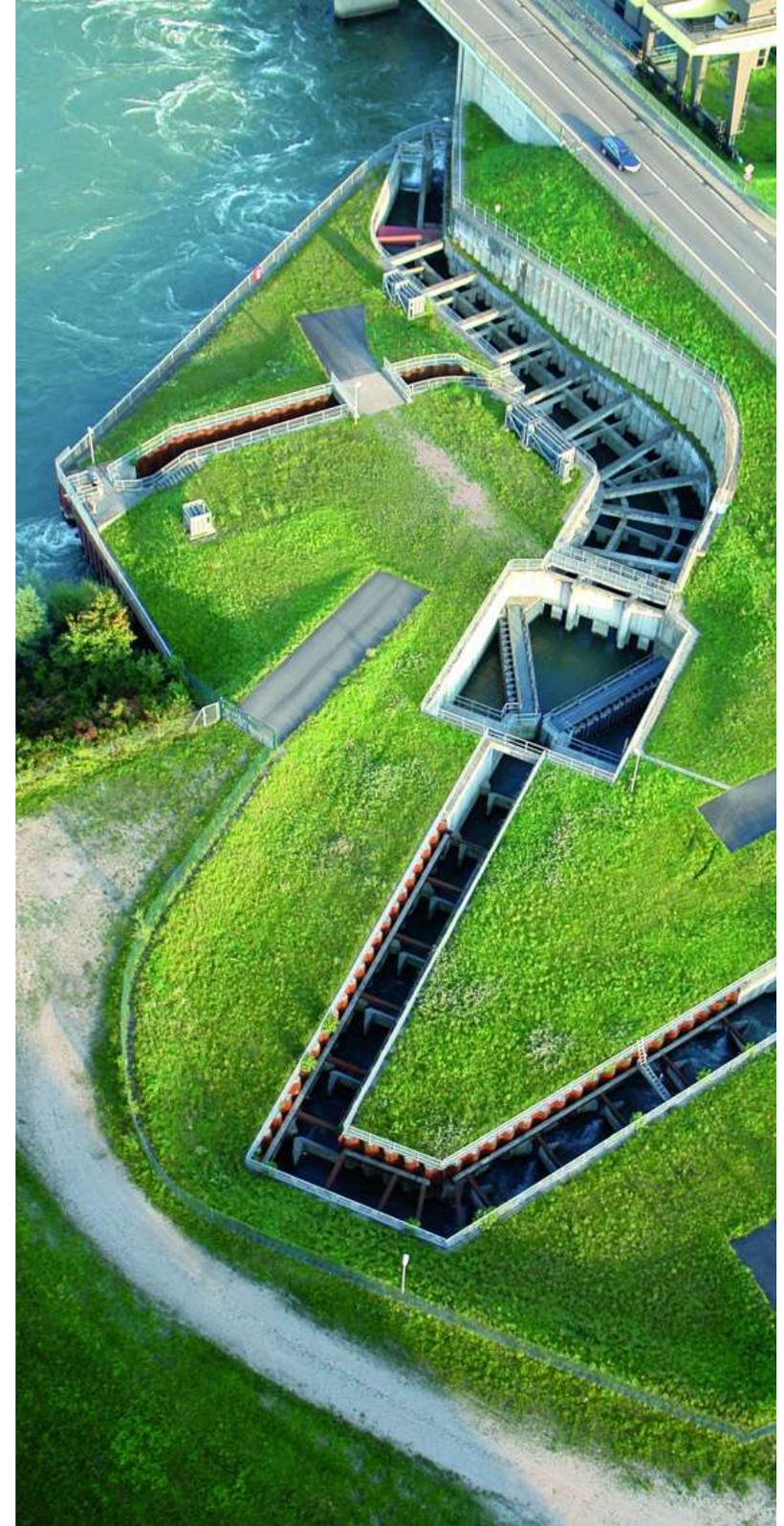




Code_Aster pour les Géomatériaux

*G. EI TABBAL, G. FERTE, S. GRANET, S. RAUDE, N. TARDIEU ...
(EDF / R&D / ERMES)*

Colloque annuel du GDR CNRS HydroGemm
15-17 novembre 2023
UPPA



PLAN

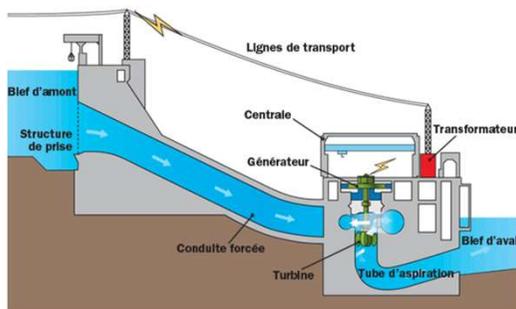
- ❑ Généralités et principales applications de Code_Aster
- ❑ Le modèle THM pour la poromécanique
- ❑ Exemples d'applications : le transitoire hydrogène pour le stockage de déchets radioactifs
- ❑ Un code en développement : Quelques exemples de développements récents pour la THM

