élasticité linéaire dans [Duvaut, 1984]), les techniques d'homogénéisation mathématique ont été appliquées à des physiques plus complexes (par exemple la thermo-visco-élasticité [Francfort et Suquet, 1986]), mais qui demeurent souvent trop simplifiées par rapport aux problématiques industrielles réelles, notamment celles du combustible nucléaire (non-linéarités, haut contraste, couplages multiples...).

L'homogénéisation micromécanique (approches de type Mori-Tanaka, schéma auto-cohérent,...) se focalise plutôt sur l'obtention d'approximations analytiques (parfois exactes pour des cas très particuliers) du comportement mécanique du milieu homogénéisé équivalent pour des milieux périodiques ou aléatoires et des comportements mécaniques non linéaires. Ces approximations ne fournissent pas d'informations locales, au mieux des estimations moyennes (moments d'ordre 1 et 2) par phase pour les approches dites à « champs moyens » [Masson *et al.*, 2020]. Elles nécessitent cependant des développements importants (parfois impossibles) pour certains comportements non linéaires complexes (fluage, fissuration, ...) [Ponte Castañeda, 2016].

Les approches d'homogénéisation numérique reposent sur le fait d'obtenir le comportement effectif à la volée [Feyel, 1999 ; E et Engquist, 2003], au cours d'un calcul de structure, à partir d'un calcul microscopique hétérogène (par éléments finis) sur le VER, cf. figure III.2.1b. Ces approches dites « à champs complets » reviennent donc à coupler numériquement les deux échelles de modélisation dans un même schéma de calcul et permettent ainsi de disposer à façon des informations moyennées ou complètes sur l'état mécanique local de la microstructure. Aucune loi constitutive à l'échelle macroscopique n'est nécessaire, ce qui se révèle particulièrement utile

lorsque les simulations doivent être menées sur des situations (géométries, comportements,...) pour lesquelles on ne dispose pas de loi homogénéisée. Ces approches sont donc considérées comme des approches de référence. Cependant, les calculs locaux sur VER doivent être effectués en chaque point d'intégration du maillage macroscopique. Ainsi, même si ces calculs sont indépendants et donc parfaitement parallélisables, cela rend ces méthodes multiéchelles coûteuses pour une utilisation sur un nombre de processeurs raisonnable (de l'ordre de la dizaine).

Les méthodes de types éléments finis multiéchelles ou MsFEM (Multiscale Finite Element Method) [Hou et Wu, 1997 ; Efendiev et Hou, 2009 ; ...] proposent une alternative intéressante consistant à remplacer les fonctions de base standard de Lagrange des EFs du problème macroscopique par des fonctions de base contenant de l'information locale (mais respectant la conformité des EFs). Ces nouvelles fonctions de base (non polynomiales) sont obtenues en amont par résolution de problèmes définis à l'échelle locale sur des domaines recouvrant chaque élément du maillage grossier. La séparation d'échelles ne doit alors pas être trop importante pour pouvoir capturer les hétérogénéités dans les domaines locaux.

Toujours pour réduire le temps de calcul des méthodes d'homogénéisation numérique tout en permettant de traiter des problèmes mécaniques non linéaires difficiles et de relocaliser les champs à l'échelle microscopique, des approches basées sur des techniques de réduction d'ordre de modèles [Michel et Suquet, 2003 ; Largeton *et al.*, 2014 ; ...] ont été proposées. Des problèmes micromécaniques locaux d'ordre réduit (peu de dds) sont alors résolus à chaque point d'intégration du calcul macroscopique. Les fonctions de bases de ces problèmes locaux sont obtenues à partir d'essais numériques préalables à champs complets sur VER.

Cependant, ces différentes alternatives amènent à devoir redéfinir les nouvelles fonctions de base pour toute nouvelle microstructure ou tout nouveau comportement.

Nous nous sommes ainsi intéressés à développer une approche d'homogénéisation dite « hybride », mêlant approches d'homogénéisation analytiques et numériques. Cette stratégie est détaillée et vérifiée dans les sections suivantes. Nous verrons ainsi que dans son principe le plus abstrait, l'algorithme proposé est très proche d'une méthode de raffinement de maillage local à deux niveaux (cf. section III.1), ce qui nous a permis de proposer un cadre unifié d'algorithmes de couplage multiéchelle pour des problèmes quasi-statiques non linéaires.

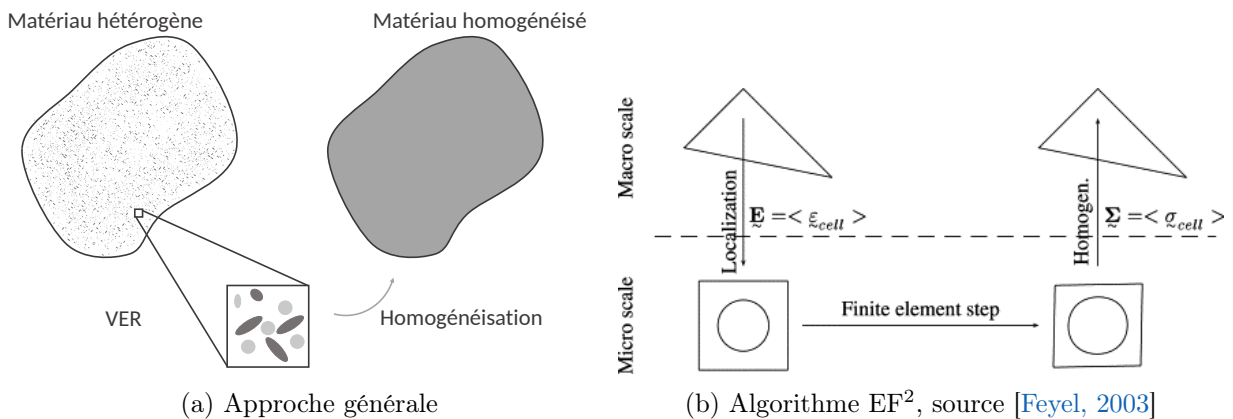


FIGURE III.2.1 – Principe des méthodes d'homogénéisation de microstructures hétérogènes

III.2.2 Algorithme éléments finis au carré (EF²) hybride

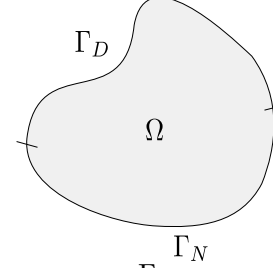
III.2.2.a Rappel du problème mécanique non linéaire et résolution par la méthode des éléments finis

Afin de comprendre l'intérêt et l'impact d'une stratégie de résolution mécanique multi-échelle, nous rappelons ici brièvement le problème mécanique quasi-statique avec comportement

non linéaire à résoudre (indépendamment de l'échelle) et les principales étapes de sa résolution numérique.

Soit le problème quasi-statique suivant sur un domaine borné Ω de frontière suffisamment régulière $\Gamma = \Gamma_D \cup \Gamma_N$ avec $\Gamma_D \cap \Gamma_N = \emptyset$

$$(\mathcal{P}) \begin{cases} -\operatorname{div} \underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{f}} & \text{dans } \Omega, \\ \underline{\underline{\sigma}} = \mathcal{F}(\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{u}})) & \text{dans } \Omega, \\ \underline{\underline{\varepsilon}} = \frac{1}{2} (\operatorname{grad} \underline{\underline{u}} + (\operatorname{grad} \underline{\underline{u}})^T) & \text{dans } \Omega, \\ \underline{\underline{u}} = \underline{\underline{u}}_D & \text{sur } \Gamma_D, \\ \underline{\underline{\sigma}} \underline{\underline{n}} = \underline{\underline{g}} & \text{sur } \Gamma_N. \end{cases} \quad (\text{III.2.1})$$



avec $\underline{\underline{u}} = \underline{\underline{u}}_D$ la condition de Dirichlet sur Γ_D et $\underline{\underline{\sigma}} \underline{\underline{n}} = \underline{\underline{g}}$ celle de Neumann sur Γ_N .

L'équation $\underline{\underline{\sigma}} = \mathcal{F}(\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{u}}))$ reliant localement le tenseur des contraintes au tenseur des déformations est appelée loi de comportement ou équation constitutive. Elle est écrite ici (comme en section III.1.3.e) de façon formelle quel que soit le comportement (non linéaire) considéré.

La méthode des éléments finis (EF) s'appuie sur la formulation faible (ou variationnelle) du problème (\mathcal{P}) :

$$(\mathcal{PV}) \begin{cases} \text{Trouver } \underline{\underline{u}} \in \mathcal{V}(\underline{\underline{u}}_D) \text{ tel que} \\ \int_{\Omega} \mathcal{F}(\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{u}})) : \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{w}}) \, dV = \int_{\Omega} \underline{\underline{f}} \cdot \underline{\underline{w}} \, dV + \int_{\Gamma_N} \underline{\underline{g}} \cdot \underline{\underline{w}} \, dV \quad \forall \underline{\underline{w}} \in \mathcal{V}(\underline{\underline{0}}) \end{cases} \quad (\text{III.2.2})$$

avec $\mathcal{V}(\underline{\underline{u}}_0) = \{\underline{\underline{v}} \in (H^1(\Omega))^m; \underline{\underline{v}} = \underline{\underline{u}}_0 \text{ sur } \Gamma_D\}$ avec m la dimension de l'espace.

L'équation constitutive reliant le tenseur des contraintes au tenseur des déformations étant généralement non linéaire, le problème (\mathcal{PV}) est ainsi non linéaire en déformations et donc en déplacements. Un algorithme itératif de type Newton est alors généralement utilisé pour linéariser ce problème. En mécanique des solides, cet algorithme se base sur un développement à l'ordre 1 de l'équation constitutive à l'itération k :

$$\mathcal{F}(\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{u}}^k)) \approx \mathcal{F}(\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{u}}^{k-1})) + \underline{\underline{\underline{H}}}_{\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{u}}^{k-1})} : (\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{u}}^k - \underline{\underline{u}}^{k-1})) \quad (\text{III.2.3})$$

avec $\underline{\underline{\underline{H}}}$ un opérateur de recherche appelé opérateur tangent en mécanique.

Le problème linéarisé s'écrit alors à l'itération k

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{w}}) : \underline{\underline{\underline{H}}}_{\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{u}}^{k-1})} : \underline{\underline{\varepsilon}}(\delta \underline{\underline{u}}^k) \, dV &= \int_{\Omega} \underline{\underline{f}} \cdot \underline{\underline{w}} \, dV + \int_{\Gamma_N} \underline{\underline{g}} \cdot \underline{\underline{w}} \, dV - \int_{\Omega} \mathcal{F}(\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{u}}^{k-1})) : \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{w}}) \, dV \\ &= f_{ext} - f_{int}(\underline{\underline{\sigma}}(\underline{\underline{u}}^{k-1})) \\ &= -r(\underline{\underline{u}}^{k-1}) \quad \forall \underline{\underline{w}} \in \mathcal{V}(\underline{\underline{0}}) \end{aligned} \quad (\text{III.2.4})$$

avec $\delta \underline{\underline{u}}^k = \underline{\underline{u}}^k - \underline{\underline{u}}^{k-1}$ l'incrément de déplacement, f_{ext} les forces externes, f_{int} les forces internes et r le résidu du problème variationnel (\mathcal{PV}). Après résolution de (III.2.4), le nouveau résidu $r(\underline{\underline{u}}^k)$ est évalué via l'appel à la relation constitutive connaissant $\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{u}}^k)$.

Remarques.

- L'algorithme itératif de résolution du problème quasi-statique non linéaire peut être vu comme une méthode de prédiction/correction sur la contrainte.
- Le choix de l'opérateur tangent $\underline{\underline{\underline{H}}}$ affecte l'ordre et donc la vitesse de convergence du schéma itératif mais généralement pas la précision de la solution finale. Un schéma dit « de Newton » à l'ordre 2 est obtenu en choisissant la matrice Jacobienne du comportement, alors des algorithmes de type quasi-Newton (module sécante, tenseur d'élasticité,...) conduisent à une convergence tout au plus super-linéaire.

- La relation constitutive est généralement sous la forme d'une équation différentielle en temps. Divers algorithmes d'intégration temporelle (principalement implicites ou explicites) peuvent être utilisés, voir [Besson et al., 2009]. \square

Après discrétisation par la méthode des EFs de Lagrange en déplacement, nous obtenons le système linéaire suivant à résoudre¹ :

$$\underline{\underline{K}}^{k-1} \delta \underline{U}^k = \underline{F}_{ext} - \underline{F}_{int}^{k-1} = -\underline{R}^{k-1} \quad (\text{III.2.5})$$

avec $\underline{\underline{K}}$ la matrice de rigidité associée à l'opérateur $\underline{\underline{H}}$ et les vecteurs en majuscules (\underline{U} , \underline{F}_{ext} , \underline{F}_{int} , \underline{R}) correspondant à la discrétisation des variables continues (\underline{u} , f_{ext} , f_{int} , r) du problème (III.2.4). Les intégrations des termes incluant les contraintes étant difficiles (voire impossibles) à obtenir de façon analytique, ces intégrales sont approchées par une formule de quadrature (typiquement de Gauss). Ainsi en pratique l'appel à la relation constitutive, permettant de mettre à jour le second membre du système (III.2.5), n'est effectué qu'aux points d'intégration. L'algorithme III.2.1 résume les grandes étapes de la résolution EF d'un problème quasi-statique non linéaire.

Algorithme III.2.1 : Algorithme de résolution EF pour problème quasi-statique non linéaire

Pour $k = 1$ jusqu'à convergence

 Résoudre l'équilibre (III.2.5)

 En chaque point d'intégration :

 └ Appeler la relation constitutive pour obtenir les contraintes

 Mettre à jour le résidu

 └ Tester la convergence

III.2.2.b Présentation de l'algorithme EF² hybride

Parmi les approches d'homogénéisation numérique, nous avons choisi de nous intéresser à l'approche dite « éléments finis au carré » (EF²) car elle est particulièrement bien adaptée à la mécanique des solides. Il est à noter qu'un travail récent [Eidel et Fischer, 2018] a montré la très grande similitude de l'approche EF² avec la méthode « Heterogeneous Multiscale Method » (HMM) [E et Engquist, 2003] en élasticité linéaire.

Principe de l'approche EF²

Au niveau formel, l'approche EF² [Feyel, 1999 ; Feyel et Chaboche, 2000] est basée sur un algorithme récursif consistant à substituer l'appel local à la relation constitutive dans l'algorithme de résolution III.2.1 par la résolution EF sur VER d'un problème quasi-statique non linéaire avec comportement hétérogène. Une étape de « localisation » (définition des conditions aux limites sur les bords du VER) et d'« homogénéisation » (moyenne des contraintes locales) viennent compléter le « modèle EF² », cf. figure III.2.1b. Ainsi, tout comme l'équation constitutive, ce modèle EF² permet de relier le tenseur des contraintes macroscopiques au tenseur des déformations macroscopiques. Les seules lois constitutives à fournir sont celles de l'échelle microscopique.

Remarque. L'algorithme EF² étant récursif, il pourrait être de nouveau appliqué en substitution à l'appel de la relation constitutive lors de la résolution du problème sur le VER afin de modéliser un niveau plus fin d'hétérogénéité et ainsi conduire à un algorithme EFⁿ ($n > 2$). \square

Dans la suite, selon la convention habituelle en homogénéisation, le tenseur des déformations macroscopiques sera noté $\underline{\underline{E}}$ et le tenseur des contraintes macroscopiques sera noté $\underline{\underline{\Sigma}}$.

1. Par cohérence avec les chapitres précédents de ce manuscrit, nous conservons les mêmes conventions de notations des vecteurs et matrices, qu'ils fassent référence à l'espace physique ou à l'espace discret.

Dans un contexte EF², les conditions aux limites intervenant dans l'étape de localisation s'appuient sur le tenseur de déformations macroscopique, et donc deux principales conditions aux limites sont généralement considérées [Feyel, 1999] :

- déformations homogènes (ou KUBC : kinematic uniform boundary condition)

$$\underline{u}(\underline{x}, \underline{y}) = \underline{\underline{E}}(\underline{x})\underline{y} \quad (\text{III.2.6})$$

avec \underline{x} le point d'intégration macroscopique considéré avec le tenseur des déformations $\underline{\underline{E}}(\underline{x})$ associé, et \underline{y} le vecteur position dans le VER.

- périodiques (ou PBC : periodic boundary condition)

$$\underline{u}(\underline{x}, \underline{y}) = \underline{\underline{E}}(\underline{x})\underline{y} + \underline{v}(\underline{x}, \underline{y}) \quad (\text{III.2.7})$$

avec $\underline{v}(\underline{x}, \underline{y})$ un déplacement périodique (inconnu) de période égale à la taille du VER.

Remarque. *Les PBC sont plus riches que les KUBC car elles permettent un déplacement périodique supplémentaire. Les estimations obtenues avec ces conditions aux limites sont plus précises, surtout pour des VER de taille petite, mais au prix d'un coût de calcul supplémentaire souvent important (surtout en 3D).* □

Concernant l'étape d'homogénéisation, le choix usuel est d'effectuer une moyenne spatiale sur le VER du tenseur des contraintes microscopiques :

$$\underline{\underline{\Sigma}} = \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_V = \frac{1}{|V|} \int_V \underline{\underline{\sigma}} dV \quad (\text{III.2.8})$$

avec V le VER considéré et $|V|$ son volume.

La moyenne spatiale (III.2.8) est conforme à la définition du tenseur des contraintes à partir d'un élément de volume équilibré. Il a été montré dans [Feyel, 2003] que l'algorithme EF² converge quelles que soient les hypothèses choisies pour le couple localisation/homogénéisation.

