DE LA RECHERCHE À L'INDUSTRIE

Méthode d'hyper-réduction pour la mécanique du contact. Application à la simulation du combustible nucléaire.

Club utilisateur Cast3M

J. Fauque[1,2] , I. Ramière[1], D. Ryckelynck[2]
[1] CEA, Centre de Cadarache, DEC/SESC
[2] MINES ParisTech - Centre des matériaux

24 novembre 2017

www.cea.fr

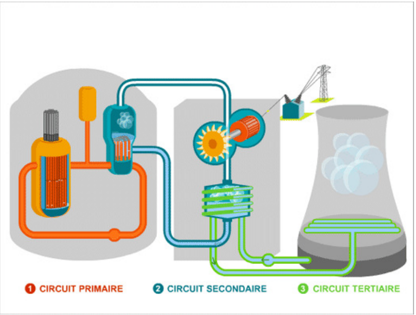
Plan de l'exposé

- **Contexte industriel**
- **Hyper-réduction pour le contact**
- **Implémentation dans Cast3M**
- **Application à un cas test semi-industriel**
- **Conclusions et perspectives**

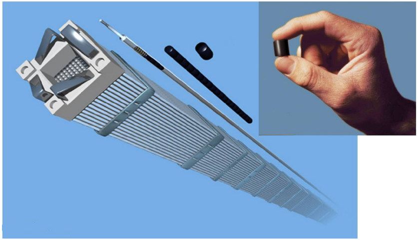
Contexte industriel

Le combustible nucléaire

Une centrale nucléaire



Le combustible nucléaire



- Pastilles de combustible de $1cm$ pour un crayon d'environ $3m$

$\hookrightarrow$ un problème multi-échelles

- Nombreux phénomènes (thermique, chimie, mécanique des solides, mécanique des fluides,...)

$\hookrightarrow$ un problème multi-physiques

Simulation du comportement du combustible nucléaire

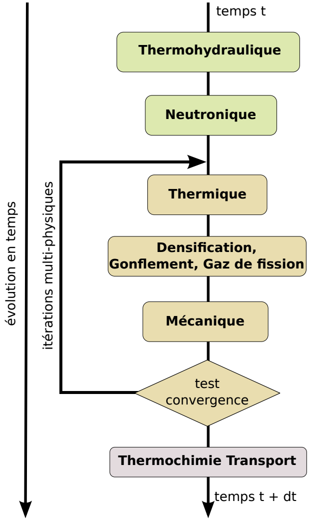
- PLEIADES
  - plateforme de simulation du comportement des combustibles nucléaires.
  - co-développement CEA, EDF, AREVA

Simulation du comportement du combustible nucléaire

- PLEIADES
  - plateforme de simulation du comportement des combustibles nucléaires.
  - co-développement CEA, EDF, AREVA
- Couplage de point fixe de type Gauss-Seidel par bloc
  - Résolution mécanique (solveur EF Cast3M)

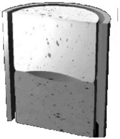
    ↪ 50 à 70% du temps de calcul

    ↪ Réduction du modèle ?



La mécanique du combustible

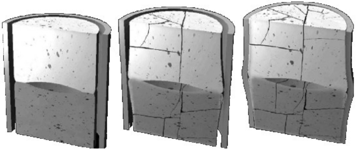
- Pastilles :
  - oxydes UO_2 ou $UPuO_2$ (MOX)
  - céramique fragile avec contrainte à rupture entre 100 et 150 MPa
  - gonflement sous irradiation,
  - comportement viscoplastique.



- Gaine :
  - alliage à base de zirconium (Zy_4, M5®,...)
  - contrainte de compression dûe au réfrigérant,
  - comportement viscoplastique avec fluage thermique et d'irradiation.

La mécanique du combustible

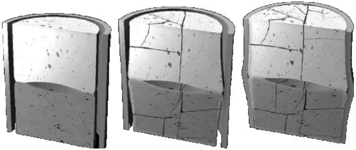
- Pastilles :
  - oxydes UO_2 ou $UPuO_2$ (MOX)
  - céramique fragile avec contrainte à rupture entre 100 et 150 MPa
  - gonflement sous irradiation,
  - comportement viscoplastique.