GÉNÉRALITÉS

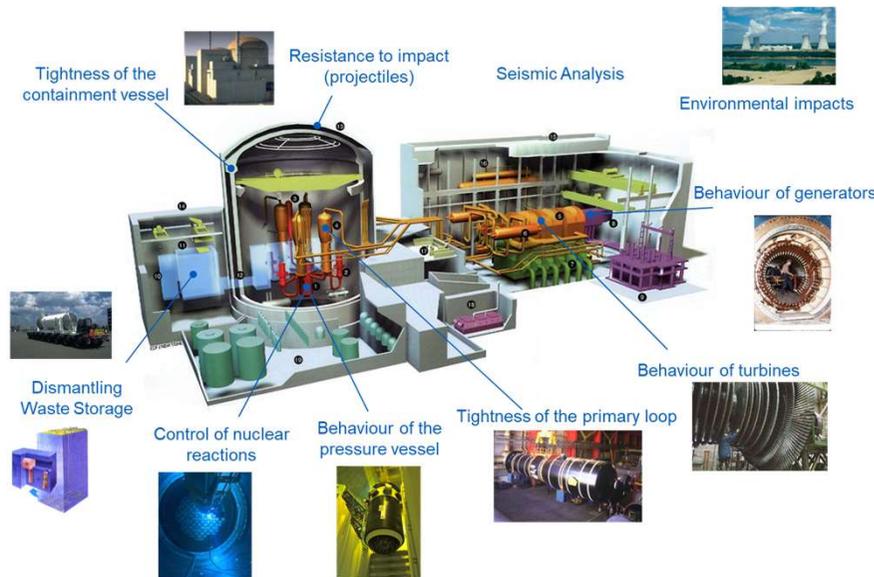
- ❑ Code_Aster : un code généraliste de mécanique sous licence GNU-GPL
 - ❑ Solveur basé sur la théorie de la mécanique des milieux continus, essentiellement basé sur les EF
 - ❑ Aujourd'hui 1 million de lignes de code et 25000 pages de documentations (code développé depuis plus de 30 ans)
 - ❑ Un processus AQ de développement, construction, déploiement, maintenance



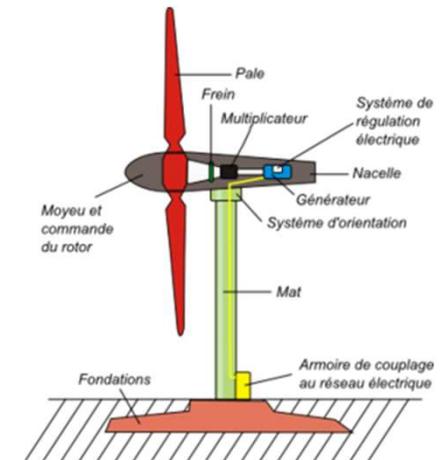
Hydro dams



Nuclear power plants



Renewables



www.code_aster.org



GÉNÉRALITÉS

□ Environnement Salome_meca



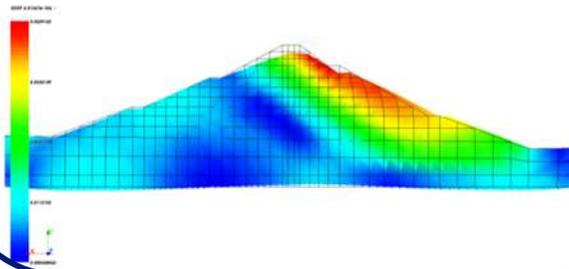
- CAO
- Maillage
- Job supervision and management
- Post-processing



PRINCIPALES APPLICATIONS POUR LES GÉOMATÉRIAUX

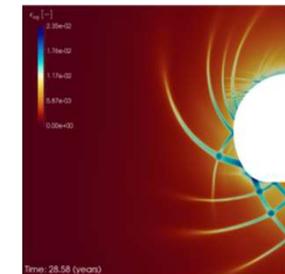
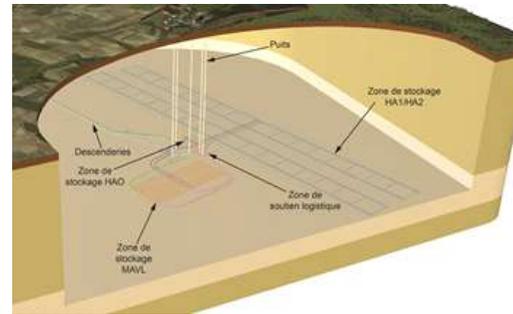
Ouvrages hydrauliques

- ✓ Vidange
- ✓ Tenue à la sismique, ...