Il est à noter que cette approche multiéchelle peut être utilisée pour corriger également l'opérateur de linéarisation macroscopique $\underline{\underline{H}}^{k-1}$. Cependant, étant donné que la matrice tangente effective n'est malheureusement pas égale à la moyenne spatiale des matrices tangentes sur le VER, des calculs additionnels sur le VER doivent être menés, cf. [Feyel, 1999 ; Miehe *et al.*, 1999 ; Saeb *et al.*, 2016].

Nous ne considérons pas cette option ici, car trop onéreuse en temps de calcul. Cela revient à résoudre le problème à l'échelle macroscopique par un algorithme de type quasi-Newton, accéléré en cas de convergence linéaire par une méthode d'accélération de point-fixe vectorielle (voir section II.1 et références [RH15 ; MHRE18]).

Méthode EF² hybride

Le point faible de la méthode EF² est relatif au temps de calcul et à l'espace mémoire (stockage d'un pas de temps sur l'autre de l'état d'équilibre et des variables internes de chaque calcul VER) qu'elle nécessite. Malgré la parallélisation évidente de l'algorithme, le surcoût en temps de calcul est supérieur d'un facteur 10 à 1000 (selon le nombre de degrés de liberté et la parallélisation possible des calculs VER) à l'algorithme EF usuel (cf. algorithme III.2.1) impliquant des lois de comportement homogénéisées.

Nous avons donc proposé une approche EF² hybride [RMMB17] consistant à n'appeler le modèle EF² que dans une ou des régions d'intérêt et un modèle d'équation constitutive homogénéisée dans le reste du domaine de calcul, cf. algorithme III.2.2.

Les calculs locaux restent indépendants entre eux et donc toujours parallélisables. Le champ de contraintes macroscopiques est ainsi la composition de valeurs provenant des deux approches. La résolution de l'équilibre macroscopique global permet alors que le champ de déplacement (et le tenseur des déformations) obtenu tienne compte des deux approches.

Algorithme III.2.2 : Algorithme EF² hybride

Pour $k = 1$ jusqu'à convergence

- └ Résoudre l'équilibre (III.2.5) à l'échelle macroscopique
- └ En chaque point d'intégration, obtention de $\underline{\underline{\Sigma}}^k$:
 - └ **si dans la/les zone(s) d'intérêt**
 - └ Appeler le modèle EF² impliquant une résolution (non linéaire) EF sur VER (cf. Algorithme III.2.1)
 - └ **sinon**
 - └ Appeler la relation constitutive homogénéisée
- └ Mettre à jour le résidu macroscopique
- └ Tester la convergence

L'avantage évident de cette approche EF² hybride est un gain en temps de calcul par rapport à l'approche EF² standard tout en continuant à avoir des informations complètes sur l'état mécanique local sur des zones stratégiques du domaine. En contre-partie, il faut disposer d'une loi de comportement homogénéisée à l'échelle macroscopique représentative du comportement effectif dans la zone complémentaire du domaine.

Cet algorithme EF² hybride a été repris dans [Praster *et al.*, 2019] en le combinant naturellement à un indicateur d'erreur pour déterminer la ou les zones d'apparition de la plasticité.

Remarque. *Il est à noter que des stratégies complémentaires ont été développées afin de réduire le coût intrinsèque d'un calcul microscopique sur VER. Mentionnons en plus des approches basées sur la réduction d'ordre de modèles déjà citées en introduction, les techniques de préconditionnement multigrilles (à partir du modèle homogénéisé) [Neuss *et al.*, 2001 ; Gu *et al.*, 2016 ; Miehe *et Bayreuther*, 2007 ; ...]* □

En pratique, afin d'être le moins intrusif possible dans le solveur EF de mécanique non linéaire existant, nous avons effectué dans PLEIADES [RBM17] le choix algorithmique décrit dans l'algorithme III.2.3.

Algorithme III.2.3 : Implémentation peu intrusive de l'algorithme EF² hybride

Pour $k = 1$ jusqu'à convergence

- └ Faire une itération de l'algorithme III.2.1 à l'échelle macroscopique.
- └ En chaque point d'intégration de la/les **zone(s) d'intérêt** :
 - └ Appeler le modèle EF² impliquant une résolution (non linéaire) EF sur VER (cf. Algorithme III.2.1)
 - └ Remplacer la contrainte macroscopique par celle obtenue via le modèle EF²
- └ Mettre à jour le résidu macroscopique
- └ Tester la convergence

Cet algorithme, même si moins intrusif, nécessite toutefois de pouvoir piloter le nombre d'itérations de la résolution EF non linéaire. La mise à jour du résidu peut être faite en dehors de la résolution EF, et le résidu obtenu imposé comme terme source à la résolution macroscopique suivante.

III.2.3 Vérification et utilisation de l'algorithme EF² hybride

L'algorithme EF² hybride (cf. Algorithme III.2.2) a été introduit dans la plateforme PLEIADES et utilisé pour simuler le comportement mécanique local sous irradiation des combustibles MOX [RMMB17 ; RBM17 ; RMB21]. Les principales étapes de vérification de l'algorithme EF² ainsi que quelques résultats saillants de calculs sont présentés dans les sections suivantes.

III.2.3.a Couplage multiphysique et multiéchelle dans la plateforme PLEIADES

Comme déjà introduit dans le chapitre de contexte (cf. Chapitre I), la simulation du comportement des combustibles implique la prise en compte de plusieurs physiques. Un couplage multiphysique de point-fixe de type Gauss-Seidel par bloc avec accélération de convergence est utilisé (cf. Chapitre II.1). La simulation multiéchelle du comportement mécanique des combustibles hétérogènes via l’algorithme EF² hybride présenté dans la section précédente, peut donc se faire directement à l’intérieur du composant mécanique basé sur le logiciel Cast3M [Cast3M]. Le schéma de calcul présente alors une double boucle de point-fixe imbriquée, voir figure III.2.2a. Par ailleurs, l’architecture PLEIADES propose des calculs parallèles multitranches à partir du principe d’un découpage axial du crayon combustible en « tranches » (cf. section I.1.3). La mise en œuvre de la méthode EF² hybride apporte un second niveau de parallélisme, cf. figure III.2.2b. Nous disposons ainsi d’une résolution mécanique multiéchelle à champs complets à l’intérieur d’un couplage multiphysique [RMB21].

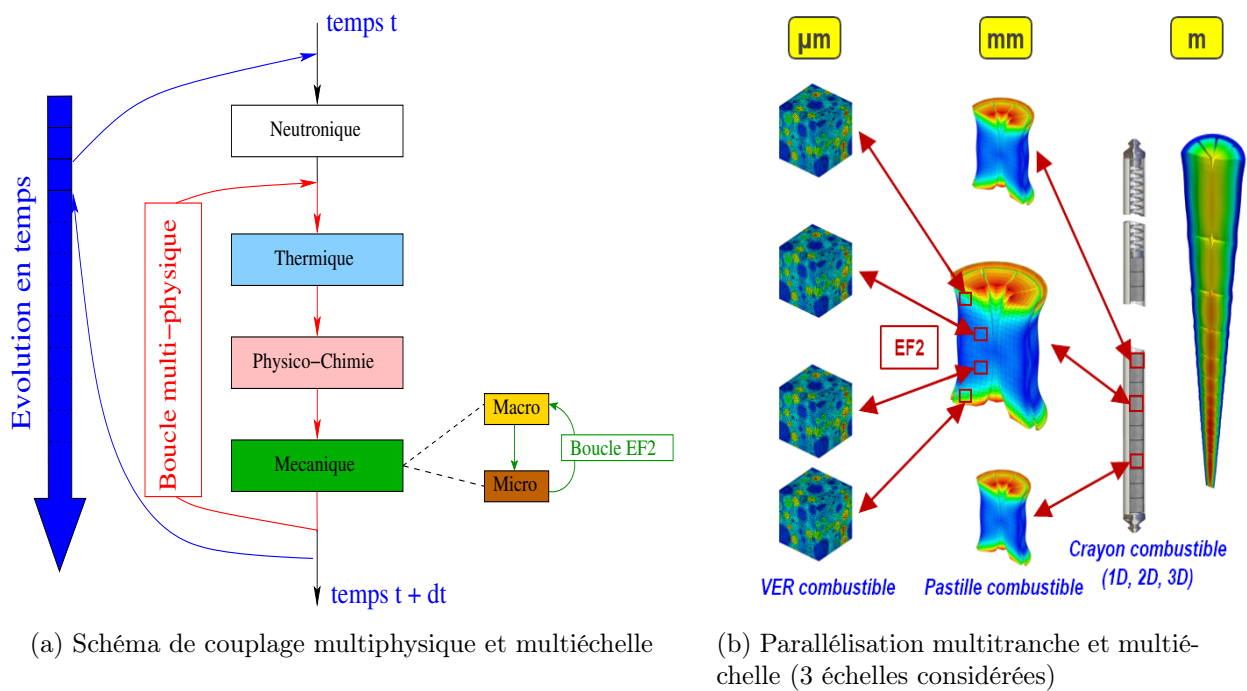


FIGURE III.2.2 – Couplage multiphysique, multiéchelle et multitranche dans PLEIADES

Dans la suite, le couplage multiéchelle EF² hybride proposé est également un couplage multidimensionnel puisque nous l’avons mis en place dans une représentation 1D multitranche du crayon combustible. Le maillage macroscopique de la structure est 1D, alors que le maillage de la microstructure (VER) est 3D. Il s’agit donc d’un couplage mécanique multiéchelles 1D/3D géré de manière itérative contrairement aux méthodes de type Arlequin [Ben Dhia, 1998] où le système composite est résolu.

III.2.3.b Vérification de calculs sur la microstructure

VERs représentatifs de la microstructure MOX

Des microstructures représentatives 3D du combustible MOX ont pu être générées à partir d’images 2D de la microstructure réelle (images microsondes). Cette méthodologie tout comme sa validation (comparaison des covariances expérimentales et numériques) est décrite en détails dans [Largenton, 2012]. Des travaux récents ont par ailleurs permis d’améliorer encore cette description [El Abdi, 2021]. Dans notre étude, nous adoptons une description 2-phases de la microstructure MOX, description dans laquelle les inclusions représentatives des amas plutonifères

sont conservées tandis que la matrice est constituée des amas uranifères et de l'enrobage, le comportement de cette deuxième phase appelée matrice étant homogène. Cette microstructure est au final une microstructure aléatoire de type matrice-inclusions avec des inclusions présentant une distribution de tailles (inclusions polydispersées), cf. figure III.2.3. Nous nous focaliserons donc ici sur des résultats obtenus en inclusions polydispersées même si d'autres types de distribution (monodispersée ou périodique) ont été étudiées, voir [RMMB17 ; RMB21].

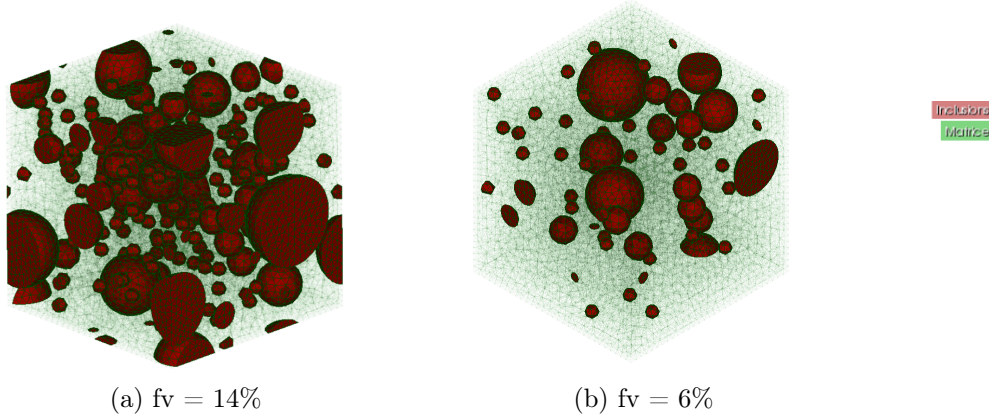


FIGURE III.2.3 – Exemples de VER de MOX bi-phasique utilisé dans le modèle EF² avec différentes fractions volumiques d'inclusions (fv)

Lois constitutives et chargements

Concernant le comportement micromécanique du matériau, chaque phase r (inclusion ou matrice) suit la loi de comportement de type Norton suivante :

$$\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{C}}_{el} : \left(\underline{\underline{\varepsilon}} - \underline{\underline{\alpha}}^r - \underline{\underline{E}}^{g,r} - \underline{\underline{E}}^{th} \right), \quad \dot{\underline{\underline{\alpha}}}^r = K \dot{\phi}^r \underline{\underline{\sigma}}^d \quad (\text{III.2.9})$$

$\underline{\underline{\alpha}}^r$ étant l'unique variable interne du modèle, égale au fluage induit par l'irradiation dont la dérivée dépend linéairement du taux de fission $\dot{\phi}^r$ et du déviateur des contraintes $\underline{\underline{\sigma}}^d$. Le paramètre K est un paramètre matériau qui dépend de la température. Par ailleurs, $\underline{\underline{E}}_{kl}^{g,r} = E^{g,r} \delta_{kl}$ désigne la déformation de gonflement (gazeux, solide et densification) induit par l'irradiation (cf. modèle de physico-chimie dans la figure III.2.2a) et $\underline{\underline{E}}^{th}$ la déformation due à la dilatation thermique, homogène dans la microstructure. Les déformations par phase $E^{g,r}$ sont approchées par celles fournies par le modèle de physico-chimie (cf. figure III.2.2a) travaillant à l'échelle mésoscopique à partir des contraintes hydrostatiques moyennes par phase ($\Sigma^{H,r} = \langle \sigma^H \rangle_r = \frac{1}{|V^r|} \int_{V^r} \frac{1}{3} tr(\underline{\underline{\sigma}}) dV$, avec V^r le volume de la phase r). La densité de fission tout comme la déformation de gonflement dépendent de la teneur en plutonium de la phase considérée : le matériau présente bien un comportement mécanique hétérogène. Le tenseur des modules élastiques $\underline{\underline{C}}_{el}$ est considéré uniforme et isotrope.

La température, la densité de fission et les chargements de type déformations imposées provenant du couplage multiphysique (gonflement, dilatations thermiques) sont donc passés dans l'étape de localisation en plus des déformations macroscopiques.

Convergence en maillage à l'échelle microscopique

Nous avons voulu dans un premier temps évaluer l'influence du pas de maillage de la microstructure et de l'ordre des EFs utilisés sur les propriétés homogènes et moyennes par phase obtenues par l'algorithme EF².

La phase inclusionnaire est extrêmement sensible au maillage lorsque le comportement des matériaux est non linéaire, beaucoup plus que la phase matrice ou encore le comportement effectif. Cette propriété se retrouve quel soit le type de CLs appliquées au bord (KUBC ou PBC). Cela

se comprend par le fait que la phase inclusionnaire a la plus petite partie connexe et est donc évidemment la plus sensible aux variations de maillage. On constate que l'utilisation d'éléments finis quadratiques permet de rendre le comportement moyen de la phase inclusionnaire beaucoup moins sensible au pas de maillage.

Une illustration est donnée en figure III.2.4 pour la microstructure à fraction volumique d'inclusions de l'ordre de 14 % (cf. figure III.2.3a).

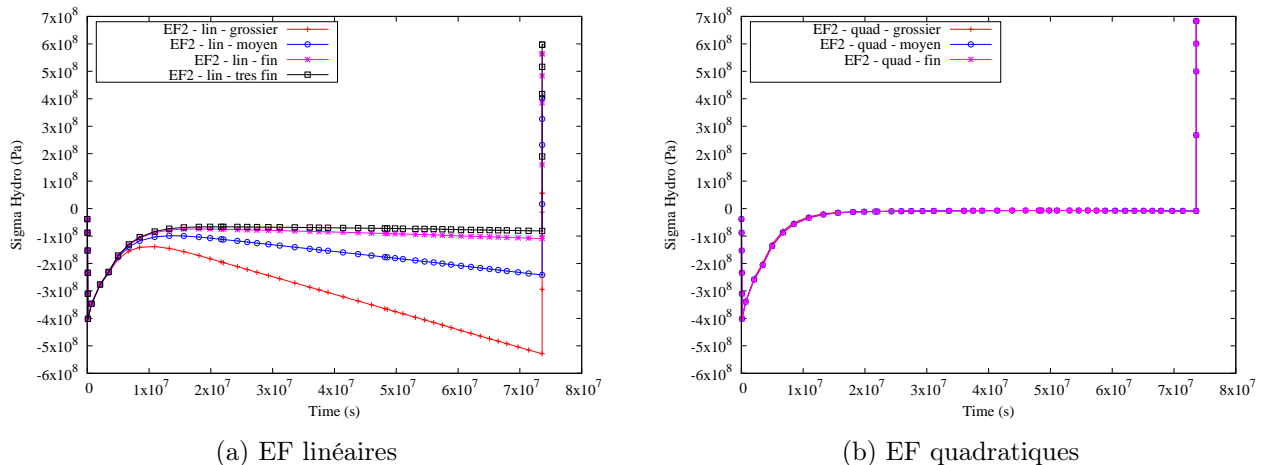


FIGURE III.2.4 – Convergence en maillage de la contrainte hydrostatique moyenne de la phase inclusionnaire obtenue par EF²- CLs de type PBC.

Sur cette figure, la contrainte hydrostatique moyenne de la phase inclusionnaire est représentée sur le VER associé au point de Gauss central de la tranche de flux maximal. L'historique de chargement correspond à une irradiation du combustible avec mise en compression (domaine élastique), puis relaxation des contraintes (passage dans le domaine non linéaire) et enfin un retour à froid. Quatre raffinements de maillage différents (de 2 000 à 100 000 éléments) ont été générés et des éléments finis tétraédriques linéaires ou quadratiques sont utilisés. Des CLs de type périodique (PBC) ont été appliquées, mais des évolutions similaires sont obtenues avec des CLs en déformations homogènes (KUBC), cf. [RMMB17]. On constate clairement une bien meilleure convergence en maillage avec des EFs quadratiques lorsque le comportement du matériau est non linéaire.