- Gaine :
  - alliage à base de zirconium (Zy_4, M5®,...)
  - contrainte de compression dûe au réfrigérant,
  - comportement viscoplastique avec fluage thermique et d'irradiation.
- Contact : au plan médian pastille puis partout

La mécanique du combustible

- **Pastilles :**
  - oxydes UO_2 ou $UPuO_2$ (MOX)
  - céramique fragile avec contrainte à rupture entre 100 et 150 MPa
  - gonflement sous irradiation,
  - comportement viscoplastique.



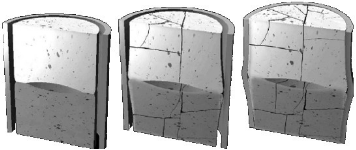
- **Gaine :**
  - alliage à base de zirconium (Zy_4, M5®,...)
  - contrainte de compression dûe au réfrigérant,
  - comportement viscoplastique avec fluage thermique et d'irradiation.

- **Contact** : au plan médian pastille puis partout

$\Rightarrow$ Trouver une méthode de réduction de modèle efficace pour comportement viscoplastique + contact

La mécanique du combustible

- **Pastilles** :
  - oxydes UO_2 ou $UPuO_2$ (MOX)
  - céramique fragile avec contrainte à rupture entre 100 et 150 MPa
  - gonflement sous irradiation,
  - comportement viscoplastique.



- **Gaine** :
  - alliage à base de zirconium (Zy_4, M5®,...)
  - contrainte de compression dûe au réfrigérant,
  - comportement viscoplastique avec fluage thermique et d'irradiation.

- **Contact** : au plan médian pastille puis partout

$\Rightarrow$ Trouver une méthode de réduction de modèle efficace pour comportement viscoplastique + contact

$\hookrightarrow$ Étendre la méthode d'hyper-réduction avec domaine d'intégration réduit [D. Ryckelynck, 2005], [D. Ryckelynck, 2009], adaptée à des comportements viscoplastiques, au cas du contact.

Hyper-réduction et contact

Problème de contact (sans frottement)

- Hypothèses : (Cast3M)
  - Formulation mixte,
  - Contact traité par multiplicateurs de Lagrange.

- Modèle éléments finis (cas élastique) :

$$\begin{cases} \text{Trouver } (U,\Lambda) \in \mathbb{R}^N \times (\mathbb{R}^+)^{N_\lambda} \text{ tels que} \\ \quad KU + B^T\Lambda = F \\ \Lambda^T(BU - D) = 0 \\ \qquad\qquad BU \leq D \end{cases}$$

U : déplacements

Λ : multiplicateurs de Lagrange

K : matrice de rigidité

B : matrice des contacts potentiels

F : forces externes

D : jeu initial

$$\Lambda = -F_N \quad \text{(force de contact)}$$

Taille du problème : dépend directement du nombre de ddls $N + N_\lambda$.

Réduction de modèle pour contact traité par multiplicateurs

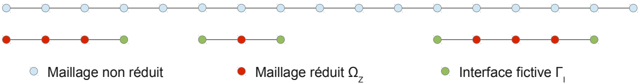
- Les méthodes proposées dans la littérature construisent deux bases réduites (BR) V_U et V_Λ :
  - Reduced-basis method [B. Haasdonk *et al.*, 2012], BRs construites directement avec des snapshots.
  - Projection-based method [M. Balajewicz *et al.*, 2015], V_U construite par POD alors que V_Λ construite avec NNMF (Non-Negative Matrix Factorization) pour respecter la positivité des multiplicateurs.

Difficulté : obtenir une bonne approximation des multiplicateurs de Lagrange en utilisant une BR.

Méthode d'hyper-réduction classique

- Méthode d'hyper-réduction [D. Ryckelynck, 2009] :
  - Méthode *a posteriori* avec projection sur BR, V_U construite par POD.
  - Construction d'un domaine d'intégration réduit (RID) (algorithme DEIM appliquée à BR construite par POD, domaine d'intérêt,...) :

$$\underset{\swarrow \atop V_{U_R}}{\Omega_{RID}} = \underset{\downarrow \atop V_{U_Z}}{\Omega_Z} \cup \Gamma_I \rightarrow \text{interface fictive}$$



$\hookrightarrow$ C.L. sur Γ_I de type Dirichlet déduites par projection de Petrov-Galerkin.