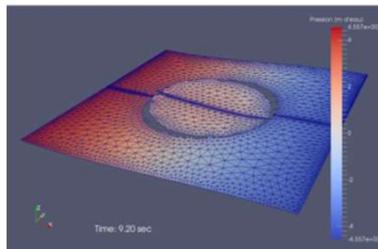
Modélisation des ouvrages de stockages géologique de déchets radioactifs (par ex; Cigéo)

- Creusement des galeries
- Dimensionnement des revêtements
- Dimensionnement THM
- Transitoire hydraulique-gaz ...



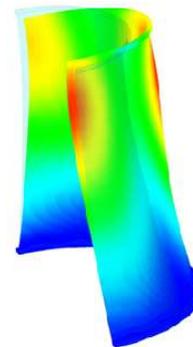
Eolien

- ✓ Tenue des fondations
- ✓ Supression du sol ...



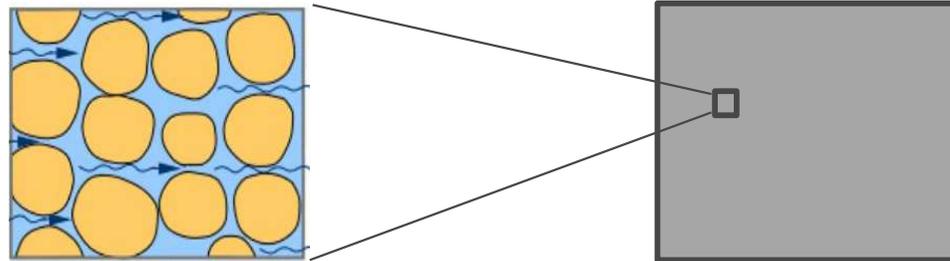
Génie civil

- ✓ Séchage
- ✓ Endommagement, ...



LA THM DANS CODE_ASTER

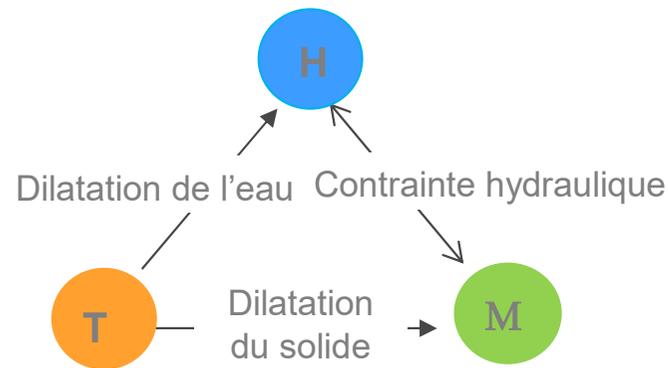
- Un module de poromécanique (THM macroscopique)



Grain + réseaux poreux

Milieu macroscopique

- Formalisme classique de Coussy (Contraintes de totale/effective – Biot)
- Couplage complet T.H.M



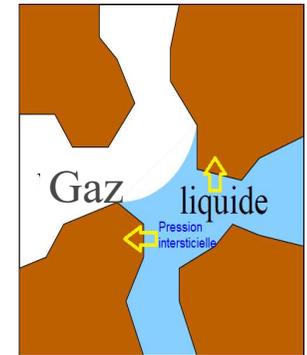
- Loi de la conservation des masses d'eau et d'hydrogène (H)
- Loi de conservation de l'énergie (T)
- Loi de conservation de la quantité de mouvement (M)

Résolution par éléments finis

LA THM DANS CODE_ASTER

□ Pour l'hydraulique

- Modèle diphasique classique liquide-gaz avec 2 composants (par ex. eau et hydrogène)
- Modèle diffusif/advectif
- Fluides compressibles (Gaz parfait + liquide)
- Loi de vaporisation + loi de Henry pour la dissolution
- Modèle capillaire (loi de succion type Van-Genuchten par exemple)



□ Pour la thermique

- Basé sur la conduction
- Possibilité de chainer avec un code purement thermique (Syrthes) pour problème de radiation et rayonnement

□ Pour la mécanique : des lois de comportement adaptées au type de matériaux

- Pour les sols : `'ELAS'`, `'MOHR-COULOMB'`, `'CJS'`, `'HUJEUX'`, `'CAM_CLAY'`, `'DRUCK-PRAGER'`, `'NLH_CSRM'`, `'LKR'`, ...
- Pour les matériaux gonflants : `'BBM'`, `'GonfElas'`
- Pour les bétons (lois d'endommagement) : `'MAZARS'`, `'ENDO_ISOT_BETON'`