Dans la suite, des éléments finis quadratiques seront donc utilisés pour mailler le VER. Par ailleurs, dans le cas d'inclusions sphériques ou plus généralement à bords non plans, il est important de souligner que la transformation géométrique EF entre l'élément de référence et l'élément réel doit également être quadratique (transformation isoparamétrique), afin de générer des éléments à bords courbes et ainsi mieux approcher la fraction volumique théorique d'inclusion. En effet, la fraction volumique maillée intervient au premier ordre dans l'évaluation numérique du comportement effectif. La figure III.2.5 représente la convergence en maillage de la fraction volumique maillée d'inclusion sur un maillage avec EF quadratiques obtenu par transformation linéaire ou quadratique de l'élément de référence.

Ainsi grâce à une transformation quadratique isoparamétrique, nous avons besoin de maillages moins raffinés pour atteindre une fraction volumique maillée convergée et plus proche de la fraction volumique théorique. Par ailleurs, une étude de convergence en maillage a montré que lorsque la fraction volumique maillée a convergé, il en est de même pour le comportement local. Dans l'exemple précédent, un facteur 30 sur le nombre d'éléments a ainsi pu être gagné.

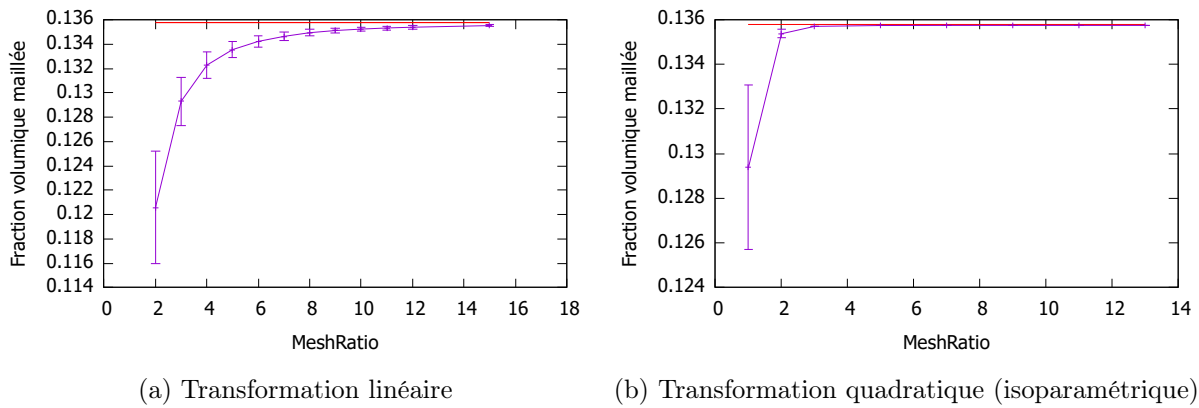


FIGURE III.2.5 – Influence de la transformation géométrique sur la fraction volumique maillée d'inclusion - Maillage EF quadratique

III.2.3.c Utilisation du schéma EF² comme calcul de référence

Nous avons utilisé le schéma de calcul EF² pour vérifier le comportement effectif et moyen par phase obtenu jusqu'ici via une loi homogénéisée à champs moyens décrite dans le paragraphe suivant.

Modèle homogénéisé

Nous nous intéressons à la loi homogénéisée du MOX bi-phasé [Ricaud et Masson, 2009] obtenue avec une approche dite Mori-Tanaka Incremental (MTI). Cette approche constitue l'extension au cas viscoélastique linéaire vieillissant du modèle de Mori-Tanaka [Mori et Tanaka, 1973] employé en élasticité linéaire. A noter que ce modèle de Mori-Tanaka est bien adapté à l'estimation du comportement effectif de matériaux composites de type inclusions-matrice avec une fraction volumique d'inclusions raisonnable (inférieure à 30%) et une distribution spatiale isotrope des phases ne présentant pas d'ordre à grande distance (voir [Bornert *et al.*, 2001] pour plus de détails à ce sujet).

Pour les microstructures MOX MIMAS considérées, régies par des lois constitutives des phases de type (III.2.9), les lois homogénéisées MTI ont été vérifiées avec succès sur des calculs VER en mode autonome. Par contre, ces lois n'ont jamais été vérifiées à partir d'un calcul à champ complet lors d'un calcul multiphysique couplé. Dans le cas des combustibles MOX, il y a notamment un couplage fort entre la pression hydrostatique par phase et la déformation libre de gonflement par phase, cf. section III.2.3.a.

Vérification de l'accord loi homogénéisée MTI/EF²

Nous avons effectué des calculs sur la base test de validation de l'application ALCYONE de la plateforme PLEIADES. Pour le cas test présenté dans les résultats suivants, la fraction volumique des amas plutonifères est de l'ordre de 6%. Le contraste équivalent entre les phases, tenant compte des différences de déformations libres, est d'environ 3. Un VER avec inclusions polydispersées maillé avec 80000 éléments est utilisé.

La figure III.2.6 permet de visualiser les moyennes (sur le VER ou par phase) des contraintes hydrostatiques obtenues par le calcul « de référence » EF² et de les comparer avec celles fournies sur le même historique (correspondant à deux cycles de vie en réacteur) avec un calcul homogénéisé MTI (utilisé de façon standard dans la plateforme PLEIADES).

Nous constatons un très bon accord entre le comportement homogénéisé MTI et le matériau homogène équivalent au calcul EF micromécanique. On peut cependant noter de légers écarts sur le comportement moyen de la phase inclusionnaire à plusieurs endroits de l'historique. Cela confirme que cette phase inclusionnaire est discriminante. Ces écarts sont moins marqués lorsqu'on utilise une microstructure à inclusions monodispersées [RBM17 ; RMB21], ce qui pourrait

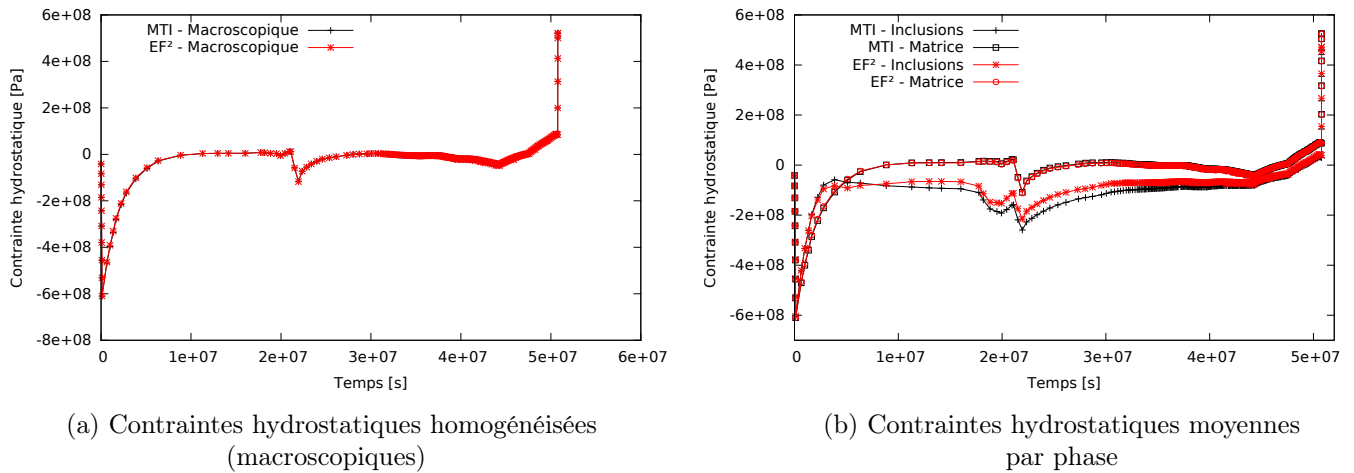


FIGURE III.2.6 – Comparaison calcul EF² avec inclusions polydispersées versus loi homogénéisée MTI - Contraintes hydrostatiques homogénéisées et moyennes par phase.

laisser penser que la loi homogénéisée MTI est en meilleure adéquation avec des milieux aléatoires monodispersés. Cette hypothèse reste à confirmer notamment dans un cas avec activation du fluage thermique, cas où l’effet de la microstructure devrait être plus discriminant du fait d’interactions mécaniques plus marquées entre les inclusions.

III.2.3.d Scalabilité des calculs EF² hybrides

Nous avons également réalisé des tests de scalabilité sur serveur de calcul centralisé. Pour ce faire, nous avons effectué un calcul multiphysique avec mécanique EF² hybride sur 1, 4, 16, 32 ou 64 point(s) d’intégration pour une pastille discrétisée avec 64 points d’intégration. La loi homogénéisée MTI décrite précédemment est utilisée sur les points d’intégration hors de la zone d’intérêt.

Chaque point d’intégration EF² est affecté à un processeur différent. Les résultats sont reportés dans le tableau III.1. Le temps mesuré est le « wallclock », c’est à dire le temps écoulé entre le début et la fin du calcul.

Nb de points EF ²	1	4	16	32	64
Temps	2j 3h 47min	2j 16h 41min	2j 20h 48min	2j 19h 28min	2j 23h 34min

TABLEAU III.1 – Temps de calcul pour différents nombres de points d’intégration EF².

On constate une très bonne scalabilité des temps de calculs, particulièrement à partir de 4 points d’intégration EF². Par ailleurs ces résultats permettent de constater que le temps lié au transfert de données MPI est négligeable par rapport au temps du calcul. Ces résultats attestent de la validité de l’approche EF² hybride proposée.

Remarque. La différence de temps d’exécution entre le calcul à 1 point d’intégration EF² et le calcul à 4 points d’intégration EF² vient certainement du fait que la charge de calcul diffère légèrement selon le point d’intégration considéré. Il semblerait que dans ce cas, le premier point d’intégration EF² considéré (point central) ne soit pas le plus critique en terme de temps de calcul. □

III.2.3.e Influence des conditions aux limites sur l'état micromécanique

Le calcul EF² permet d'avoir accès à toutes les informations locales dans la microstructure. En particulier, l'analyse des répartitions statistiques des contraintes dans la microstructure permet de constater que le comportement local de certains points de la microstructure peut être assez éloigné du comportement moyen.

Nous avons ainsi pu étudier l'influence locale des conditions aux limites appliquées aux bords du VER, cf. Eqs (III.2.6)- (III.2.7). Jusqu'à présent, seule l'influence sur le comportement effectif avait été étudiée [Bornert *et al.*, 2001 ; Kanit *et al.*, 2003].

À titre d'exemple, la figure III.2.7 représente le champ de contraintes hydrostatiques obtenues sur un VER pour les deux types de CLs (KUBC et PBC).

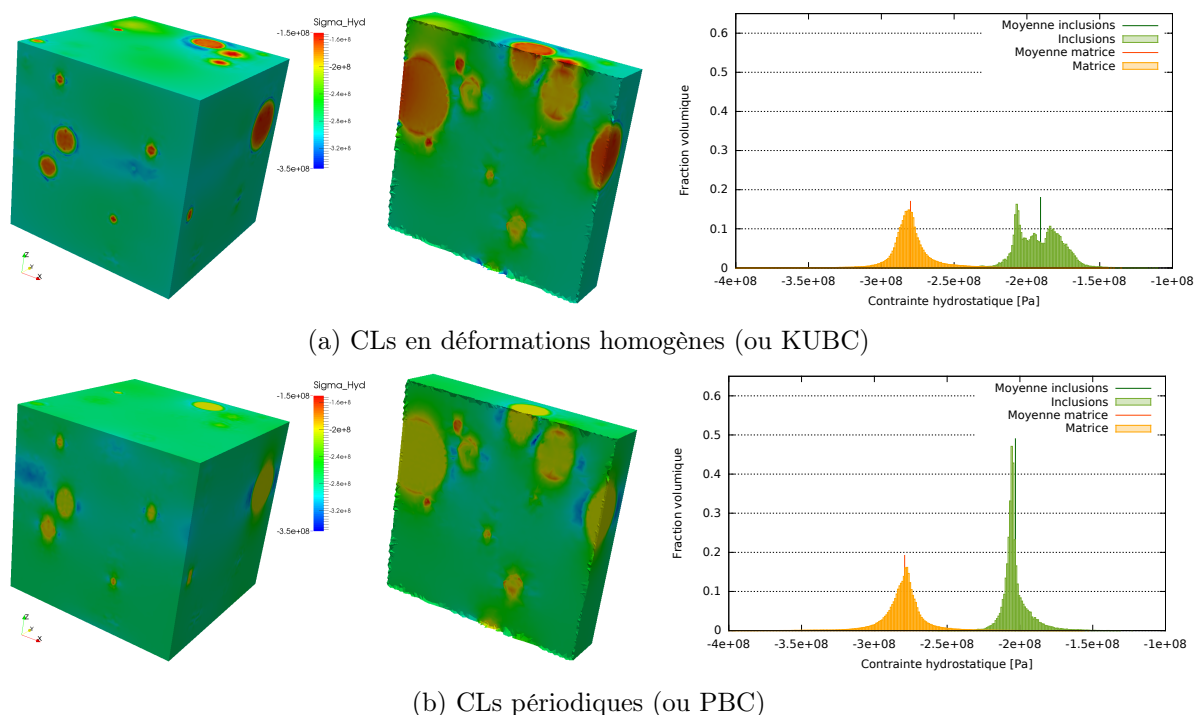


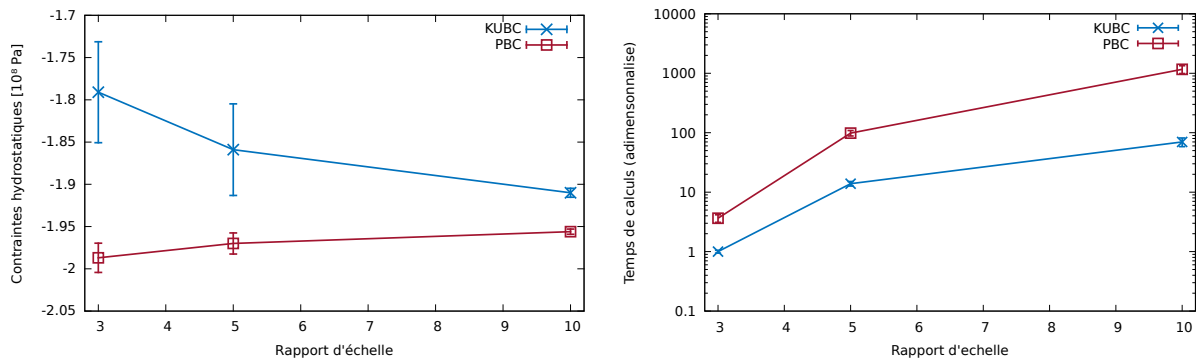
FIGURE III.2.7 – Champs de contraintes hydrostatiques dans le VER et histogrammes de répartition. Effet des conditions aux limites. À gauche VER complet (vue $y=0\%$), au milieu coupe à $y=80\%$.

L'histogramme des contraintes de la phase matrice est, pour les deux types de CLs, monomodal d'allure gaussienne. Il semble très similaire entre les deux types de CLs. Pour la phase inclusionnaire, l'histogramme est monomodal seulement avec des CLs périodiques. Le comportement polymodal de la phase inclusionnaire en CLs de type déformations homogènes semble s'expliquer par l'effet de bord plus important de ces CLs, visible sur les inclusions coupées qui présentent des contraintes de compression plus faibles que les inclusions pleines, au centre du VER (cf. les champs de contraintes sur la figure III.2.7). Pour cette phase, la répartition des contraintes semble plus étalée en CLs de type déformations homogènes, ce qui témoigne d'un comportement moins homogène de la phase dans ce cas.

Les contraintes hydrostatiques macroscopiques obtenues sur le VER sont identiques pour les deux types de CLs mais on voit que des différences existent entre les contraintes hydrostatiques moyennes par phase, ce qui semble présager d'une convergence à double échelle. La phase inclusionnaire, de par sa faible fraction volumique, est encore une fois discriminante. Dans ce cas, ce sont les moyennes par phase obtenues avec les déformations homogènes qui se rapprochent le plus de la réponse par champs moyens de la loi homogénéisée MTI.

Dans la littérature, il est montré que le comportement effectif (macroscopique) à rapport d'échelle donné (taille des inclusions sur taille du VER) obtenu via les CLs périodiques est plus précis et borné supérieurement par celui calculé par déformations homogènes. Cependant la vitesse de convergence en rapport d'échelle reste la même quel que soit le type de CLs. Il semble que le comportement local ou moyen par phase suive les mêmes règles de convergence et de précision. On peut visualiser par exemple la convergence de la contrainte hydrostatique dans la phase inclusionnaire sur la figure III.2.8a.

Les CLs périodiques s'accompagnent néanmoins de difficultés techniques liées à la génération du maillage périodique et surtout d'un surcoût en temps de calcul (et éventuellement d'espace mémoire), comme on peut l'observer sur la figure III.2.8b. Il semblerait ainsi qu'il y ait une relation puissance entre les temps de calculs avec CLs en déformations homogènes et périodiques, menant à des calculs avec CLs périodiques extrêmement coûteux pour des grands rapports d'échelle (20 fois plus longs pour un rapport d'échelle de 10), pourtant nécessaires pour garantir la représentativité du VER. Cette différence en temps de calculs s'explique par l'utilisation ici de multiplicateurs de Lagrange pour imposer les conditions périodiques mais surtout par la largeur de bande de la matrice beaucoup plus importante dans ce cas.



(a) Contraintes hydrostatiques moyennes sur la phase inclusionnaire

(b) Temps de calcul (adimensionnalisés)

FIGURE III.2.8 – Evolution des contraintes hydrostatiques sur la phase inclusionnaire et des temps de calculs totaux en fonction du rapport d'échelle et des conditions aux limites du VER. Moyenne sur 10 VERs.