Idée pour l'extension au contact : conserver la base duale EF pour les multiplicateurs de Lagrange.

- Méthode d'hyper-réduction hybride [J. Fauque *et al.*, 2017]

$$\begin{cases} \text{Trouver } (U,\Lambda) \in \mathbb{R}^N \times (\mathbb{R}^+)^{N_\lambda} \text{ t.q.} \\ KU + B^T\Lambda = F \\ \Lambda^T(BU - D) = 0 \\ BU \leq D \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \text{Trouver } (\gamma,\Lambda_R) \in \mathbb{R}^{l_u} \times (\mathbb{R}^+)^{N_\lambda^C} \text{ t.q.} \\ V_{U_Z}^T K_R V_{U_R}\gamma + V_{U_Z}^T B_R^T \Lambda_R = V_{U_Z}^T F_R \\ \Lambda_R^T(B_R V_{U_R}\gamma - D_R) = 0 \\ B_R V_{U_R}\gamma \leq D_R \end{cases}$$

EF : $K \in \mathbb{R}^{N\times N}$, HR : $V_{U_Z}^T K_R V_{U_R} \in \mathbb{R}^{l_u \times l_u}$ avec $l_u \ll N$

- Condition inf-sup (ou LBB) à respecter : $B_{R,actifs} V_{U_R}$ de rang maximal en ligne
  Ne connaissant pas les contacts actifs *a priori*, $B_R V_{U_R}$ de rang maximal en ligne
  $\hookrightarrow$ condition nécessaire : $l_u \geq N_\lambda^C$
  Si non respectée : couplage HR/EF [J. Baiges *et al.*, 2013]
  $\Rightarrow \tilde{V}_U = (V_U | (\varphi_i)_i)$, φ fonctions de forme EF et i ddls déplacement sur la zone de contact tels que $B_R \tilde{V}_{U_R}$ soit de rang maximal en ligne.

- Méthode d'hyper-réduction hybride [J. Fauque *et al.*, 2017]

$$\begin{cases} \text{Trouver } (U,\Lambda) \in \mathbb{R}^N \times (\mathbb{R}^+)^{N_\lambda} \text{ t.q.} \\ KU + B^T\Lambda = F \\ \Lambda^T(BU - D) = 0 \\ BU \leq D \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \text{Trouver } (\gamma,\Lambda_R) \in \mathbb{R}^{l_u} \times (\mathbb{R}^+)^{N_\lambda^C} \text{ t.q.} \\ V_{U_Z}^T K_R V_{U_R}\gamma + V_{U_Z}^T B_R^T \Lambda_R = V_{U_Z}^T F_R \\ \Lambda_R^T(B_R V_{U_R}\gamma - D_R) = 0 \\ B_R V_{U_R}\gamma \leq D_R \end{cases}$$

EF : $K \in \mathbb{R}^{N\times N}$, HR : $V_{U_Z}^T K_R V_{U_R} \in \mathbb{R}^{l_u \times l_u}$ avec $l_u \ll N$

- Condition inf-sup (ou LBB) à respecter : $B_{R,actifs} V_{U_R}$ de rang maximal en ligne
  Ne connaissant pas les contacts actifs *a priori*, $B_R V_{U_R}$ de rang maximal en ligne
  $\hookrightarrow$ condition nécessaire : $l_u \geq N_\lambda^C$
  Si non respectée : couplage HR/EF [J. Baiges *et al.*, 2013]
  $\Rightarrow \tilde{V}_U = (V_U|(\varphi_i)_i)$
- Avantages : Multiplicateurs traités avec la base EF (précision). Conditions de non pénétration et de complémentarité vérifiées sur le RID.
- Inconvénients : Contact traité uniquement sur le RID. Risque d'interpénétration ailleurs car $U = V_U\gamma$ partout.

Implémentation dans Cast3M

Hypothèses et conditions aux limites

Hypothèses :

- Contact entre solides élastiques.
- Contact traité nœud à nœud.