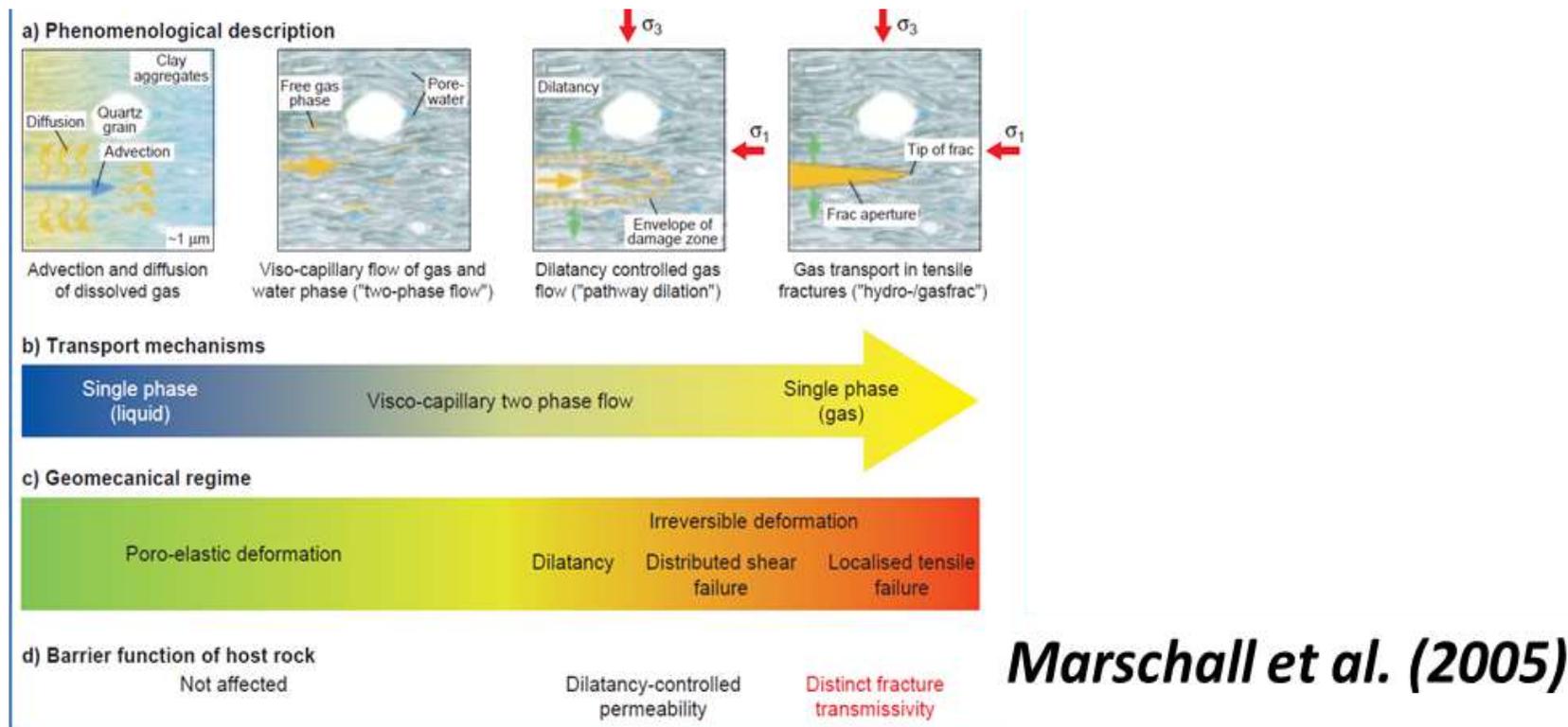
https://code-aster.org/V2/doc/default/fr/man_r/r7/r7.01.11.pdf

MODÉLISATION DU TRANSITOIRE HYDRAULIQUE- GAZ POUR LE STOCKAGE DES DÉCHETS RADIOACTIFS (EXEMPLES D'ÉTUDES)