Nous avons également pu montrer que les effets de bord en déformations homogènes s'atténuent rapidement pour des VERs plus grands. Donc la question du rapport précision versus temps de calcul se pose, surtout pour des calculs EF^2 déjà très coûteux.

Il semblerait que les effets de bords induits par les déformations homogènes viennent principalement des inclusions coupées au bord. Afin de valider cette hypothèse, nous avons généré des VERs sans inclusions coupées (en changeant la distance de répulsion au bord). On remarque sur la figure III.2.9 que les histogrammes sont cette fois très similaires et monomodaux pour les deux types de CLs.

Une bien meilleure stationnarité au tirage est également observée pour les contraintes moyennes par phase, même pour la phase inclusionnaire, et ce quel que soit le type de CL. Plusieurs autres pistes sont à l'étude pour pouvoir bénéficier des temps de calculs avantageux des CLs en déformations homogènes tout en conservant les résultats plus précis obtenus avec des CLs périodiques : générer un VER avec des bords non plan (épousant les inclusions non coupées), utiliser des méthodes de filtrage ou de pondération avec terme massique [Gloria, 2011 ; Mourrat, 2019] ou non [Yue et E, 2007] pour diminuer les effets de bord, ou encore optimiser du temps de calcul en CLs périodiques en résolvant directement le problème associé au correcteur périodique (\underline{v} dans l'équation (III.2.7)).

Certaines de ces pistes sont à l'étude actuellement dans le travail de thèse de L. Belgrand.

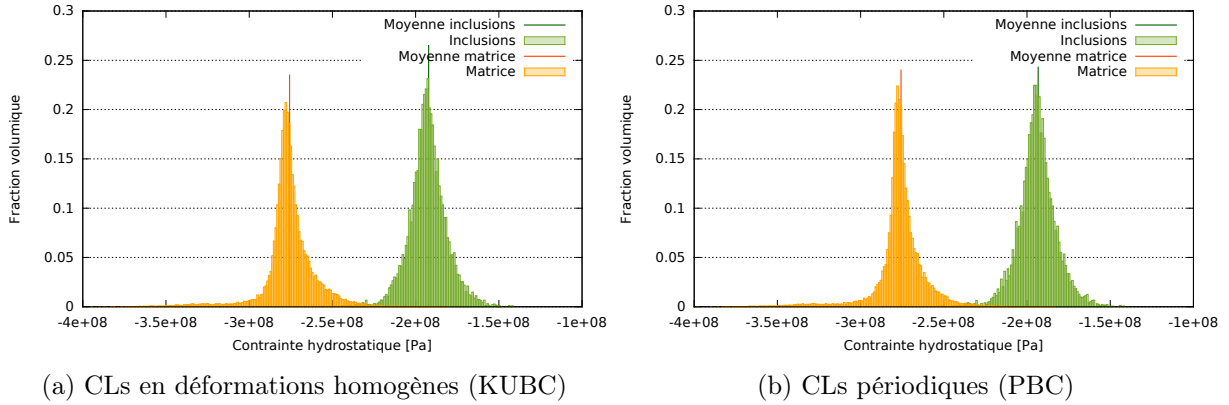


FIGURE III.2.9 – Histogrammes de répartition sur un VER sans inclusions coupées au bord. Effet des conditions aux limites.

III.2.4 Vers un algorithme de couplage numérique multiéchelle unifié

L'algorithme EF^2 hybride (cf. Algorithme III.2.2) est conceptuellement très proche de l'approche de raffinement adaptatif Local Defect Correction introduite au Chapitre III.1. Nous avons ainsi montré dans [KRL20] que l'approche LDC pouvait naturellement se décliner en une approche multimodèle pour permettre de coupler un modèle homogénéisé à l'échelle globale et un modèle adapté plus précis sur une zone locale d'intérêt. On retrouve ici un concept très proche des méthodes dites de couplage non intrusif telles que les méthodes « globales/locales » [Whitcomb, 1991 ; Gendre *et al.*, 2009 ; Passieux *et al.*, 2013 ; Gosselet *et al.*, 2018 ; ...].

La différence majeure alors entre les approches EF^2 hybride et LDC réside dans la notion de facteur d'échelle. Chaque méthode fait alors partie d'une classe différente d'approche multiéchelles [E, 2011], cf. figure III.2.10.

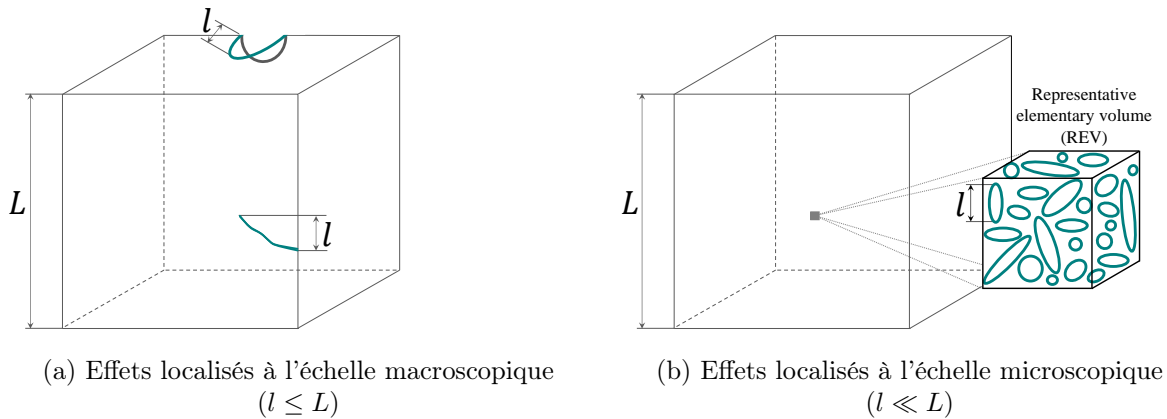


FIGURE III.2.10 – Deux classes de problèmes multiéchelles selon le facteur d'échelle l/L

Cependant algorithmiquement, ces approches de couplage numérique multiéchelle sont très proches [KRL20]. Elles sont basées sur un processus de résolution multiniveau itératif ayant pour but d'appeler à la volée des résolutions fines locales afin d'améliorer la solution globale. L'influence du facteur d'échelle intervient uniquement dans les phases de transfert d'information entre les niveaux, qui généralement portent un nom différent, cf. figure III.2.11.

Ainsi, l'étape de transfert du niveau global vers le niveau local dans l'approche LDC consiste à imposer des conditions de Dirichlet par projection de la solution globale, alors que pour l'approche EF^2 des conditions aux limites issues de la théorie de l'homogénéisation sont appliquées (voir par exemple [Kanit *et al.*, 2003]). À noter que dans un contexte EF^2 , ces conditions aux limites sont de type Dirichlet, cf. section III.2.2.b.

Concernant l'étape de transfert du niveau local vers le niveau global, les deux types d'approches

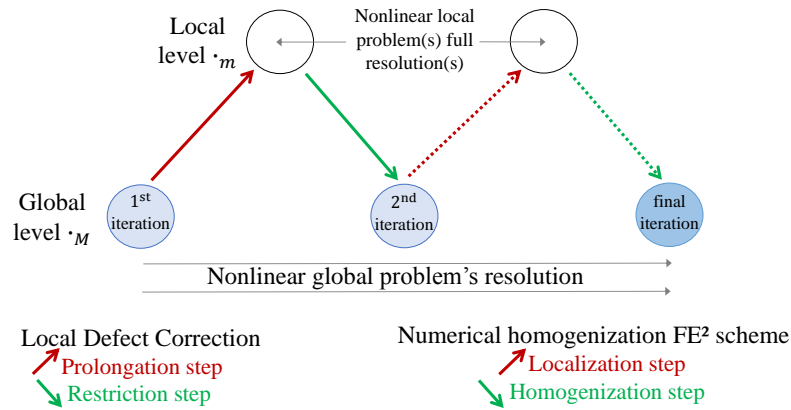


FIGURE III.2.11 – Algorithme générique de couplage multiéchelle à 2 niveaux

multiéchelles travaillent sur la correction du résidu global sur la zone de recouvrement. L’approche LDC consiste à remplacer les forces externes par des forces internes obtenues à partir de la solution fine restreinte. Le problème à minimiser est donc une différence de forces internes, ce qui revient à faire tendre la solution globale vers la solution fine sur la zone de recouvrement.

L’approche EF^2 consiste à remplacer les forces internes par celles obtenues via l’homogénéisation (moyennes volumiques) des contraintes sur le niveau local. Le problème global doit donc être à l’équilibre vis-à-vis des contraintes corrigées.

Le transfert d’information est ainsi porté par les variables primales (déplacements) pour LDC et par les variables duales (déformations/contraintes) pour EF^2 hybride.

Grâce à toutes ces similitudes conceptuelles, un formalisme unifié peut être introduit pour la résolution couplée multiéchelle de problèmes quasi-statiques non linéaires, cf. Algorithme III.2.4.

Algorithme III.2.4 : Algorithme de couplage numérique multiéchelle unifié

Pour $k = 1$ jusqu’à convergence

- Résoudre l’équilibre sur le niveau global
- Dans la/les zone(s) d’intérêt** Appel du modèle local
 - Transfert global \rightarrow local : Imposer des conditions aux limites de type Dirichlet sur la frontière du niveau local à partir de la solution globale (déplacement ou déformation)
 - Résolution complète du problème non linéaire (hétérogène) local, (cf. Algorithme III.2.1)
 - Transfert local \rightarrow global : évaluation de forces internes corrigées
- Appel à la relation constitutive (dans les régions requises)
- Mettre à jour le résidu
 - à partir des forces internes corrigées dans les zones d’intérêt
 - avec la procédure standard ailleurs (cf. Algorithme III.2.1)
- Tester la convergence

De nombreuses autres stratégies de couplages multiéchelles peuvent entrer ainsi dans ce formalisme [E et Engquist, 2003 ; Fish et Belsky, 1995 ; Passieux *et al.*, 2013 ; Gendre *et al.*, 2011 ; Geers *et al.*, 2017 ; Yvonnet *et al.*, 2020 ; ...].

Dans le cadre de l’homogénéisation, la méthode LDC peut être vue comme une approche de méso-homogénéisation tenant compte de phénomènes localisés à une échelle mésoscopique qui recouvre une partie de la structure.

III.2.5 Directions de recherche

De nombreuses perspectives s'ouvrent dans le domaine de l'homogénéisation numérique et notamment suite à la mise en place de l'algorithme EF^2 hybride proposé.

Tout d'abord, concernant l'algorithme EF^2 hybride lui-même, il serait intéressant d'étudier le comportement mécanique local et effectif dans des cas non couverts par l'homogénéisation analytique (comportements non linéaires complexes). Par ailleurs, nous envisageons de pouvoir activer des zones EF^2 en cours de calcul en fonction d'un indicateur donné et également de pouvoir disposer de VERs différents selon les endroits de la structure, représentatifs d'une microstructure différente. Dans le cas de l'irradiation en réacteur, cela prend tout son sens car la microstructure du combustible peut fortement varier spatialement.

Une prochaine étape importante de développement concerne la prise en compte dans l'algorithme multi-échelles de la fissuration/endommagement au niveau de la microstructure. Cet aspect est encore peu traité dans la littérature. La principale difficulté concerne la prise en compte pertinente de l'état de fissuration local dans les étapes de transfert entre échelles pour ne pas introduire notamment de dépendance de l'énergie dissipée à la taille de maille. La mise à disposition d'informations sur l'état local de fissuration du matériau est d'autant plus importante dans un contexte multiphysique, puisque des critères mécaniques locaux (fraction de joints de grain fracturés, taille de l'ouverture des fractures,...) pourraient servir à améliorer la prédictivité de certains autres modèles physiques (cf. relâchement des gaz de fission). Cela soulève également la question d'un couplage multiphysique à l'échelle du VER puisqu'une résolution thermique locale permettrait certainement de mieux prédire notamment la fusion locale en cas d'hétérogénéité de terme source.

L'objet de la thèse de L. Belgrand, qui a commencé en décembre 2020, est de s'intéresser à une approche EF^2 hybride thermo-mécanique. Dans le cas thermique on s'intéressera à des termes sources hétérogènes, ce qui d'après les approches asymptotiques [Blanc, 2009] nécessite d'aller à l'ordre 2 pour bien appréhender le comportement local. Étant donné que l'approche EF^2 est nativement à l'ordre 1, nous allons travailler sur la conservation locale du terme source et éventuellement sur des conditions aux limites d'ordre plus élevé au bord du VER [Kouznetsova *et al.*, 2002 ; Yvonnet *et al.*, 2020], afin d'augmenter l'ordre de l'estimation EF^2 .

Au niveau des performances numériques, même si l'algorithme hybride EF^2 proposé rend cette stratégie de couplage multi-échelles raisonnable en terme de temps de calcul (environ un facteur 10 par rapport au calcul uniquement homogénéisé), les coûts de calcul liés à la résolution de l'équilibre sur la microstructure par une méthode éléments finis (même avec une méthode itérative performante) encouragent à s'intéresser à des méthodes de type FFT (transformée de Fourier rapide), reconnues pour leur efficacité numérique sur des calculs de VERs périodiques [El Shawish *et al.*, 2020]. Étant donné que la limitation de ces approches concernant le traitement de la fissuration locale commence à être levée [Chen *et al.*, 2020], cela permet d'envisager les mêmes objectifs que ceux précédemment cités. On aurait donc dans ce cas une approche EF^{FFT} , comme cela commence à être étudié [Spahn *et al.*, 2014 ; Kochmann *et al.*, 2018].

Concernant les effets de bords plus importants pour des conditions de type déformations homogènes, il est à noter que dans [Largenton *et al.*, 2014], un caractère polymodal de l'histogramme de répartition de la phase inclusionnaire est retrouvé pour certains types de chargement alors des CLs périodiques sont appliquées (et une résolution par FFT). Les effets de bord semblent donc également sensibles au type de chargement appliqué au VER. Cette hypothèse est à consolider notamment vis-à-vis de la représentativité du VER, qui doit également s'appuyer sur une stationnarité du comportement local et non seulement du comportement effectif.

Concernant le formalisme générique d'algorithmes de couplage multiéchelle proposé dans le cadre de la mécanique non linéaire des solides, il serait intéressant d'explorer l'intersection des deux grandes classes de méthodes multiéchelles, à savoir raffinement adaptatif de maillage et homogénéisation numérique. Des questions relatives au niveau de détails accessible en AMR et

la taille maximale du VER se posent. Obtiendrait-on la même solution, à coût comparable si le même niveau de détails pouvait être représenté par les 2 approches ?

Cela rejoint une question plus globale de la validité des méthodes d'homogénéisation numérique classiques lorsque l'hypothèse de séparation d'échelle n'est plus vérifiée notamment en cas de problèmes non locaux, où des effets du gradient de déformations sont à prendre en compte. Les approches récentes autour de l'homogénéisation numérique à l'ordre 2 [Geers *et al.*, 2017 ; Wangermez *et al.*, 2020 ; Yvonnet *et al.*, 2020] ont été développées pour répondre à cette problématique. Elles sont très proches des stratégies de raffinement de maillage adaptatif multimodèle, tant au niveau algorithmique que dans la représentation des zones de détails. La différence principale réside une fois encore dans les opérateurs de transfert entre niveaux. Grâce à l'algorithme multiéchelle unifié proposé, il serait intéressant de voir si on peut simuler un phénomène initié ou initialement localisé à l'échelle microstructurale mais de taille potentiellement croissante avec le temps. Le passage d'un micro-endommagement à un défaut macroscopique semble un exemple parfait.

CHAPITRE IV

PERSPECTIVES GÉNÉRALES

Ce manuscrit permet de retracer la majeure partie de mes contributions scientifiques de ces dix dernières années. Ces travaux sont à l'intersection entre la communauté des mathématiques appliquées et celle de la mécanique numérique. Ils portent principalement sur la mise en place de méthodes numériques efficaces et innovantes pour les couplages multiphysiques et multiéchelles autour de la mécanique des solides quasi-statique et non linéaire.

Cinq axes de recherches ont été abordés : accélération de convergence des suites de point fixe vectorielles, réduction d'ordre de modèle en mécanique du contact, modélisation multiphysique de phénomènes de migration sous gradient thermique, raffinement adaptatif de maillage multi-niveau et homogénéisation numérique par approche de type éléments finis au carré. Pour chacun de ces axes, des directives de recherche ont été détaillées. Elles abordent les méthodes numériques elle-mêmes mais également des perspectives de simulation de phénomènes physiques de plus en plus complexes, notamment en mécanique des solides le contact/frottement, l'endommagement/fissuration, les hétérogénéités ou défauts de structure et les phénomènes fortement couplés.

D'un point de vue numérique, une de mes ambitions actuelles est la portabilité des méthodes numériques avancées dans un contexte HPC (High Performance Computing). Dans ce cadre, je m'intéresse tout particulièrement à la mise en place de méthodes parallèles de raffinement multiniveau adaptatif de maillage pour la mécanique 3D non linéaire. Une thèse, dont je suis co-encadrante, devrait démarrer sur le sujet en 2021. Il s'agira d'étendre et d'adapter dans un environnement HPC les méthodes multigrilles locales (de type Local Defect Correction) étudiées jusqu'ici principalement en séquentiel.

Je ne l'ai pas abordé dans ce manuscrit mais dans cette problématique de « diviser pour mieux régner » (divide-to-conquer), nous nous intéressons également à la mise en place de méthodes de décomposition de domaine pour la mécanique du contact. C'est un sujet de recherche toujours actif, notamment lorsque les zones de contact évoluent au cours du temps et peuvent se situer à l'interface ou sur la zone de recouvrement entre les domaines. Nous avons pu proposer un algorithme original qui reste encore à consolider sur des situations industrielles complexes. La question de la répartition de la charge de calcul pour ce type de méthodes est également un sujet crucial à regarder.