Conditions aux limites :

- Conditions de Neumann :
  - Cas homogènes : pas de problème.
  - Cas non-homogènes : une partie du maillage sur lequel repose la condition doit être prise dans le RID.
- Conditions de Dirichlet :
  - Cas homogènes : prise en compte dans la base POD.
  - Cas non-homogènes : traité par multiplicateurs de Lagrange dans Cast3M, même raisonnement que pour traiter le contact (condition d'égalité au lieu d'inégalité). Prise en compte si maillage support dans le RID.

Hyper-réduction hybride

Partie offline :

1. Collection des données (snapshots).
2. Construction de la BR V_U avec la POD (numpy.linalg.svd).
3. Obtention des nœuds pour la construction du RID avec l'algorithme DEIM (appliqué à V_U et V_Λ).

} python

Partie online :

4. Récupération des nœuds DEIM MAILR et de la base V_U sous forme d'une liste de CHPOIN à l'aide de MANU.
5. Construction du RID :

   MAILRID = MAILINI ELEM 'APPUYE' 'LARGEMENT' MAILR ;

   Extension de MAILR sur la zone de contact avec POIN 'PROC' pour traiter un maximum de contacts.

   Possibilité d'étendre le RID aux voisins.

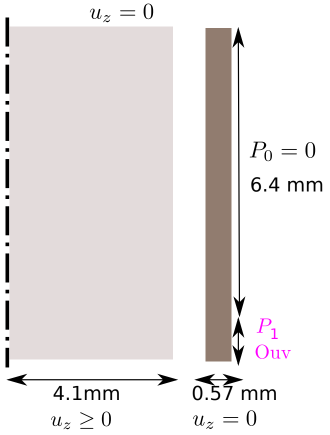
Partie online :

6. Restriction au domaine réduit puis projections :
   V_{U_R} = REDU V_U MAILRID ; V_{U_Z} = REDU V_{U_R} MAILR ;
   $(V_{U_Z}^T K_R V_{U_R})_{ij}$ = YTMX $(V_{U_R})_{.j}$ $(V_{U_Z})_{.i}$ K ; $(V_{U_Z}^T F_R)_i$ = XTY $(V_{U_Z})_{.i}$ F ;
   MANU 'RIGI' et MANU 'CHPO' pour obtenir les bons types.

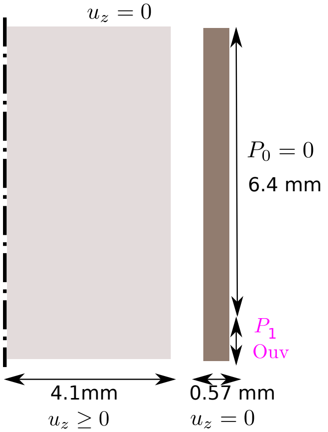
   Redéfinition du contact (B_R et D_R) sur le RID avec IMPO 'MAIL' puis IMPO 'BLOC'. $B_R V_{U_R}$ = B_R '*' V_{U_R} ;
   Rang de $B_R V_{U_R}$, boucler pour rajouter des ddls EF si besoin.
   Redéfinition de l'inégalité avec RELA 'MAXI' et DEPIMP.
7. $\begin{pmatrix} \gamma \\ \Lambda_R \end{pmatrix}$ = RESOU $(V_{U_Z}^T K_R V_{U_R}$ ET $B_R V_{U_R})$ $(V_{U_Z}^T F_R$ ET $D_R)$
8. Reconstruction des déplacements dans l'espace EF, $U = V_U \gamma$.
   Possibilité d'un post-traitement pour reconstruire les multiplicateurs de Lagrange sur la zone de contact.