GÉNÉRALITÉS

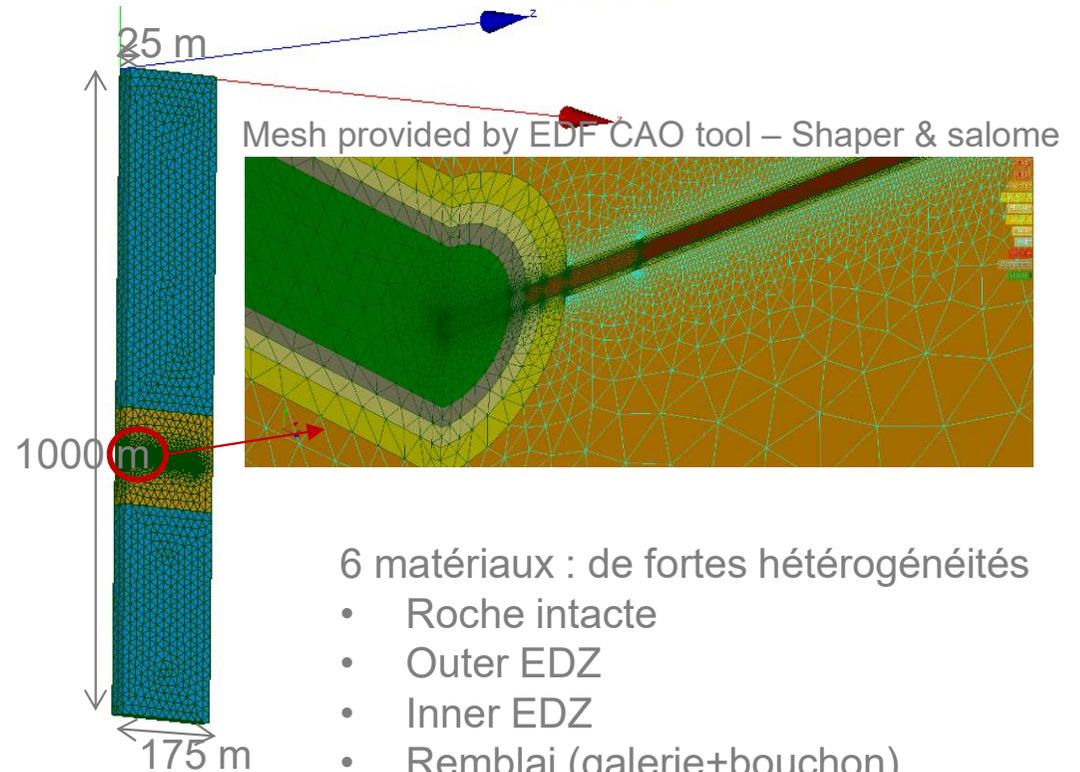
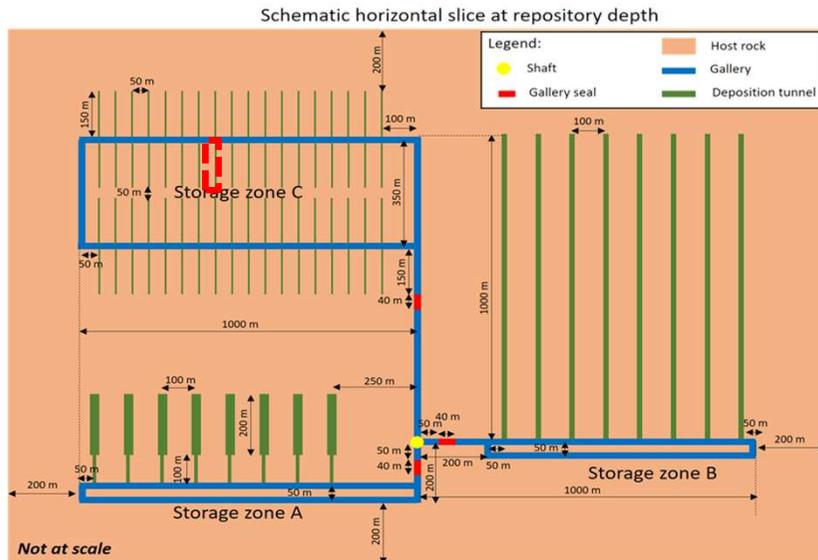
□ Problématique :

- Hydrogène produit par la corrosion des parties métalliques et/ou par radiolyse
- Modéliser le devenir de l'hydrogène : dans les galeries et dans la roche (pression < contraintes des sols)



MODÉLISATION GRANDE ÉCHELLE (1/2)

- Exemple sur une géométrie fictive (travaux réalisés dans le cadre du projet européen EURAD (2019-2024))



6 matériaux : de fortes hétérogénéités

- Roche intacte
- Outer EDZ
- Inner EDZ
- Remblai (galerie+bouchon)
- Béton
- déchet
- « vide »

- Chaleur produite par les colis dans les alvéoles
- Hydrogène produit au niveau des alvéoles (chemisage + colis) et des revêtements (ferrillages)

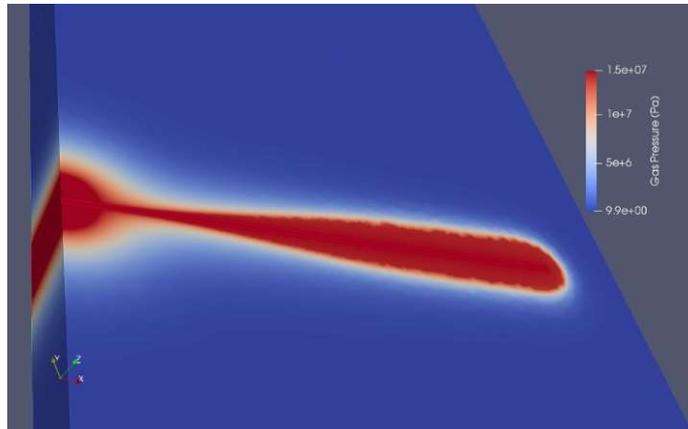
MODÉLISATION GRANDE ÉCHELLE (2/2)