Toujours concernant le contact/frottement, je continue à m'intéresser à sa résolution par des approches d'hyper-réduction d'ordre de modèle sur base POD (Proper Orthogonal Decomposition), notamment avec une thèse démarrée sur le sujet en 2020 en collaboration avec les Mines de Paris. Un projet de recherche concerne l'extension de ces approches lorsque l'espace paramétrique varie fortement au cours du temps. Des bases réduites locales en temps doivent alors être considérées. La continuité entre les différents modèles réduits et variables associées est à étudier, surtout en présence de contact. Dans l'optique de pouvoir simuler en des temps de calculs encore plus courts, à portée industrielle, j'envisage de m'intéresser également à des approches de type deep learning à base de réseaux de neurones pour le contact/frottement, avec un projet de thèse en 2022.

D'un point de vue plus physique, les méthodes de couplages multiéchelles proposées dans ces travaux doivent permettre de s'intéresser à des problèmes physiques de plus en plus complexes. Avec les collègues du laboratoire commun MISTRAL entre le CEA et le LMA de Marseille, nous envisageons de travailler sur l'application des approches multigrilles locales pour simuler finement le contact local apparaissant entre des structures élancées sous flux vibratoire. Les struc-

tures seraient représentées par un modèle de type poutre équivalente à l'échelle globale tandis que l'échelle locale se focaliserait autour des zones de contact et une résolution par éléments finis y serait appliquée.

Par ailleurs, l'algorithme générique de couplage numérique multiéchelle proposé, quasiment transparent aux facteurs d'échelle considérés, m'incite à vouloir appliquer cette stratégie à la simulation de phénomènes dont les facteurs d'échelles évoluent dans le temps. Par exemple, le cas d'une hétérogénéité de taille croissante sur le temps, typiquement le passage d'un micro-endommagement à un défaut macroscopique, est un cas réel stimulant.

Une autre perspective qui me tient à cœur est de mêler couplages multiphysiques et multiéchelles. J'ai déjà pu commencé à m'y intéresser, comme expliqué dans la dernière partie du document, où un calcul mécanique à deux échelles a pu être mis en place dans un schéma partitionné multiphysique impliquant thermique, physico-chimie et mécanique. Les résultats sont vraiment prometteurs et nous continuons à avancer dans ce sens pour gagner en prédictibilité et lever les empirismes. La thèse débutée en décembre 2020, que je co-encadre avec le LMA de Marseille (dans le cadre du LabCOM MISTRAL), sur le couplage thermo-mécanique à deux échelles devrait permettre de voir l'effet des interactions multiphysiques microstructurales sur le comportement effectif.

La voie de recherche que je suis de façon plus générale est la mise en place de calculs industriels robustes toujours plus prédictifs et en des temps de calculs raisonnables. Les apports de la simulation numérique doivent rester au plus près de la physique afin de réduire les conservatismes, de ramener et prioriser l'expérimentation au juste besoin, de pallier le manque de données de validation notamment lorsque l'expérience est inaccessible et d'optimiser l'exploitation de procédés et d'installations par l'utilisation de jumeaux numériques. Cela passe nécessairement par la possibilité d'effectuer des calculs couplés multiphysiques et multiéchelles dans des situations réelles, donc complexes et fortement non linéaires. Les méthodes numériques de demain devront pouvoir répondre à ce challenge. Avec l'augmentation de la puissance des serveurs de calculs, des simulations complètes à des échelles plus fines seront bientôt accessibles. Mais à ce moment-là, ce sera déjà l'échelle au-dessous qui nous intéressera et les méthodes de couplages multiéchelles proposées resteront d'intérêt même si elles seront certainement à adapter.

De façon plus transverse, ma formation en mathématiques appliquées et mon parcours professionnel m'ont permis de côtoyer différentes communautés. Je veux pouvoir continuer à travailler sur l'adaptation de méthodes numériques avancées dans un domaine qui n'était pas forcément celui de leur origine. C'est le cas par exemple pour l'adaptation à la mécanique des solides des méthodes multigrilles locales développées initialement en mécanique des fluides mais également l'application des méthodes d'accélération de point fixe pour le génie chimique. Être à l'interface de plusieurs domaines scientifiques est très instructif car cela me permet de travailler avec des chercheurs aux compétences complémentaires et ainsi d'enrichir les techniques numériques en les confrontant aux différentes problématiques physiques. Les possibilités offertes sont alors nombreuses et de nouvelles idées vont certainement émerger en lien avec l'avancée des simulations réalisables.

Bibliographie de l'auteure

Les travaux listés ci-dessous sont uniquement ceux cités dans la partie « Travaux de recherche ». Une liste exhaustive de mes publications et communications est disponible dans la section [Liste de publications](#) en page xvii.

- [BRL14] BARBIÉ L., RAMIÈRE I. et LEBON F. . Strategies around the Local Defect Correction multi-level refinement method for three-dimensional linear elastic problems. *Computers and Structures*, 130:73–90, 2014. Cité aux pages 9, 64, 65, 66, 68, 69 et 75.
- [BRL15] BARBIÉ L., RAMIÈRE I. et LEBON F. . An automatic multilevel refinement technique based on nested local meshes for nonlinear mechanics. *Computers and Structures*, 147:14–25, 2015. Cité aux pages 9, 77.
- [BRM22] BARANI T., RAMIÈRE I. et MICHEL B. . Analysis of fabrication and crack-induced porosity migration in mixed oxide fuels for sodium fast reactors by the finite element method. *Journal of Nuclear Materials*, 558:153341, 2022. Cité à la page 55.
- [FRR18] FAUQUE J., RAMIÈRE I. et RYCKELYNCK D. . Hybrid hyper-reduced modeling for contact mechanics problems. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 115(1):117–139, 2018. Cité aux pages 8, 30, 33, 35 et 37.
- [FRR21] FAUQUE J., RAMIÈRE I. et RYCKELYNCK D. . Hybrid hyper-reduced modeling for non-linear materials in contact. *in preparation*, 2021. Cité aux pages 8, 30, 35 et 39.
- [KRL20] KOLIESNIKOVA D., RAMIÈRE I. et LEBON F. . Analytical comparison of two multiscale coupling methods for nonlinear solid mechanics. *Journal of Applied Mechanics*, 87(9):094501, 2020. Cité aux pages 10, 96.
- [KRL21a] KOLIESNIKOVA D., RAMIÈRE I. et LEBON F. . A unified framework for the computational comparison of adaptive mesh refinement strategies for all-quadrilateral and all-hexahedral meshes : locally adaptive multigrid methods versus h-adaptive methods. *Journal of Computational Physics*, 437:110310, 2021. Cité aux pages 9, 70.
- [KRL21b] KOLIESNIKOVA D., RAMIÈRE I. et LEBON F. . Fully automatic multigrid adaptive mesh refinement strategy with controlled accuracy for nonlinear quasi-static problems. *in preparation*, 2021. Cité à la page 80.
- [LMD⁺19] LAINET M., MICHEL B., DUMAS J.-C., PELLETIER M. et RAMIÈRE I. . GERMINAL, a fuel performance code of the PLEIADES platform to simulate the in-pile behaviour of mixed oxide fuel pins for sodium-cooled fast reactors. *Journal of Nuclear Materials*, 516:30 – 53, 2019. Cité aux pages 7, 8, 14, 45, 49 et 50.
- [LRL17] LIU H., RAMIÈRE I. et LEBON F. . On the coupling of local multilevel mesh refinement and ZZ methods for unilateral frictional contact problems in elastostatics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 323:1–26, 2017. Cité aux pages 9, 68 et 74.
- [MGB⁺16] MARELLE V., GOLDBRONN P., BERNAUD S., CASTELIER E., JULIEN J., NKONGA K., NOIROT L. et RAMIÈRE I. . New developments in ALCYONE 2.0 fuel performance code. *In Top Fuel 2016 - Light Water Reactor (LWR) Fuel Performance Meeting*, Boise, United States, septembre 2016. Cité aux pages 7, 8 et 16.

- [MHRE18] MICHEL B., HELFER T., RAMIÈRE I. et ESNOUL C. . A new numerical methodology for simulation of unstable crack growth in time independent brittle materials. *Engineering Fracture Mechanics*, 188:126 – 150, 2018. Cité aux pages 40, 87.
- [MRV⁺21] MICHEL B., RAMIÈRE I., VIALARD I., INTROINI C., LAINET M., CHAUVIN N., MARRELLE V., BOULORE A., HELFER T., MASSON R., SERCOMBE J., DUMAS J., NOIROT L. et BERNAUD S. . Chapter 9 - Two fuel performance codes of the PLEIADES platform : ALCYONE and GERMINAL, In WANG J., LI X., ALLISON C. et HOHORST J., éditeurs . *Nuclear Power Plant Design and Analysis Codes : Development, Validation, and Application*, chapitre 9, pages 207–233. Woodhead Publishing Series in Energy. Woodhead Publishing, 2021. Cité aux pages 7, 8 et 16.
- [RAB07] RAMIÈRE I., ANGOT P. et BELLIARD M. . A fictitious domain approach with spread interface for elliptic problems with general boundary conditions. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 196(4-6):766–781, 2007. Cité à la page 63.
- [Ram08] RAMIÈRE I. . Convergence analysis of the Q_1 -finite element method for elliptic problems with non-boundary-fitted meshes. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 75(9):1007–1052, 2008. Cité à la page 65.
- [Ram10] RAMIÈRE I. . État de l’art des algorithmes de couplage multi-physique dans les applications de la plate-forme PLEIADES. Note technique DEN/DEC/SESC/LSC/10-013, CEA, Mars 2010. Cité à la page 14.
- [RB12] RAMIÈRE I. et BERNAUD S. . Vers la mutualisation des schémas de couplage de la plateforme PLEIADES. Note technique DEN/CAD/DEC/SESC/LSC/12-028, CEA, Novembre 2012. Cité à la page 16.
- [RBM17] RAMIÈRE I., BERNAUD S. et MASSON R. . Mise en place d’un schéma de calcul mécanique à deux échelles (EF^2) dans PLEIADES V2. Note technique DEN/CAD/DEC/SESC/LSC/17-015, CEA, août 2017. Cité aux pages 88, 92.
- [RH15] RAMIÈRE I. et HELFER T. . Iterative residual-based vector methods to accelerate fixed point iterations. *Computers and Mathematics with Applications*, 70(9):2210 – 2226, 2015. Cité aux pages 8, 19, 23, 24, 26 et 87.
- [RLL19] RAMIÈRE I., LIU H. et LEBON F. . Original geometrical stopping criteria associated to multilevel adaptive mesh refinement for problems with local singularities. *Computational Mechanics*, 64(3):645–661, 2019. Cité aux pages 9, 69 et 72.
- [RLR⁺21] RUIZ C., LEBAZ N., RAMIÈRE I., MANGIN D. et BERTRAND M. . Fixed point convergence and acceleration for steady state population balance modelling of precipitation processes : application to neodymium oxalate. *submitted*, juillet 2021. Cité à la page 27.
- [RMB21] RAMIÈRE I., MASSON R. et BERNAUD S. . A full-field multiscale mechanical resolution within a multiphysics coupling scheme for heterogeneous material behaviour simulation. *in preparation*, 2021. Cité aux pages 10, 88, 89, 90 et 92.
- [RMMB17] RAMIÈRE I., MASSON R., MICHEL B. et BERNAUD S. . Un schéma de calcul multi-échelles de type Éléments Finis au carré pour la simulation de combustibles nucléaires hétérogènes. In *13e colloque national en calcul des structures*, numéro 126623, Giens, Var, France, 2017. Université Paris-Saclay, May 2017, Giens, Var, France. Cité aux pages 10, 87, 88, 90 et 91.
- [TMRF20] TEMMAR M., MICHEL B., RAMIÈRE I. et FAVRIE N. . Multi-physics modelling of the pellet-to-cladding gap closure phenomenon for SFR fuel performance codes. *Journal of Nuclear Materials*, 529:151909, 2020. Cité aux pages 9, 45, 46, 48, 50 et 51.

Bibliographie générale

- [Abide *et al.*, 2016] ABIDE S., BARBOTEU M. et DANAN D. (2016). Analysis of two active set type methods to solve unilateral contact problems. *Applied Mathematics and Computation*, 284(C):286–307. Cité aux pages [32](#), [74](#).
- [Ainsworth et Oden, 2011] AINSWORTH M. et ODEN J. (2011). *A posteriori error estimation in finite element analysis*. John Wiley & Sons. Cité à la page [67](#).
- [Aitken, 1926] AITKEN A. C. (1926). On Bernoulli's numerical solution of algebraic equations. *Proc. Roy. Soc. Edinburgh*, 46:289–305. Cité aux pages [14](#), [15](#), [19](#) et [20](#).
- [Alart et Curnier, 1991] ALART P. et CURNIER A. (1991). A mixed formulation for frictional contact problems prone to newton like solution methods. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 92(3):353–375. Cité à la page [73](#).
- [Allaire, 1992] ALLAIRE G. (1992). Homogenization and two-scale convergence. *SIAM Journal on Mathematical Analysis*, 23(6):1482–1518. Cité à la page [83](#).
- [Ammar *et al.*, 2006] AMMAR A., MOKDAD B., CHINESTA F. et KEUNINGS R. (2006). A new family of solvers for some classes of multidimensional partial differential equations encountered in kinetic theory modeling of complex fluids. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 139(3):153 – 176. Cité à la page [29](#).
- [Anderson, 1965] ANDERSON D. G. (1965). Iterative procedures for nonlinear integral equations. *Journal of the Association for Computing Machinery*, 12(4):547–560. Cité aux pages [14](#), [15](#), [19](#), [20](#) et [22](#).
- [Angot *et al.*, 1992] ANGOT P., CALTAGIRONE J. et KHADRA K. (1992). Une méthode adaptative de raffinement local : la Correction de Flux à l'Interface. *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences de Paris*, 315:739–745. Cité à la page [60](#).
- [Anthonissen *et al.*, 2005] ANTHONISSEN M., BENNET B. et SMOOKE M. (2005). An adaptive multilevel local defect correction technique with application to combustion. *Combustion Theory and Modelling*, 9:273–299. Cité à la page [64](#).
- [Armstrong *et al.*, 2019] ARMSTRONG S., KUUSI T. et MOURRAT J.-C. (2019). *Quantitative stochastic homogenization and large-scale regularity*, volume 352 de *Grundlehren der Mathematischen Wissenschaften [Fundamental Principles of Mathematical Sciences]*. Springer, Cham. Cité à la page [83](#).
- [Askes et Rodriguez-Ferran, 2001] ASKES H. et RODRIGUEZ-FERRAN A. (2001). A combined r-adaptive scheme based on domain subdivision. Formulation and linear examples. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 51(3):253–273. Cité à la page [59](#).
- [Babuška, 1973] BABUŠKA I. (1973). The finite element method with Lagrangian multipliers. *Numerische Mathematik*, 20(3):179–192. Cité aux pages [32](#), [35](#).
- [Babuška *et al.*, 1997] BABUŠKA I., STROUBOULIS T., GANGARAJ S. et UPADHYAY C. (1997). Pollution error in the h-version of the finite element method and the local quality of the recovered derivatives. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 140(1):1–37. Cité à la page [63](#).
- [Babuška et Suri, 1987] BABUŠKA I. et SURI M. (1987). The optimal convergence rate of the p-version of the finite-element method. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 24(4):750–776. Cité à la page [59](#).
- [Babuska *et al.*, 1981] BABUSKA I., SZABO B. et KATZ I. (1981). The p-version of the finite element method. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 18(3):515–545. Cité aux pages [59](#), [60](#).
- [Babuška et Szabo, 1982] BABUŠKA I. et SZABO B. (1982). On the rates of convergence of the Finite Element method. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 18(3):323–341. Cité à la page [60](#).

- [Babuška et Rheinboldt, 1978] BABUŠKA I. et RHEINBOLDT W. C. (1978). A-posteriori error estimates for the finite element method. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 12(10):1597–1615. Cité à la page 67.
- [Bader et al., 2016] BADER E., ZHANG Z. et VEROY K. (2016). An empirical interpolation approach to reduced basis approximations for variational inequalities. *Mathematical and Computer Modelling of Dynamical Systems*, 22(4):345–361. Cité à la page 38.
- [Bai et Brandt, 1987] BAI D. et BRANDT A. (1987). Local mesh refinement multilevel techniques. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, 8(2):109–134. Cité à la page 59.
- [Baiges et al., 2013] BAIGES J., CODINA R. et IDELSON S. (2013). A domain decomposition strategy for reduced order models. Application to the incompressible Navier-Stokes equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 267:23–42. Cité à la page 35.
- [Bailly et al., 1997] BAILLY H., MÉNESSIER D. et PRUNIER C. (1997). *Le combustible nucléaire des réacteurs à eau sous pression et des réacteurs à neutrons rapides : conception et comportement*. Collection du Commissariat à l'énergie Atomique. Eyrolles. Cité aux pages 5, 45 et 46.
- [Balajewicz et al., 2016] BALAJEWICZ M., AMSALLEM D. et FARHAT C. (2016). Projection-based model reduction for contact problems. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 106(8):644–663. Cité aux pages 33, 38.
- [Ballani et al., 2018] BALLANI J., HUYNH D., KNEZEVIC D., NGUYEN L. et PATERA A. (2018). A component-based hybrid reduced basis/finite element method for solid mechanics with local nonlinearities. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 329:498–531. Cité à la page 35.
- [Bank et al., 1983] BANK R., SHERMAN A. et WEISER A. (1983). Some refinement algorithms and data structures for regular local mesh refinement. *Scientific Computing, Applications of Mathematics and Computing to the Physical Sciences*, 1:3–17. Cité aux pages 68, 69.
- [Barbié, 2013] BARBIÉ L. (2013). *Raffinement de maillage multi-grille local en vue de la simulation 3D du combustible nucléaire des Réacteurs à Eau sous Pression*. Thèse, Aix-Marseille Université. Cité aux pages 9, 64, 67, 68, 76, 79 et 81.
- [Barrault et al., 2004] BARRAULT M., MADAY Y., NGUYEN N. C. et PATERA A. (2004). An 'empirical interpolation' method : application to efficient reduced-basis discretization of partial differential equations. *Comptes Rendus Mathématique*, 339(9):667–672. Cité à la page 30.
- [Belliard et Grandotto, 2003] BELLIARD M. et GRANDOTTO M. (2003). Local zoom computation of two-phase flows in steam generators using a local defect correction method. *Numerical Heat Transfer - Part A Applications*, 43(2):111–135. Cité aux pages 64, 76.
- [Belytschko et Tabbara, 1993] BELYTSCHKO T. et TABBARA M. (1993). H-adaptive finite-element methods for dynamic problems, with emphasis on localization. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 36(24):4245–4265. Cité à la page 59.
- [Ben Dhia, 1998] BEN DHIA H. (1998). Problèmes mécaniques multi-échelles : la méthode Arlequin. *Comptes rendus de l'Académie des Sciences de Paris Série II b*, 326:899–904. Cité aux pages 59, 89.
- [Bensoussan et al., 1979] BENSOUSSAN A., LIONS J.-L. et PAPANICOLAOU G. (1979). *Asymptotic analysis for periodic structures*. AMS Chelsea Publishing, Providence, RI. Cité à la page 83.
- [Berger et Colella, 1989] BERGER M. et COLELLA P. (1989). Local adaptive mesh refinement for shock hydrodynamics. *Journal of Computational Physics*, 82:64–84. Cité aux pages 76, 81.
- [Berger et Olinger, 1984] BERGER M. et OLIGER J. (1984). Adaptive mesh refinement for hyperbolic partial differential equations. *Journal of Computational Physics*, 53(3):484–512. Cité aux pages 59, 60, 76 et 81.
- [Besson et al., 2009] BESSON J., CAILLETAUD G., CHABOCHE J.-L. et FOREST S. (2009). *Non-linear mechanics of materials*, volume 167. Springer Science & Business Media. Cité à la page 86.