Application
Cas test industriel

Cas test - Interaction Pastille-Gaine



- Configuration 2D axisymétrique
- Comportement élastique :
  - Pastille : $E = 190$ GPa et $\nu = 0.3$
  - Gaine : $E = 78$ GPa et $\nu = 0.34$
- Contact pastille-gaine (cf. mise en diabolo) :
  - Pression $P_1 \in [160, 240]$ MPa
  - Sur une hauteur de $Ouv \in [0.5, 0.7]$ mm
  - Jeu pastille-gaine initial $= 2\ \mu$m
- Solveur EF Cast3M + méthode active-set
- Solveur HR

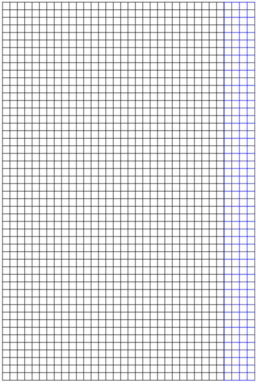


- Configuration 2D axisymétrique
- Comportement élastique :
  - Pastille : $E = 190$ GPa et $\nu = 0.3$
  - Gaine : $E = 78$ GPa et $\nu = 0.34$
- Contact pastille-gaine (cf. mise en diabolo) :
  - Pression $P_1 \in [160, 240]$ MPa
  - Sur une hauteur de $Ouv \in [0.5, 0.7]$ mm
  - Jeu pastille-gaine initial $= 2\ \mu$m
- Solveur EF Cast3M + méthode active-set
- Solveur HR

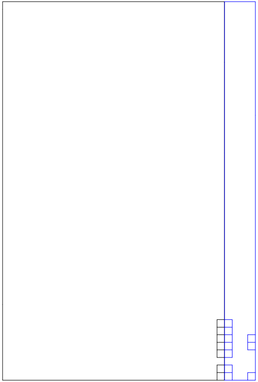
- Résultats suivants obtenus avec :
  - Contact traité nœud à nœud (système symétrique)
  - Grille régulière de 25 snapshots
  - $\varepsilon_u = 10^{-7}$
  - $\varepsilon_\lambda = 10^{-5} \Rightarrow$ RID

Cas test - Interaction Pastille-Gaine

- RID obtenu



Maillage initial : 1700 éléments

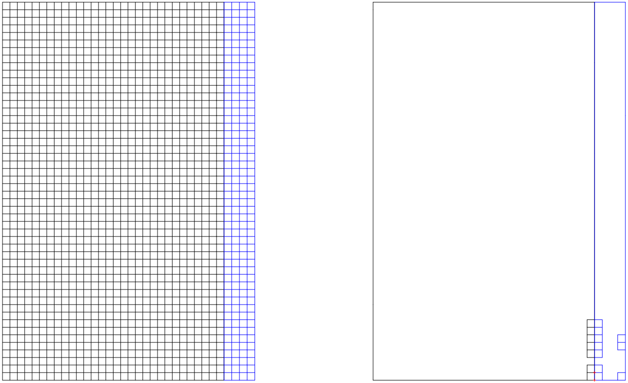


RID : 17 éléments

- Inconnues traitées : $N_\lambda^C = 6$, $l_u = 5$ +2 ddls EF (en u_r) (rang maximal)
- Speed-up CPU : $\simeq 12$ (incluant projection des EDP)

Cas test - Interaction Pastille-Gaine

- RID obtenu

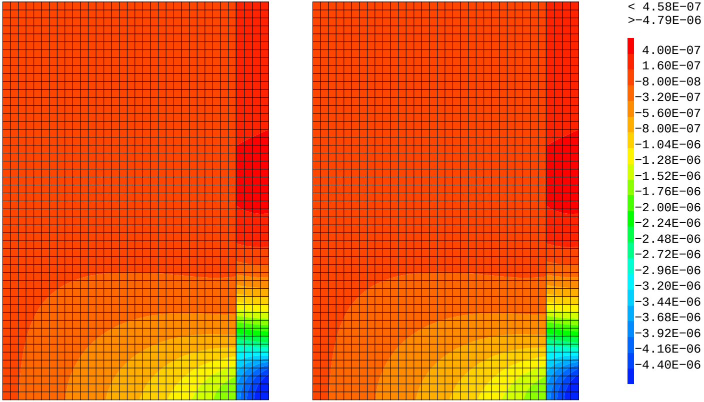


Maillage initial : 1700 éléments RID : 17 éléments

- Inconnues traitées : $N_\lambda^C = 6,\ l_u = 5$ +2 ddls EF (en u_r) (rang maximal)
- Speed-up CPU : $\simeq$ 12 (incluant projection des EDP)