❑ Modélisation THM non saturé (mécanique élastique)

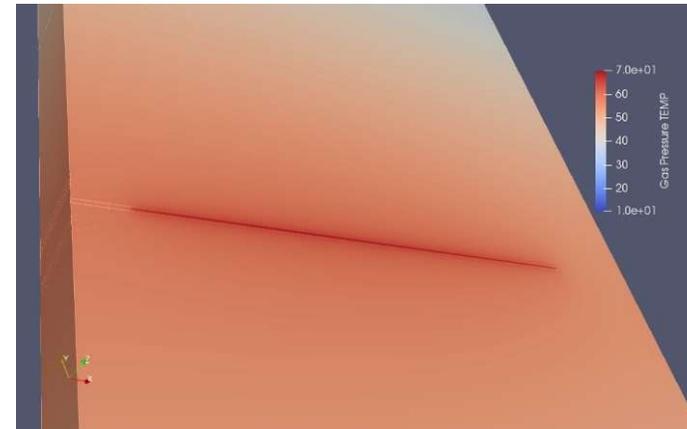
- ❑ De nombreuses non-linéarités (Courbes capillaires, perméabilités relatives, etc.)
- ❑ Sur 50 000 ans

❑ Calcul HPC (5 millions de DDL)

- ❑ Entièrement couplé
- ❑ 48 MPI processeurs
- ❑ Solveur linéaire itératif (Krylov iterative solver FGMRES with LDLT_DP preconditioner from PETSc's Library)



Pression de gaz (5000 ans)



Température (1000 ans)

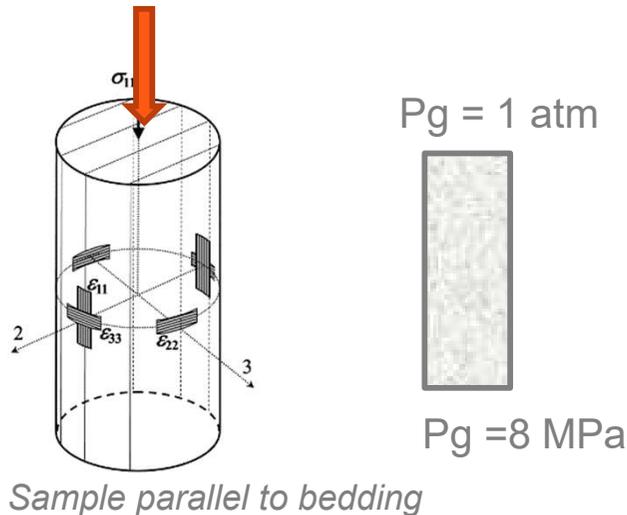
=> *Calcul numériquement "en limite"*

- ❑ Perspectives : développement de solveurs linéaires avec préconditionneurs adaptés aux problèmes diphasiques (thèse M. Ettaouchi)

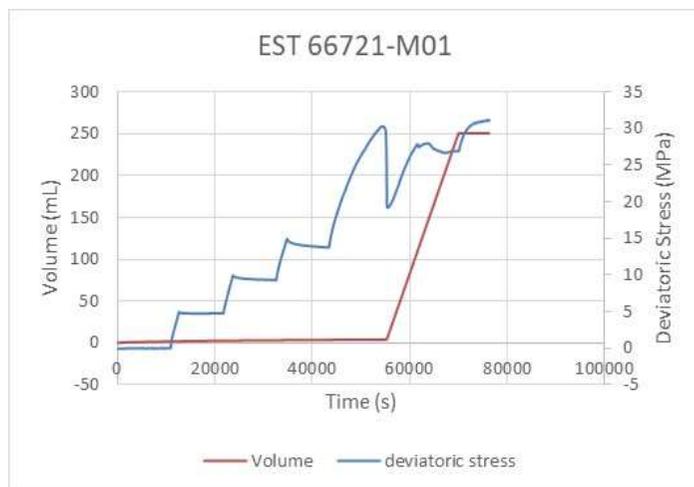
MODÉLISATION SUR ÉCHANTILLON (1/2)

□ Modélisation de l'injection de gaz dans un échantillon d'argile soumis à un essai triaxial (travaux réalisés dans EURAD)