- [Biboulet *et al.*, 2013] BIBOULET N., GRAVOUIL A., DUREISSEIX D., LUBRECHT A. et COMBESCURE A. (2013). An efficient linear elastic FEM solver using automatic local grid refinement and accuracy control. *Finite Elements in Analysis and Design*, 68:28–38. Cité à la page 64.
- [Biotteau *et al.*, 2010] BIOTTEAU E., GRAVOUIL A., LUBRECHT A. et COMBESCURE A. (2010). Multigrid solver with automatic mesh refinement for transient elastoplastic dynamic problems. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 84(8):947–971. Cité aux pages 64, 68 et 76.
- [Biotteau *et al.*, 2012] BIOTTEAU E., GRAVOUIL A., LUBRECHT A. et COMBESCURE A. (2012). Three dimensional automatic refinement method for transient small strain elastoplastic finite element computations. *Computational Mechanics*, 49(1):123–136. Cité aux pages 76, 78.
- [Blanc, 2009] BLANC V. (2009). *Modélisation du comportement thermomécanique des combustibles à particules par une approche multi-échelle*. Thèse de doctorat, Université de Provence. Cité à la page 98.
- [Bornert *et al.*, 2001] BORNERT M., BRETTEAU T. et GILORMINI P. (2001). *Homogénéisation en mécanique des matériaux*. Hermes Science Europe. Cité aux pages 92, 94.
- [Brandt, 1977] BRANDT A. (1977). Multi-level adaptive solutions to boundary-value problems. *Mathematics of Computation*, 31(138):333–390. Cité aux pages 59, 62 et 63.
- [Brezinski, 2000] BREZINSKI C. (2000). Convergence acceleration during the 20th century. *Journal of Comput. Appl. Math.*, 122:1–21. Cité à la page 14.
- [Brezinski et Chehab, 1998] BREZINSKI C. et CHEHAB J.-P. (1998). Nonlinear hybrid procedures and fixed point iterations. *Numerical Functional Analysis and Optimization*, 19(5-6):465–487. Cité aux pages 14, 19 et 21.
- [Brezinski et Redivo Zaglia, 1991] BREZINSKI C. et REDIVO ZAGLIA M. (1991). *Extrapolation Methods : Theory and Practice*. North Holland. Cité aux pages 14, 19 et 20.
- [Brezzi, 1974] BREZZI F. (1974). On the existence, uniqueness and approximation of saddle-point problems arising from Lagrangian multipliers. *ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis - Modélisation Mathématique et Analyse Numérique*, 8(R2):129–151. Cité aux pages 32, 35.
- [Brooks et Hughes, 1982] BROOKS A. N. et HUGHES T. J. (1982). Streamline upwind/petrov-galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible navier-stokes equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 32(1):199 – 259. Cité à la page 55.
- [Cao *et al.*, 2001] CAO W., HUANG W. et RUSSELL R. (2001). Comparison of two-dimensional r-adaptive finite element methods using various error indicators. *Mathematics and Computers in Simulation*, 56:127–143. Cité à la page 59.
- [Cast3M] CAST3M. <http://www-cast3m.cea.fr>. Cité aux pages 38, 40, 49, 61, 74 et 89.
- [Cattaneo *et al.*, 2021] CATTANEO P., LENAIN R., MERLE E., PATRICOT C. et SCHNEIDER D. (2021). Numerical optimization of a multiphysics calculation scheme based on partial convergence. *Annals of Nuclear Energy*, 151:107892. Cité à la page 27.
- [Cavin *et al.*, 2005] CAVIN P., GRAVOUIL A., LUBRECHT A. et COMBESCURE A. (2005). Efficient FEM calculation with predefined precision through automatic grid refinement. *Finite Elements in Analysis and Design*, 41:1043–1055. Cité à la page 60.
- [Chaboche, 1989] CHABOCHE J. L. (1989). Constitutive equations for cyclic plasticity and cyclic viscoplasticity. *International Journal of Plasticity*, 5(3):247–302. Cité à la page 24.
- [Chaboche, 1993] CHABOCHE J. L. (1993). Cyclic viscoplastic constitutive equations. *Journal of Applied Mechanics*, 60.:813–828. Cité à la page 24.
- [Chabrand *et al.*, 1998] CHABRAND P., DUBOIS F. et RAOUS M. (1998). Various numerical methods for solving unilateral contact problems with friction. *Mathematical and computer modelling*, 28(4):97–108. Cité à la page 32.

- [Chaturantabut et Sorensen, 2010] CHATURANTABUT S. et SORENSEN D. C. (2010). Nonlinear model reduction via discrete empirical interpolation. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 32(5):2737–2764. Cité aux pages 30, 33.
- [Chen *et al.*, 2020] CHEN Y., GÉLÉBART L., CHATEAU C., BORNERT M., KING A., SAUDER C. et AIMEDIEU P. (2020). Crack initiation and propagation in braided sic/sic composite tubes : Effect of braiding angle. *Journal of the European Ceramic Society*, 40(13):4403–4418. Cité à la page 98.
- [Chen *et al.*, 2019] CHEN Y., GÉLÉBART L., CHATEAU C., BORNERT M., SAUDER C. et KING A. (2019). Analysis of the damage initiation in a sic/sic composite tube from a direct comparison between large-scale numerical simulation and synchrotron x-ray micro-computed tomography. *International Journal of Solids and Structures*, 161:111 – 126. Cité à la page 26.
- [Chinesta *et al.*, 2013] CHINESTA F., KEUNINGS R. et LEYGUE A. (2013). *The proper generalized decomposition for advanced numerical simulations : a primer*. Springer Science & Business Media. Cité à la page 29.
- [Coorevits *et al.*, 1995] COOREVITS P., LADEVÈZE P. et PELLE J.-P. (1995). An automatic procedure with a control of accuracy for finite element analysis in 2D elasticity. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 121(1):91 – 120. Cité aux pages 68, 69.
- [Cordero-Grande, 2020] CORDERO-GRANDE L. (2020). Mixandmix : numerical techniques for the computation of empirical spectral distributions of population mixtures. *Computational Statistics & Data Analysis*, 141:1 – 11. Cité à la page 26.
- [Coulomb, 1785] COULOMB C. (1785). Théorie de machines simples. *Mémoire de Mathématiques et Physique de l'Académie Royale*, 10:161–342. Cité à la page 72.
- [Daniel *et al.*, 2018] DANIEL P., ERN A., SMEARS I. et VOHRALÍK M. (2018). An adaptive hp-refinement strategy with computable guaranteed bound on the error reduction factor. *Computers & Mathematics with Applications*, 76(5):967–983. Cité à la page 80.
- [Degroote *et al.*, 2009] DEGROOTE J., BATHE K.-J. et VIERENDEELS . (2009). Performance of a new partitioned procedure versus a monolithic procedure in fluid-structure interaction. *Computers and Structures*, 87:793–801. Cité aux pages 20, 22.
- [Demkowicz *et al.*, 1985] DEMKOWICZ L., DEVLOO P. et ODEN J. (1985). On a h-type mesh-refinement strategy based on minimization of interpolation errors. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 53(1):67–89. Cité à la page 59.
- [Demkowicz *et al.*, 1989] DEMKOWICZ L., ODEN J., RACHOWICZ W. et HARDY O. (1989). Toward a universal h-p adaptive finite-element strategy - 1. Constrained approximation and data structure. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 77(1-2):79–112. Cité à la page 59.
- [Di Pietro *et al.*, 2014] DI PIETRO D. A., VOHRALIK M. et YOUSEF S. (2014). An a posteriori-based, fully adaptive algorithm with adaptive stopping criteria and mesh refinement for thermal multiphase compositional flows in porous media. *Computers and Mathematics with Applications*, 68(12, Part B):2331 – 2347. Advances in Computational Partial Differential Equations. Cité à la page 80.
- [Díez et Huerta, 1999] DÍEZ P. et HUERTA A. (1999). A unified approach to remeshing strategies for finite element h-adaptivity. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 176:215–229. Cité à la page 59.
- [Duval *et al.*, 2018] DUVAL M., LOZINSKI A., PASSIEUX J. et SALAÜN M. (2018). Residual error based adaptive mesh refinement with the non-intrusive patch algorithm. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 329:118–143. Cité à la page 60.
- [Duvaut, 1984] DUVAUT G. (1984). Homogénéisation matériaux composites. In CIARLET P. G. et ROSEAU M., éditeurs : *Trends and Applications of Pure Mathematics to Mechanics*, pages 35–62, Berlin, Heidelberg. Springer Berlin Heidelberg. Cité à la page 83.

- [Duvaut et Lions, 1976] DUVAUT G. et LIONS J.-L. (1976). *Inequalities in mechanics and physics*. Springer Science & Business Media. Cité à la page 31.
- [E, 2011] E W. (2011). *Principles of multiscale modelling*. Cambridge University Press, Cambridge, UK. Cité aux pages 83, 96.
- [E et Engquist, 2003] E W. et ENGQUIST B. (2003). The heterogeneous multiscale methods. *Communications in Mathematical Sciences*, 1:87–132. Cité aux pages 83, 86 et 97.
- [Eckart et Young, 1936] ECKART C. et YOUNG G. (1936). The approximation of one matrix by another of lower rank. *Psychometrika*, 1(3):211–218. Cité à la page 29.
- [Eddy, 1979] EDDY R. P. (1979). Extrapolation to the limit of a vector sequence. *P.C.C. Wang (Ed.), Information Linkage Between Applied Mathematics and Industry*, Academic Press, New York, pages 387–396. Cité aux pages 19, 20.
- [Efendiev et Hou, 2009] EFENDIEV Y. et HOU T. (2009). *Multiscale Finite Element Methods : Theory and Applications*. Springer. Cité aux pages 83, 84.
- [Eidel et Fischer, 2018] EIDEL B. et FISCHER A. (2018). The heterogeneous multiscale finite element method for the homogenization of linear elastic solids and a comparison with the FE² method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 329:332–368. Cité à la page 86.
- [El Abdi, 2021] EL ABDI A. (2021). *Génération 3D aléatoire de microstructures de combustibles nucléaires MOX et homogénéisation mécanique*. Thèse de doctorat, Aix-Marseille Université. Cité à la page 89.
- [El Shawish *et al.*, 2020] EL SHAWISH S., VINCENT P.-G., MOULINEC H., CIZELJ L. et GÉLÉBART L. (2020). Full-field polycrystal plasticity simulations of neutron-irradiated austenitic stainless steel : A comparison between fe and fft-based approaches. *Journal of Nuclear Materials*, 529:151927. Cité à la page 98.
- [Erbts et Düster, 2012] ERBTS P. et DÜSTER A. (2012). Accelerated staggered coupling schemes for problems of thermoelasticity at finite strains. *Computers and Mathematics with Applications*, 64:2408–2430. Cité à la page 15.
- [Erbts *et al.*, 2014] ERBTS P., HARTMANN S. et DÜSTER A. (2014). A partitioned solution approach for electro-thermo-mechanical problems. *Archive of Applied Mechanics*, pages 1–27. Cité aux pages 15, 17.
- [Eshelby, 1959] ESHELBY J. D. (1959). The elastic field outside an ellipsoidal inclusion. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 252(1271):561–569. Cité à la page 83.
- [Eyert, 1996] EYERT V. (1996). A comparative study on methods for convergence acceleration of iterative vector sequences. *Journal of Computational Physics*, 124:271–285. Cité aux pages 14, 22.
- [Fang et Saad, 2009] FANG H. et SAAD Y. (2009). Two classes of multiseccant methods for nonlinear acceleration. *Numerical Linear Algebra with Applications*, 16:197–221. Cité aux pages 14, 22.
- [Farhat *et al.*, 2014] FARHAT C., AVERY P., CHAPMAN T. et CORTIAL J. (2014). Dimensional reduction of nonlinear finite element dynamic models with finite rotations and energy-based mesh sampling and weighting for computational efficiency. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 98(9):625–662. Cité à la page 30.
- [Fauque, 2018] FAUQUE J. (2018). *Modèle d'ordre réduit en mécanique du contact. Application à la simulation du comportement des combustibles nucléaires*. Thèse de doctorat, Université de recherche Paris Sciences et Lettres, MINES ParisTech. Cité aux pages 8, 29, 33, 35, 38 et 39.
- [Ferket et Reusken, 1996] FERKET P. et REUSKEN A. (1996). Further analysis of the local defect correction method. *Computing*, 56(2):117–139. Cité aux pages 63, 70.
- [Feyel, 1999] FEYEL F. (1999). Multiscale FE² elastoviscoplastic analysis of composite structures. *Computational Materials Science*, 16:344–354. Cité aux pages 83, 86 et 87.

- [Feyel, 2003] FEYEL F. (2003). A multilevel finite element method (FE^2) to describe the response of highly non-linear structures using generalized continua. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 192:3233–3244. Cité aux pages 84, 87.
- [Feyel et Chaboche, 2000] FEYEL F. et CHABOCHE J. (2000). FE^2 multiscale approach for modelling the elastoviscoplastic behaviour of long fibre SiC/Ti composite materials. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 183(3-4):309–330. Cité à la page 86.
- [Fish, 1992] FISH J. (1992). The s-version of the finite-element method. *Computers and Structures*, 43(3):539–547. Cité à la page 59.
- [Fish et Belsky, 1995] FISH J. et BELSKY V. (1995). Multigrid method for periodic heterogeneous media. Part 2 : Multiscale modeling and quality control in multidimensional case. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 126(1):17–38. Cité à la page 97.
- [Fournier et al., 2013] FOURNIER D., HERBIN R. et LE TELLIER R. (2013). Discontinuous Galerkin Discretization and $h-p$ -refinement for the resolution of the neutron transport equation. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 35:A936–A956. Cité aux pages 68, 69.
- [Francfort et Suquet, 1986] FRANCFORT G. et SUQUET P. (1986). Homogenization and mechanical dissipation in thermoviscoelasticity. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 96(3):265–293. Cité à la page 83.
- [Fritzen et Hodapp, 2016] FRITZEN F. et HODAPP M. (2016). The finite element square reduced (FE^{2R}) method with GPU acceleration : towards three-dimensional two-scale simulations. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 107(10):853–881. Cité à la page 43.
- [Gao et al., 2017] GAO F., CHEN Q. et WANG L. (2017). The development of a computer code for predicting fast reactor oxide fuel element thermal and mechanical behaviour (FIBER- Oxide). *In International Conference on Fast Reactors and Related Fuel Cycles : Next Generation Nuclear Systems for Sustainable Development (FR17)*. Paper 217. Cité à la page 45.
- [Geers et al., 2017] GEERS M., KOUZNETSOVA V., MATOUŠ K. et YVONNET J. (2017). *Homogenization Methods and Multiscale Modeling : Nonlinear Problems*, pages 1–34. American Cancer Society. Cité aux pages 97, 99.
- [Gendre et al., 2011] GENDRE L., ALLIX O. et GOSSELET P. (2011). A two-scale approximation of the Schur complement and its use for non-intrusive coupling. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 87(9):889–905. Cité aux pages 80, 97.
- [Gendre et al., 2009] GENDRE L., ALLIX O., GOSSELET P. et COMTE F. (2009). Non-intrusive and exact global/local techniques for structural problems with local plasticity. *Computational Mechanics*, 44(2):233–245. Cité aux pages 60, 96.
- [Gloria, 2011] GLORIA A. (2011). Reduction of the resonance error—part 1 : Approximation of homogenized coefficients. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, 21(08):1601–1630. Cité à la page 95.
- [Gloria et al., 2015] GLORIA A., NEUKAMM S. et OTTO F. (2015). Quantification of ergodicity in stochastic homogenization : optimal bounds via spectral gap on glauber dynamics. *Inventiones mathematicae*, 199(2):455–515. Cité à la page 83.
- [Gosselet et al., 2018] GOSSELET P., BLANCHARD M., ALLIX O. et GUGUIN G. (2018). Non-invasive global–local coupling as a Schwarz domain decomposition method : acceleration and generalization. *Advanced Modeling and Simulation in Engineering Sciences*, 5(4). Cité à la page 96.
- [Granás et Dugundji, 2003] GRANAS A. et DUGUNDJI J. (2003). *Fixed Point Theory*. Springer. Cité à la page 13.
- [Graves-Morris, 1992] GRAVES-MORRIS P. R. (1992). Extrapolation method for vector sequences. *Numerical Math.*, 61:475–487. Cité à la page 14.
- [Gu et al., 2016] GU H., RÉTHORE J., BAIETTO M.-C., SAINOT P., LECOMTE-GROSBRAS P., VENNER C. et LUBRECHT A. (2016). An efficient multigrid solver for the 3D simulation of composite materials. *Computational Materials Science*, 112:230–237. Cité à la page 88.