Cas test - Interaction Pastille-Gaine

- Déplacements - $P_1 = 190$ MPa, $Ouv = 0.62\ mm$

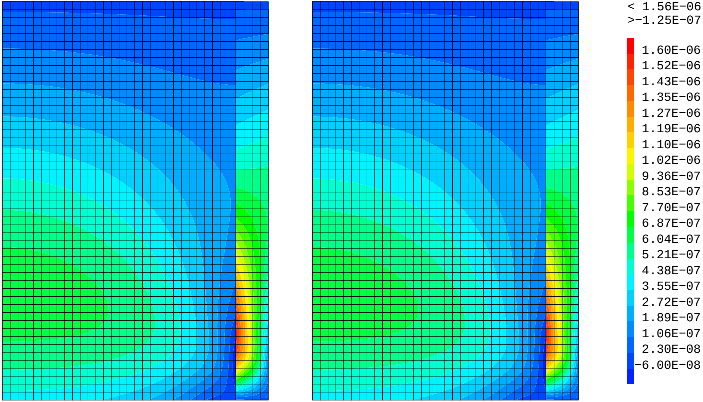


u_R EF | u_R HR

- Très bon accord solution EF vs solution HR

Cas test - Interaction Pastille-Gaine

- Déplacements - $P_1 = 190$ MPa, $Ouv = 0.62\ mm$

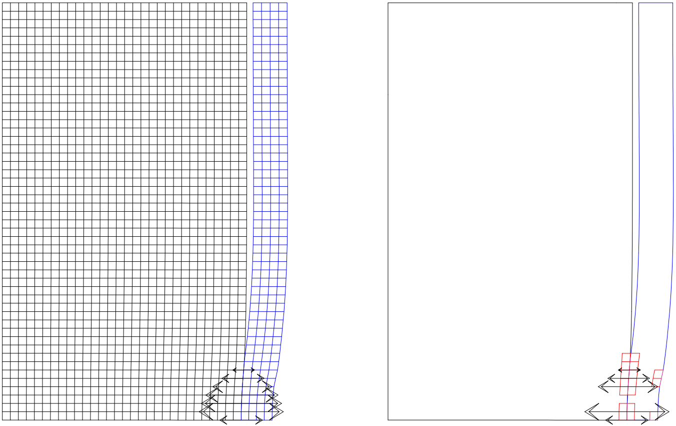


u_Z EF $\qquad$ u_Z HR

- Très bon accord solution EF vs solution HR
- $\|e_U\|_2 = 0.055\%$

Cas test - Interaction Pastille-Gaine

- Forces de contact - $P_1 = 190$ MPa, $Ouv = 0.62$ mm



- Très bonne représentation des forces de contact même si toute la zone de contact actif n'est pas représentée
- $\|e_\Lambda\|_2 = 0.53\%$ (sur Ω_{RID})

Conclusions et perspectives

Conclusions et perspectives

- **Conclusions** : introduction d'une méthode d'hyper-réduction hybride pour les problèmes de contact traités par multiplicateurs de Lagrange
  - Testée sur un cas test 2D élastique industriel avec contact nœud à nœud

    $\hookrightarrow$ Très bons résultats notamment sur les forces de contact

    $\hookrightarrow$ Implémentation peu intrusive (prétraitement, opérateurs existants)

- **Perspectives**
  - Traitement du contact nœud-surface
  - Prise en compte de comportements mécaniques non-linéaires ($\rightarrow$ visco-plastique)
  - Traitement du contact frottant
  - Accélération des études paramétriques (vérification/validation) et/ou prise en compte de nouvelles situations dans la simulation multi-physiques du combustible nucléaire.