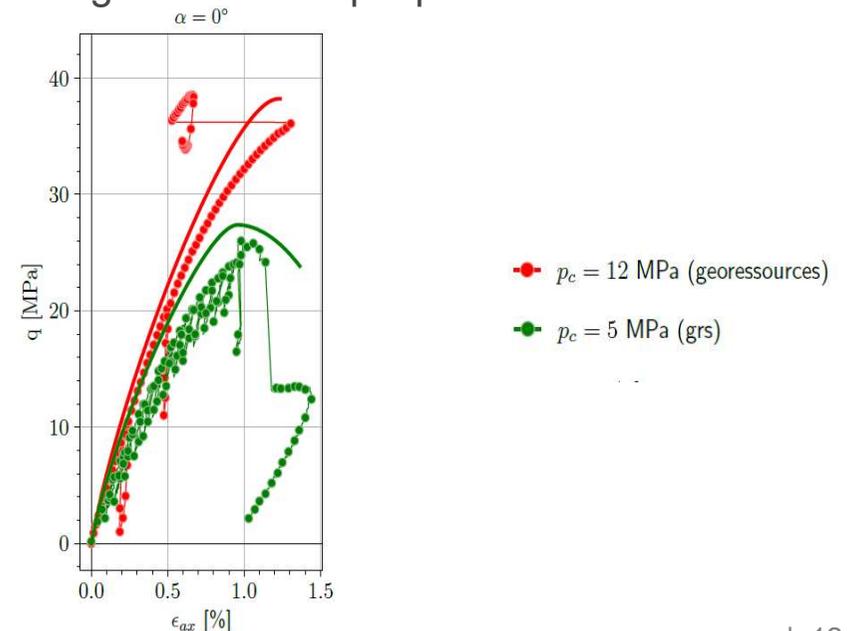
- Essais réalisés au laboratoire GeoRessource U. Lorraine (Mensan Agboli & Dragan Drgic)



Modèle HM non saturé
+ loi mécanique viscoplastique (LKR)
+ méthode de régularisation
+

$$K_{int}(\epsilon_p) = K_{int}^0 (1 + \kappa \langle \epsilon_p \rangle^\gamma)$$


Recalage en mécanique pure sur échantillon saturé

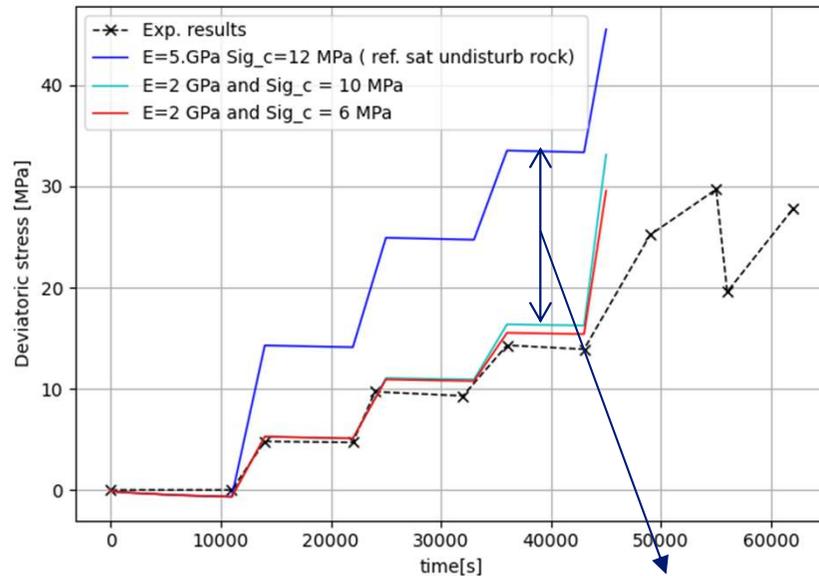


MODÉLISATION SUR ÉCHANTILLON (2/2)

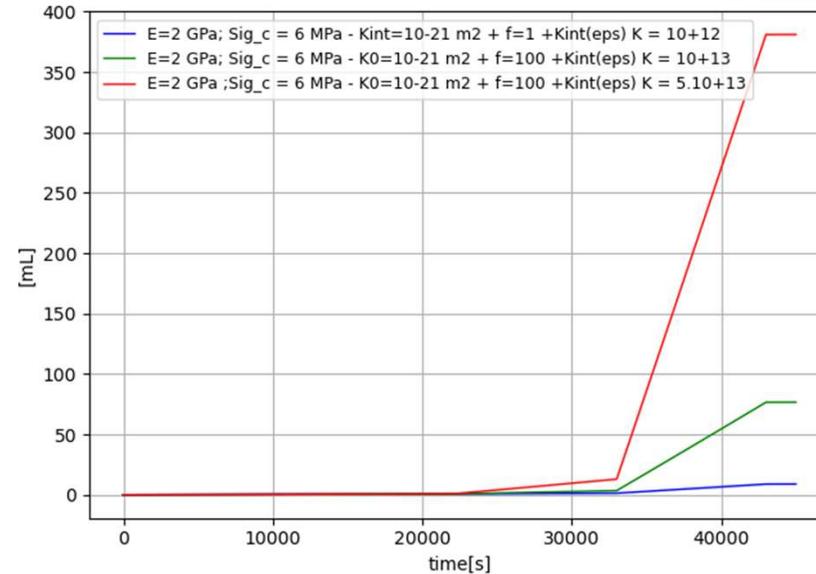
□ Modélisation de l'injection de gaz dans un échantillon d'argile soumis à un essai triaxial (travaux réalisés dans EURAD)