- [Guedes et Kikuchi, 1990] GUEDES J. et KIKUCHI N. (1990). Preprocessing and postprocessing for materials based on the homogenization method with adaptive finite element methods. *Computer Methods Applied Mechanics and Engineering*, 83(2):143–198. Cité à la page [83](#).
- [Guillet *et al.*, 2008] GUILLET J.-L., GUÉRIN Y. et BONIN B. (2008). *Les combustibles nucléaires*. E-den, Une monographie de la Direction de l'énergie nucléaire. CEA Saclay et Groupe Moniteur. Cité à la page [5](#).
- [Guo et Babuška, 1986] GUO B. et BABUŠKA I. (1986). The hp version of the finite element method. *Computational Mechanics*, 1(1):21–41. Cité à la page [59](#).
- [Haasdonk *et al.*, 2012] HAASDONK B., SALOMON J. et WOHLMUTH B. (2012). A reduced basis method for parametrized variational inequalities. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 50(5): 2656–2676. Cité aux pages [33](#), [38](#).
- [Hackbusch, 1984] HACKBUSCH W. (1984). Local Defect Correction Method and Domain Decomposition Techniques. *Computing Suppl. Springer-Verlag*, 5:89–113. Cité aux pages [60](#), [61](#), [62](#) et [63](#).
- [Hashin et Shtrikman, 1963] HASHIN Z. et SHTRIKMAN S. (1963). A variational approach to the theory of the elastic behaviour of multiphase materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 11(2):127–140. Cité à la page [83](#).
- [Helfer *et al.*, 2015a] HELFER T., BEJAOU S. et MICHEL B. (2015a). Licos, a fuel performance code for innovative fuel elements or experimental devices design. *Nuclear Engineering and Design*, 294:117 – 136. Cité à la page [49](#).
- [Helfer *et al.*, 2015b] HELFER T., MICHEL B., PROIX J.-M., SALVO M., SERCOMBE J. et CASSELLA M. (2015b). Introducing the open-source mfront code generator : Application to mechanical behaviours and material knowledge management within the pleiades fuel element modelling platform. *Computers & Mathematics with Applications*, 70(5):994 – 1023. Cité à la page [23](#).
- [Henrici, 1964] HENRICI P. (1964). *Elements of Numerical Analysis*. John Wiley, New York. Cité à la page [15](#).
- [Henson, 2003] HENSON V. (2003). Multigrid methods for nonlinear problems : An overview. In BOUMAN C. et STEVENSON R., éditeurs : *Computational Imaging*, volume 5016 de *Proceedings of the Society of Photo-optical Instrumentation Engineers (SPIE)*, pages 36–48. Conference on Computational Imaging, SANTA CLARA, CA, JAN 23-24, 2003. Cité à la page [76](#).
- [Hill, 1963] HILL R. (1963). Elastic properties of reinforced solids : Some theoretical principles. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 11(5):357 – 372. Cité à la page [83](#).
- [Hoffmann, 1974] HOFFMANN H. (1974). Crack formation, crack healing and porosity redistribution during irradiation of uo2 and (u, pu) o2. *Journal of Nuclear Materials*, 54(1):9 – 23. Cité aux pages [45](#), [46](#), [47](#) et [118](#).
- [Hou et Wu, 1997] HOU T. Y. et WU X.-H. (1997). A multiscale finite element method for elliptic problems in composite materials and porous media. *Journal of Computational Physics*, 134(1):169–189. Cité à la page [84](#).
- [Huang et Russell, 2010] HUANG W. et RUSSELL R. (2010). *Adaptive moving mesh methods*, volume 174. Springer Science & Business Media. Cité à la page [59](#).
- [Irons et Tuck, 1969] IRONS B. M. et TUCK R. (1969). A version of the Aitken accelerator for computer iteration. *International journal of numerical methods in engineering*, 1:275–277. Cité aux pages [14](#), [21](#) et [22](#).
- [Jbilou et Sadok, 2000] JBILOU K. et SADOK H. (2000). Vector extrapolation methods. applications and numerical comparison. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 122:149–165. Cité aux pages [19](#), [20](#) et [21](#).

- [Kanit *et al.*, 2003] KANIT T., FOREST S., GALLIET I., MOUNOURY V. et JEULIN D. (2003). Determination of the size of the representative volume element for random composites : statistical and numerical approach. *International Journal of Solids and Structures*, 40(13):3647 – 3679. Cité aux pages 94, 96.
- [Karahan et Buongiorno, 2010] KARAHAN A. et BUONGIORNO J. (2010). Modeling of thermo-mechanical and irradiation behavior of mixed oxide fuel for sodium fast reactors. *Journal of Nuclear Materials*, 396(2):272–282. Cité à la page 45.
- [Karush, 1939] KARUSH W. (1939). Minima of functions of several variables with inequalities as side conditions. Mémoire de D.E.A., Department of Mathematics, University of Chicago, Chicago, IL, USA. Cité à la page 31.
- [Khadra *et al.*, 1996] KHADRA K., ANGOT P., CALTAGIRONE J. et MOREL P. (1996). Concept de zoom adaptatif en architecture multigrille locale ; étude comparative des méthodes L.D.C., F.A.C. et F.I.C. *RAIRO - Modélisation Mathématique et Analyse Numérique*, 30(1):39–82. Cité à la page 63.
- [Kikuchi et Oden, 1988] KIKUCHI N. et ODEN J. T. (1988). *Contact problems in elasticity : a study of variational inequalities and finite element methods*. SIAM. Cité à la page 32.
- [Kochmann *et al.*, 2018] KOCHMANN J., WULFINGHOFF S., EHLE L., MAYER J., SVENDSEN B. et REESE S. (2018). Efficient and accurate two-scale FE-FFT-based prediction of the effective material behavior of elasto-viscoplastic polycrystals. *Computational Mechanics*, 61:751–764. Cité à la page 98.
- [Koliesnikova, 2021] KOLIESNIKOVA D. (2021). *Raffinement adaptatif automatique de maillage à précision contrôlée dans un contexte multiéchelle pour la mécanique des solides non linéaire*. Thèse, Aix-Marseille Université. Cité aux pages 9, 64, 70 et 80.
- [Kouznetsova *et al.*, 2002] KOUZNETSOVA V., GEERS M. G. D. et BREKELMANS W. A. M. (2002). Multi-scale constitutive modelling of heterogeneous materials with a gradient-enhanced computational homogenization scheme. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 54(8):1235–1260. Cité à la page 98.
- [Kramer *et al.*, 2009] KRAMER W., CLERCX H., MATTHEIJ R. et MINERO R. (2009). A finite volume local defect correction method for solving the transport equation. *Computers and Fluids*, 38(3):533–543. Cité à la page 64.
- [Kuhn et Tucker, 1951] KUHN H. W. et TUCKER A. W. (1951). Nonlinear programming. In *Proceedings of the Second Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability*, pages 481–492, Berkeley, California. University of California Press. Cité à la page 31.
- [Küttler et Wall, 2008] KÜTTLER U. et WALL W. A. (2008). Fixed-point fluid-structure interaction solvers with dynamic relaxation. *Computational Mechanics*, 43:61–72. Cité à la page 15.
- [Ladevèze et Leguillon, 1983] LADEVÈZE P. et LEGUILLON D. (1983). Error estimate procedure in the finite element method and applications. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 20(3): 485–509. Cité à la page 67.
- [Lamorgese et Mauri, 2017] LAMORGESE A. et MAURI R. (2017). Phase-field modeling of mixing/demixing of regular binary mixtures with a composition-dependent viscosity. *Journal of Applied Physics*, 121(13):134302. Cité à la page 26.
- [Largenton, 2012] LARGENTON R. (2012). *Modélisation du comportement effectif du combustible MOX en service : analyse micromécanique en champs de transformation non uniformes*. Thèse de doctorat, Université de Provence. Cité à la page 89.
- [Largenton *et al.*, 2014] LARGENTON R., MICHEL J.-C. et SUQUET P. (2014). Extension of the nonuniform transformation field analysis to linear viscoelastic composites in the presence of aging and swelling. *Mechanics of Materials*, 73:76–100. Cité aux pages 84, 98.
- [Lebon, 1995] LEBON F. (1995). Two-grid method for regularized frictional elastostatics problems. *Engineering Computations*, 12:657–664. Cité à la page 74.

- [Lemaréchal, 1971] LEMARÉCHAL C. (1971). Une méthode de résolution de certains systèmes non linéaires bien posés. *C. R. Académie des Sciences de Paris*, pages 605–607. (in French). Cité à la page 20.
- [Lemke et Quinlan, 1992] LEMKE M. et QUINLAN D. (1992). Fast adaptive composite grid methods on distributed parallel architectures. *Communications in Applied Numerical Methods*, 8(9):609–619. Cité à la page 81.
- [Liu, 2016] LIU H. (2016). *Stratégie de raffinement automatique de maillage et méthodes multi-grilles locales pour le contact : application à l'interaction mécanique Pastille-Gaine*. Thèse, Aix-Marseille Université. Cité aux pages 9, 64, 67, 72 et 74.
- [Lopez et al., 2018] LOPEZ E., GONZALEZ D., AGUADO J. V., ABISSET-CHAVANNE E., CUETO E., BINETRUY C. et CHINESTA F. (2018). A manifold learning approach for integrated computational materials engineering. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 25(1):59–68. Cité à la page 38.
- [Lu et al., 2018] LU Y., BLAL N. et GRAVOUIL A. (2018). Adaptive sparse grid based hopgd : Toward a nonintrusive strategy for constructing space-time welding computational vademecum. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 114(13):1438–1461. Cité à la page 26.
- [Lumley, 1967] LUMLEY J. L. (1967). The Structure of Inhomogeneous Turbulent Flows. In YAGLOM A. et TATARSKI V., éditeurs : *Atmospheric turbulence and radio propagation*, pages 166–178. Nauka, Moscow. Cité à la page 29.
- [Macleod, 1986] MACLEOD A. J. (1986). Acceleration of vector sequences by multi-dimensional Δ^2 methods. *Communications in Applied Numerical Methods*, 2:385–392. Cité aux pages 16, 19.
- [Maday et Mula, 2020] MADAY Y. et MULA O. (2020). An adaptive parareal algorithm. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 377:112915. Cité à la page 81.
- [Marano et al., 2019] MARANO A., GÉLÉBART L. et FOREST S. (2019). Intragranular localization induced by softening crystal plasticity : Analysis of slip and kink bands localization modes from high resolution FFT-simulations results. *Acta Materialia*, 175:262 – 275. Cité à la page 26.
- [Marelle et al., 2013] MARELLE V., MICHEL B., SERCOMBE J., GOLDBRONN P., STRUZIK C. et BOULORE A. (2013). Advanced simulation of fuel behavior under irradiation in the PLEIADES software environment. In *IAEA TECDOC SERIES, Modelling of Water Cooled Fuel Including Design Basis and Severe Accidents*, volume IAEA-TECDOC-CD-1775. Cité aux pages 6, 14 et 61.
- [Masson et al., 2020] MASSON R., SECK M., FAUQUE J. et GARAJEU M. (2020). A modified secant formulation to predict the overall behavior of elasto-viscoplastic particulate composites. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 137:103874. Cité à la page 83.
- [McCormick, 1984] MCCORMICK S. (1984). Fast Adaptive Composite Grid (F.A.C.) Methods : theory for the variational case. *Computing Suppl. Springer-Verlag*, 5:115–121. Cité à la page 60.
- [Mfront] MFRONT. <http://www.tfel.sourceforge.net/>. Cité à la page 23.
- [Michel et al., 2013] MICHEL B., NONON C., SERCOMBE J., MICHEL F. et MARELLE V. (2013). Simulation of pellet-cladding interaction with the PLEIADES fuel performance software environment. *Nuclear Technology*, 182(2):124–137. Cité à la page 47.
- [Michel et al., 2012] MICHEL B., SERCOMBE J., NONON C. et FANDEUR O. (2012). *Modeling of Pellet Cladding Interaction*, volume 3, chapitre Comprehensive Nuclear Materials, pages 677–712. Konings R.J.M., Amsterdam, Elsevier. Cité aux pages 15, 16.
- [Michel et al., 2008] MICHEL B., SERCOMBE J. et THOUVENIN G. (2008). A new phenomenological criterion for pellet-cladding interaction rupture. *Nuclear Engineering and Design*, 238:1612–1628. Cité à la page 77.

- [Michel et Suquet, 2003] MICHEL J. et SUQUET P. (2003). Nonuniform transformation field analysis. *International Journal of Solids and Structures*, 40(25):6937–6955. Cité aux pages 43, 84.
- [Miehe et Bayreuther, 2007] MIEHE C. et BAYREUTHER C. G. (2007). On multiscale FE analyses of heterogeneous structures : from homogenization to multigrid solvers. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 71(10):1135–1180. Cité à la page 88.
- [Miehe et al., 1999] MIEHE C., SCHRÖDER J. et SCHOTTE J. (1999). Computational homogenization analysis in finite plasticity. Simulation of texture development in polycrystalline materials. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 171(3):387–418. Cité aux pages 83, 87.
- [Minero et al., 2006] MINERO R., ANTHONISSEN M. et MATTHEIJ R. (2006). A local defect correction technique for time-dependent problems. *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 22:128–144. Cité aux pages 64, 76.
- [Mori et Tanaka, 1973] MORI T. et TANAKA K. (1973). Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions. *Acta Metallurgica*, 21:571–574. Cité aux pages 83, 92.
- [Mourrat, 2019] MOURRAT J.-C. (2019). Efficient methods for the estimation of homogenized coefficients. *Foundations of Computational Mathematics*, 19(2):435–483. Cité à la page 95.
- [Muskhelishvili, 1963] MUSKHELISHVILI N. I. (1963). *Some Basic Problems of the Mathematical Theory of Elasticity*. Springer. Cité à la page 51.
- [Nefedov et Mattheij, 2002] NEFEDOV V. et MATTHEIJ R. (2002). Local defect correction with different grid types. *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 18(4):545–468. Cité à la page 60.
- [Neuss et al., 2001] NEUSS N., JÄGER W. et WITTUM G. (2001). Homogenization and multigrid. *Computing*, 66(1):1–26. Cité à la page 88.
- [Nievergelt, 1991] NIEVERGELT Y. (1991). Aitken’s and Steffensen’s accelerations in several variables. *Numerische Mathematik*, 59(1):295–310. Cité à la page 15.
- [Oden et Feng, 1996] ODEN J. et FENG Y. (1996). Local and pollution error estimation for finite element approximations of elliptic boundary value problems. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 74:245–293. Cité aux pages 66, 67.
- [Ozawa et Abe, 2006] OZAWA T. et ABE T. (2006). Development and verifications of fast reactor fuel design code CEPTAR. *Nuclear Technology*, 156(1):39–55. Cité à la page 45.
- [Passieux et al., 2013] PASSIEUX J.-C., RÉTHORÉ J., GRAVOUIL A. et BAIETTO M.-C. (2013). Local/global non-intrusive crack propagation simulation using a multigrid X-FEM solver. *Computational Mechanics*, 52(6):1381–1393. Cité aux pages 60, 96 et 97.
- [Plancq et al., 2004] PLANQC D., THOUVENIN G., RICAUD J., STRUZIK C., HELFER T., BENTEJAC F., THÉVENIN P. et MASSON R. (2004). PLEIADES : a unified environment for multi-dimensional fuel performance modeling. In *International meeting on LWR fuel performance*, Florida. Cité aux pages 6, 14 et 61.
- [Ponte Castañeda, 2016] PONTE CASTAÑEDA P. (2016). Stationary variational estimates for the effective response and field fluctuations in nonlinear composites. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 96:660 – 682. Cité à la page 83.
- [Praster et al., 2019] PRASTER M., KLASSEN M. et KLINKEL S. (2019). An adaptive fe² approach for fiber–matrix composites. *Computational Mechanics*, 63:1333–1350. Cité à la page 88.
- [Quarteroni et al., 2007] QUARTERONI A., SACCO R. et SALERI F. (2007). *Numerical Mathematics*. Springer. Cité à la page 14.
- [Radermacher et Reese, 2014] RADERMACHER A. et REESE S. (2014). Model reduction in elastoplasticity : proper orthogonal decomposition combined with adaptive sub-structuring. *Computational Mechanics*, 54(3):677–687. Cité à la page 35.