Merci pour votre attention

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives
Centre de Cadarache | DEN/DEC/SESC b151 - 13108 Saint-Paul-Lez-Durance
T. +33 (0)4.42.25.23.66 | F. +33 (0)4.42.25.47.47
Établissement public à caractère industriel et commercial | RCS Paris B 775 685 019

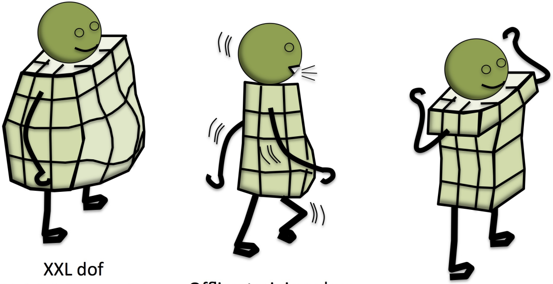
Direction de l'Énergie Nucléaire
Département d'Études des Combustibles
Service d'Études et de Simulation du comportement des Combustibles

Références

- J.L. Lumley.
  Atmospheric Turbulence and Wave Propagation. The structure of inhomogenous turbulence. 166–178. 1967.
- M. Barrault, Y. Maday, N.C. Nguyen and A.Patera.
  An 'empirical interpolation' method : application to efficient reduced-basis discretization of partial differential equations. Académie des sciences. 2004.
- S. Chaturantabut, D.C. Sorensen.
  Discrete empirical interpolation for nonlinear model reduction. Decision nand Control, p. 4316-4321, 2009.
- D. Ryckelynck.
  Hyper reduction of mechanical models involving internal variables. International Journal for Numerical Methods in Engineering 77, p.75–89. 2009.
- B. Haasdonk, J. Salomon and B. Wohlmuth.
  A reduced basis method for parametrized variational inequalities. SIAM Journal on Numerical Analysis, Vol. 50, Num. 5. p.2656–2676. 2012.
- J. Baiges, R. Codina and S. Idelson.
  A domain decomposition strategy for reduced order models. Application to the incompressible Navier-Stokes equations, Comput. Methods Appl. Mech. Engng. 267, p.23–42. 2013.
- M. Balajewicz, D. Amsallem and C. Farhat.
  Projection-based model reduction for contact problems. International Journal for Numerical Methods in Engineering. 2015.
- J. Fauque, I. Ramière and D. Ryckelynck.
  Hybrid hyper-reduced modeling for contact mechanics problems, in preparation.

Hyper-réduction

A posteriori model reduction



XXL dof
highfidelity model

Offline training phase
to lose dof

Low dof and good shape,
Hyper-reduced order model
ready for online phase

Algorithme glouton

Indicateur d'erreur :

- $U_I(\mu) =$ interpolation de la matrice des snapshots en U sur Γ_I pour un μ donné,
- Résolution du problème EF $(\tilde{U}, \tilde{\Lambda})$ dans le RID en imposant $U_I(\mu)$ comme C.L. de Dirichlet.
- $\eta(\mu) = \dfrac{\|(U_{hr} - \tilde{U})(\mu)\|_{H^1}}{\|\tilde{U}(\mu)\|_{H^1}} + \dfrac{\|(\Lambda_{hr} - \tilde{\Lambda})(\mu)\|_{(H^1)'}}{\|\tilde{\Lambda}(\mu)\|_{(H^1)'}}$

Algorithme glouton :

- calculer $\eta(\mu)$ pour tous les μ de la grille des paramètres
- $\mu_{max} = argmax(\eta(\mu))$ est le nouveau snapshot

Post-traitements hyper-réduction hybride

- Déplacements obtenus directement par HR : $U = V_U \gamma$.
- Reconstruction des multiplicateurs de Lagrange :
  - Minimisation NNLS (Non-Negative Least-Square) basée sur
    - les approximations duales HR (Λ_R)
    - la matrice des snapshots en multiplicateurs de Lagrange (S_λ) telle que

$$\Lambda = S_\lambda \gamma_\lambda, \ \gamma_\lambda \geq 0 \quad \text{sur } \Omega$$

    - la condition de complémentarité ($(BU - D) \odot \Lambda = 0$)

$$\min_{\gamma_\lambda} \left\| \begin{pmatrix} S_{\lambda_R} \\ [BU - D]_- \odot S_\lambda \end{pmatrix} \gamma_\lambda - \begin{pmatrix} \Lambda_R \\ 0 \end{pmatrix} \right\|_2^2 \ \text{tel que} \ \gamma_\lambda \geq 0$$