- [Raous *et al.*, 1988] RAOUS M., CHABRAND P. et LEBON F. (1988). Numerical methods for frictional contact problems and applications. *Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 7:111–128. Cité à la page 72.
- [Ricaud et Masson, 2009] RICAUD J. et MASSON R. (2009). Effective properties of linear viscoelastic heterogeneous media : Internal variables formulation and extension to ageing behaviours. *International Journal of Solids and Structure*, 46:1599–1606. Cité à la page 92.
- [Ryckelynck, 2009] RYCKELYNCK D. (2009). Hyper reduction of mechanical models involving internal variables. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 77(1):75–89. Cité aux pages 30, 33.
- [Ryckelynck *et al.*, 2015] RYCKELYNCK D., GALLIMARD L. et JULES S. (2015). Estimation of the validity domain of hyper-reduction approximations in generalized standard elastoviscoplasticity. *Advanced Modeling and Simulation in Engineering Sciences*, 2(1):6. Cité aux pages 30, 41.
- [Ryckelynck *et al.*, 2016] RYCKELYNCK D., LAMPOH K. et QUILICY S. (2016). Hyper-reduced predictions for lifetime assessment of elasto-plastic structures. *Meccanica*, 51(2):309–317. Cité à la page 30.
- [Saeb *et al.*, 2016] SAEB S., STEINMANN P. et JAVILI A. (2016). Aspects of computational homogenization at finite deformations : A unifying review from Reuss' to Voigt's bound. *Applied Mechanics Reviews*, 68(5). Cité à la page 87.
- [Sanchez-Palencia, 1980] SANCHEZ-PALENCIA E. (1980). *Homogenization method for the study of composite media*. Springer, Berlin. Cité à la page 83.
- [Sedogbo, 1997] SEDOGBO G. A. (1997). Some convergence acceleration processes for a class of vector sequences. *Applicationes Mathematicae*, 24(3):299–306. Cité à la page 14.
- [Senecal et Ji, 2017] SENECALE J. P. et JI W. (2017). Approaches for mitigating over-solving in multiphysics simulations. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 112(6):503–528. Cité à la page 27.
- [Sens, 1972] SENS P. (1972). The kinetics of pore movement in uo2 fuel rods. *Journal of Nuclear Materials*, 43(3):293 – 307. Cité aux pages 45, 53.
- [Sercombe *et al.*, 2013] SERCOMBE J., MASSON R. et HELFER T. (2013). Stress concentration during pellet cladding interaction : Comparison of closed-form solutions with 2d(r, θ) finite element simulations. *Nuclear Engineering and Design*, 260:175 – 187. Cité à la page 51.
- [Shanks, 1955] SHANKS D. (1955). Non linear transformations of divergent and slowly convergent sequences. *Journal of Mathematical Physics*, 34:1–42. Cité aux pages 14, 21.
- [Signorini, 1959] SIGNORINI A. (1959). Questioni di elasticità non linearizzata e semilinearizzata. *Rendiconti di Matematica e delle sue applicazioni*, 5:95–139. Cité à la page 31.
- [Sirovich, 1987] SIROVICH L. (1987). Turbulence and the dynamics of coherent structures. Parts I–III. *Quarterly of Applied Mathematics*, 45(3):561–590. Cité à la page 29.
- [Spahn *et al.*, 2014] SPAHN J., ANDRÄ H., KABEL M. et MÜLLER R. (2014). A multiscale approach for modeling progressive damage of composite materials using fast fourier transforms. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 268:871–883. Cité à la page 98.
- [Sun et Zamani, 1992] SUN W. et ZAMANI N. (1992). An adaptive h-r boundary element algorithm for the Laplace equation. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 33(3):537–552. Cité à la page 59.
- [Temmar, 2019] TEMMAR M. (2019). *Simulation multiphysique du phénomène de rattrapage du jeu pastille-gaine dans les aiguilles combustibles des réacteurs à neutrons rapides*. Thèse de doctorat, Aix-Marseille Université. Cité aux pages 8, 9, 45 et 53.
- [Tezuka et Okuda, 1988] TEZUKA A. et OKUDA O. (1988). Trial by the r-method - An adaptive mesh refinement for the finite-element method. *JSME International Journal - Series I*, 31(1): 50–55. Cité à la page 59.

- [Thouvenin *et al.*, 2006] THOUVENIN G., RICAUD J., MICHEL B., PLANCQ D. et THEVENIN P. (2006). ALCYONE : the PLEIADES fuel performance code dedicated to multidimensional PWR studies. *Proceedings of Top Fuel*. Cité à la page 7.
- [Veprev *et al.*, 2018] VEPREV D., BOLDYREV A., CHERNOV S. et MOSUNOVA N. (2018). Development and validation of the BERKUT fuel rod module of the EUCLID/V1 integrated computer code. *Annals of Nuclear Energy*, 113:237 – 245. Cité à la page 45.
- [Verfürth, 1996] VERFÜRTH R. (1996). *A review of a posteriori error estimation and adaptive mesh-refinement techniques*. Wiley, Chichester. Cité à la page 67.
- [Verpeaux, 2014] VERPEAUX P. (2014). Algorithmes et méthodes du code éléments finis Cast3M. in French. Cité à la page 23.
- [Vierendeels *et al.*, 2007] VIERENDEELS J., LANOYE L., DEGROOTE J. et VERDONCK P. (2007). Implicit coupling of partitioned fluid-structure interaction problems with reduced order models. *Computers and Structures*, 85:970–976. Cité à la page 22.
- [Viot *et al.*, 2018] VIOT L., SAAS L. et VUYST F. D. (2018). Solving coupled problems of lumped parameter models in a platform for severe accidents in nuclear reactors. *International Journal for Multiscale Computational Engineering*, 16(6):555–577. Cité à la page 26.
- [Walker et Ni, 2011] WALKER H. F. et NI P. (2011). Anderson acceleration for fixed-point iterations. *SIAM Journal of Numerical Analysis*, 49(4):1715–1735. Cité aux pages 20, 22.
- [Wangermez *et al.*, 2020] WANGERMEZ M., ALLIX O., GUIDAULT P.-A., CIOBANU O. et REY C. (2020). Interface coupling method for the global–local analysis of heterogeneous models : A second-order homogenization-based strategy. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 365:113032. Cité à la page 99.
- [Whitcomb, 1991] WHITCOMB J. (1991). Iterative global/local Finite Element analysis. *Computers and Structures*, 40(4):1027–1031. Cité aux pages 60, 96.
- [Wriggers et Scherf, 1998] WRIGGERS P. et SCHERF O. (1998). Different a posteriori error estimators and indicators for contact problems. *Mathematical and Computer Modelling*, 28(4-8):437–447. Cité à la page 75.
- [Wynn, 1956] WYNN P. (1956). On a device for computing the $e_m(s_n)$ transformation. *Mathematical tables and other aids to computation*, 10:91–96. Cité à la page 21.
- [Wynn, 1962] WYNN P. (1962). Acceleration techniques for iterated vector and matrix problems. *Math. Comput.*, 16:301–322. Cité aux pages 14, 21.
- [Yue et E, 2007] YUE X. et E W. (2007). The local microscale problem in the multiscale modeling of strongly heterogeneous media : Effects of boundary conditions and cell size. *Journal of Computational Physics*, 222(2):556–572. Cité à la page 95.
- [Yue et Robbins, 2005] YUE Z. et ROBBINS D. (2005). Adaptive superposition of finite element meshes in elastodynamic problems. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 63(11):1604–1635. Cité à la page 59.
- [Yvonnet *et al.*, 2020] YVONNET J., AUFFRAY N. et MONCHIET V. (2020). Computational second-order homogenization of materials with effective anisotropic strain-gradient behavior. *International Journal of Solids and Structures*, 191-192:434–448. Cité aux pages 97, 98 et 99.
- [Zienkiewicz et Zhu, 1987] ZIENKIEWICZ O. et ZHU J. (1987). A simple error estimator and adaptive procedure for practical engineering analysis. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 24:337–357. Cité aux pages 67, 68 et 69.
- [Zienkiewicz et Zhu, 1992a] ZIENKIEWICZ O. et ZHU J. (1992a). The superconvergent patch recovery and a posteriori error estimation. Part I : The recovery technique. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 33:1331–1364. Cité à la page 68.
- [Zienkiewicz et Zhu, 1992b] ZIENKIEWICZ O. et ZHU J. (1992b). The superconvergent patch recovery and a posteriori error estimation. Part II : Error estimates and adaptivity. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 33:1365–1382. Cité à la page 68.

LISTE DES FIGURES

Figure I.1	Pastilles de combustible utilisées dans les REP	3
Figure I.2	Teneur en plutonium d'une microstructure de combustible MOX-MIMAS	3
Figure I.3	Schéma d'un crayon combustible de REP	4
Figure I.4	Schéma de fonctionnement d'un réacteur nucléaire	4
Figure I.5	Schématisation du comportement d'un élément combustible de REP au cours de l'irradiation.	5
Figure I.6	Coupe métallographique transversale d'une pastille de combustible RNR-Na	6
Figure I.7	Schéma de couplage PLEIADES générique pour des géométries de type crayon ou aiguille de combustible	7
Figure II.1.1	Exemple du schéma de couplage multiphysique de référence de l'application ALCYONE de la plateforme PLEIADES	16
Figure II.1.2	Exemples d'application d'une méthode relaxation avec $\omega = 0.5$ sur un scalaire	17
Figure II.1.3	Exemples d'utilisation d'une méthode de Steffensen sur chaque composante d'un vecteur	18
Figure II.1.4	Méthodes des résidus basées sur 2 itérations pour le cas test Chaboche.	23
Figure II.1.5	Méthodes des résidus basées sur 2 itérations pour le cas test Polycristaux.	24
Figure II.1.6	Détails des méthodes des résidus basées sur 2 et 3 itérations pour le cas test Polycristaux avec $\varepsilon = 10^{-8}$	25
Figure II.1.7	Accélération vectorielle du couplage multiphysique des applications PLEIADES	26
Figure II.2.1	Problème de contact entre deux solides sur un domaine réduit. . .	34
Figure II.2.2	Méthode d'hyper-réduction hybride avec ddls primaux EF pris sur la zone de contact du RID pour être rajoutés dans la base réduite primale hybride (représentés par des croix rouges). Différentes configurations arbitraires ((a) à (c)) et configuration automatique (d) obtenue par l'algorithme glouton appliqué avec $\kappa_{max} = 100$. . .	36
Figure II.2.3	Méthode d'hyper-réduction hybride. Solutions duales (sur la déformée en maillage) pour les différentes configurations des ddls primaux EF, représentés en figure II.2.2.	36
Figure II.2.4	Solutions duales HHR et PBM à comparer avec la solution EF (FOM) en un point de l'espace paramétrique non utilisé pour les snapshots. Cas test 1D élastique.	38
Figure II.2.5	Méthode d'hyper-réduction hybride pour le contact mécanique 3D pastille-gaine.	39
Figure II.2.6	Méthode d'hyper-réduction hybride. Cas test 2D élasto-visco-plastique . Forces de contact à la fin de l'historique de chargement.	41

Figure II.2.7	Méthode d'hyper-réduction hybride. Cas test 2D élasto-visco-plastique. Composante σ_{rr} de la contrainte à la fin de l'historique de chargement	42
Figure II.3.1	Représentation schématique de la dilatation thermique et de la fragmentation des pastilles de combustible	46
Figure II.3.2	Guérison des fissures par production et migration de pores lenticulaires, source [Hoffmann, 1974]	47
Figure II.3.3	Représentation 3D d'un quart de fragment de pastille RNR-Na et conditions aux limites mécaniques	47
Figure II.3.4	Principe du transfert de matière entre les fragments de combustible	48
Figure II.3.5	Illustration du déplacement radial d'un fragment 3D dû au transfert de matière simulé via une transformation géométrique.	49
Figure II.3.6	Couplage thermo-mécanique 3D. Impact des phénomènes de rattrapage de jeu identifiés via la comparaison calcul/mesure du rayon de la zone restructurée.	50
Figure II.3.7	Nouveau modèle de délocalisation 1D pour les RNR-Na. Comparaison calcul/mesure sur plusieurs pastilles	52
Figure II.3.8	Nouveau modèle de délocalisation 1D pour les RNR-Na. Comparaison calcul/mesure le long d'un profil axial	52
Figure II.3.9	Évolution de la fraction volumique de porosité sous gradient thermique imposé	54
Figure III.1.1	Schéma de principe des méthodes de raffinement adaptatif de maillage	60
Figure III.1.2	Représentation du processus multigrille local	60
Figure III.1.3	Ensemble de nœuds associés aux opérateurs de transfert de la méthode LDC	62
Figure III.1.4	Illustration de l'algorithme LDC multiniveau - Cas test 2D axisymétrique - Pas de maillage initial : $h_0 = h_i = 327\mu m$	66
Figure III.1.5	Combinaison LDC avec estimateur <i>a posteriori</i> ZZ - Exemple de maillages structurés générés automatiquement - Seuil d'erreur $\epsilon_\Omega = 1\%$ et critère d'arrêt de 0,5% de la mesure du domaine initial. . .	70
Figure III.1.6	Comparaison des résultats obtenus pour différentes stratégies AMR sur des cas tests 2D et 3D.	71
Figure III.1.7	Méthode LDC appliquée à un problème 2D(r,z) de contact frottant - Coefficient de frottement $\mu = 0.2$ - Maillage initial de pas $h_0 = 200\mu m$ et jeu initial $d = 2\mu m$	74
Figure III.1.8	Exemple de raffinement quasi-hérarchique sur des frontières courbes	75
Figure III.1.9	Méthode LDC appliquée à un problème 2D(r, θ) de contact sans frottement - Maillage initial de pas $h_0 = 200\mu m$ et jeu initial $d = 2\mu m$ - Seuil d'erreur prescrit $\epsilon_\Omega = 1\%$ - Forces de contact obtenues sur le deuxième sous-niveau ($l = 2$).	75
Figure III.1.10	Méthode LDC appliquée à un comportement non linéaire de type fluage de Norton - Cas test 2D(r, θ) - Convergence en maillage en fonction de la distance initiale à la singularité - Maillage fixé <i>a priori</i>	77
Figure III.1.11	Comparaison de méthodes AMR pour un comportement non linéaire de type fluage de Norton - Cas test 2D(r, θ) - Déformation anélastique équivalente.	78

Figure III.1.12	Adaptation dynamique de maillage pour la méthode LDC - Illustration de la transmission des informations entre niveaux entre deux pas de temps	79
Figure III.1.13	Adaptation dynamique de maillage avec la méthode LDC - Évolution de la contrainte de Von Mises maximale au cours du temps - Cas 2D(r, θ) - Fluage de Norton.	79
Figure III.2.1	Principe des méthodes d'homogénéisation de microstructures hétérogènes	84
Figure III.2.2	Couplage multiphysique, multiéchelle et multitranche dans PLEIADES	89
Figure III.2.3	Exemples de VER de MOX bi-phasique utilisé dans le modèle EF ² avec différentes fractions volumiques d'inclusions (f_v)	90
Figure III.2.4	Convergence en maillage de la contrainte hydrostatique moyenne de la phase inclusionnaire obtenue par EF ² - CLs de type PBC. . .	91
Figure III.2.5	Influence de la transformation géométrique sur la fraction volumique maillée d'inclusion - Maillage EF quadratique	92
Figure III.2.6	Comparaison calcul EF ² avec inclusions polydispersées versus loi homogénéisée MTI - Contraintes hydrostatiques homogénéisées et moyennes par phase.	93
Figure III.2.7	Champs de contraintes hydrostatiques dans le VER et histogrammes de répartition. Effet des conditions aux limites. À gauche VER complet (vue $y=0\%$), au milieu coupe à $y=80\%$	94
Figure III.2.8	Evolution des contraintes hydrostatiques sur la phase inclusionnaire et des temps de calculs totaux en fonction du rapport d'échelle et des conditions aux limites du VER. Moyenne sur 10 VERs.	95
Figure III.2.9	Histogrammes de répartition sur un VER sans inclusions coupées au bord. Effet des conditions aux limites.	96
Figure III.2.10	Deux classes de problèmes multiéchelles selon le facteur d'échelle l/L	96
Figure III.2.11	Algorithme générique de couplage multiéchelle à 2 niveaux	97

AUTOUR DE MÉTHODES NUMÉRIQUES POUR LES
COUPLAGES MULTIPHYSIQUES ET MULTIÉCHELLES
EN MÉCANIQUE DES SOLIDES

RÉSUMÉ

Ce manuscrit d'Habilitation à Diriger des Recherches (HDR) se focalise sur mes travaux de recherche menés au sein du Département d'Études des Combustibles (DEC) du Commissariat à l'Énergie Atomique et aux Énergies Alternatives (CEA) depuis 2009.

Le premier de mes deux grands axes de recherche s'articule autour de l'efficacité et de la précision des couplages multiphysiques. Dans ce cadre, j'ai travaillé autour du formalisme d'accélération de convergence des suites vectorielles de point fixe, de la réduction d'ordre de modèle pour la mécanique du contact, mais également autour de la modélisation et simulation multiphysiques avancées pour la compréhension du mécanisme de rattrapage du jeu pastille-gaine dans les réacteurs à neutrons rapides.

Mon deuxième grand axe de recherche concerne la mise en œuvre de couplages multiéchelles pour la mécanique des solides et ce pour différents rapports d'échelles. J'ai ainsi contribué à développer des techniques de raffinement adaptatif de maillage de type multigrille local pour la mécanique non linéaire et j'ai également travaillé autour de la mise en œuvre industrielle de méthodes d'homogénéisation numérique par champs complets de type éléments finis au carré.

AROUND NUMERICAL METHODS FOR
MULTIPHYSICS AND MULTISCALE COUPLINGS
IN SOLID MECHANICS

SUMMARY

This Habilitation thesis (Habilitation à Diriger des Recherches - HDR) manuscript focuses on my research work carried out within the Fuel Studies Department (DEC) of the the French Alternative Energies and Atomic Energy Commission (CEA) since 2009.

The first of my two main lines of research focuses on efficiency and precision of multiphysics couplings. In this context, I worked around the formalism of convergence acceleration of vector fixed point series, reduced order modeling for contact mechanics, but also around advanced multiphysics modeling and simulation for understanding the mechanism of pellet-cladding gap closure in fast neutron reactors.

My second major area of research concerns the implementation of multiscale couplings for solid mechanics and for different scale ratios. I thus contributed to develop adaptive local multigrid mesh refinement techniques for nonlinear mechanics and I also worked around the industrial implementation of full field numerical homogenization methods based on the finite element square approach.