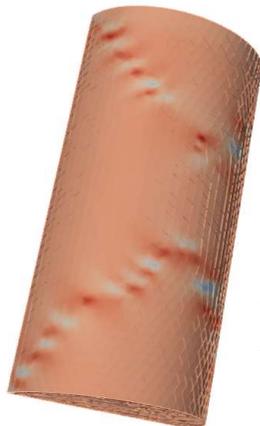
Triax Injection Gas with $P_{gas}=8\text{MPa}$ - Dev evolution $S_{ini} = 0.82$



Injected gas volume evolution



Echantillon initialement désaturé



Déformation plastique après 30000 s de chargement ($q \approx 12\text{ MPa}$)
Apparition de bande de localisation

Possibilité de recalibrer les grandes tendances expérimentales

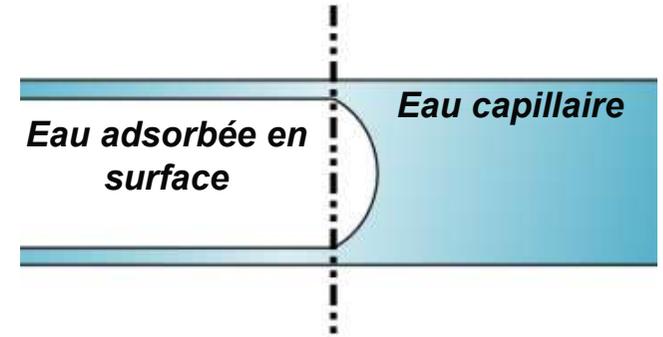
EXEMPLES DE DÉVELOPPEMENTS RÉCENTS

Modélisation du séchage (HR<50%)
Le calcul HPC

SÉCHAGE DU BÉTON (1/2)

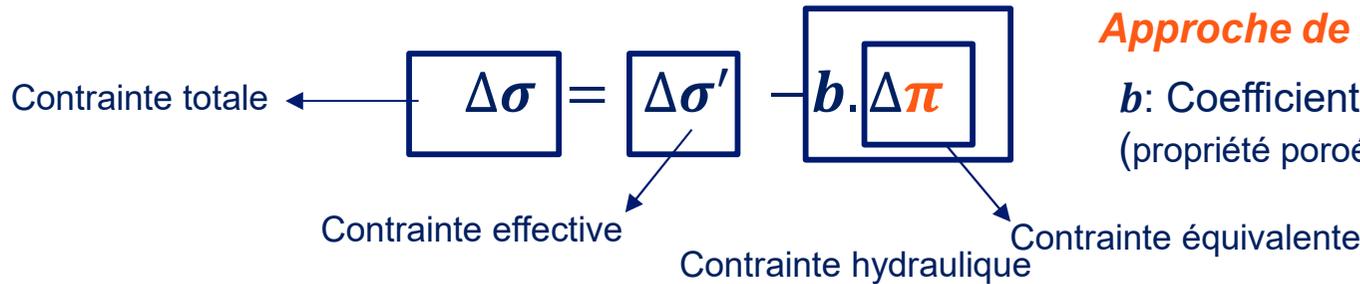
Thèse Ginger El Tabbal (2020)

- Objectifs : prendre en compte les phénomènes non capillaires pour les phénomènes de fort séchage (HR < 50%)



Approche de Terzaghi

b : Coefficient de Biot
(propriété poroélastique du matériau)



Nouveau modèle:

Effet capillaire

$$\pi = P_L \cdot S_L + P_G \cdot S_G + \frac{2}{3} \int_1^{S_L} P_c(S_L) \cdot dS_L + \frac{2}{3} (A_0 / \phi_0) \cdot \left(\int_0^\mu \omega_G \cdot \frac{\rho^w}{M^w} \cdot t(HR) \cdot d\mu - \left(\frac{\partial \gamma}{\partial \varepsilon} \right) \Big|_\mu \cdot \omega_G \right)$$

Effet adsorption

Modèle de (Coussy et al., 2003):

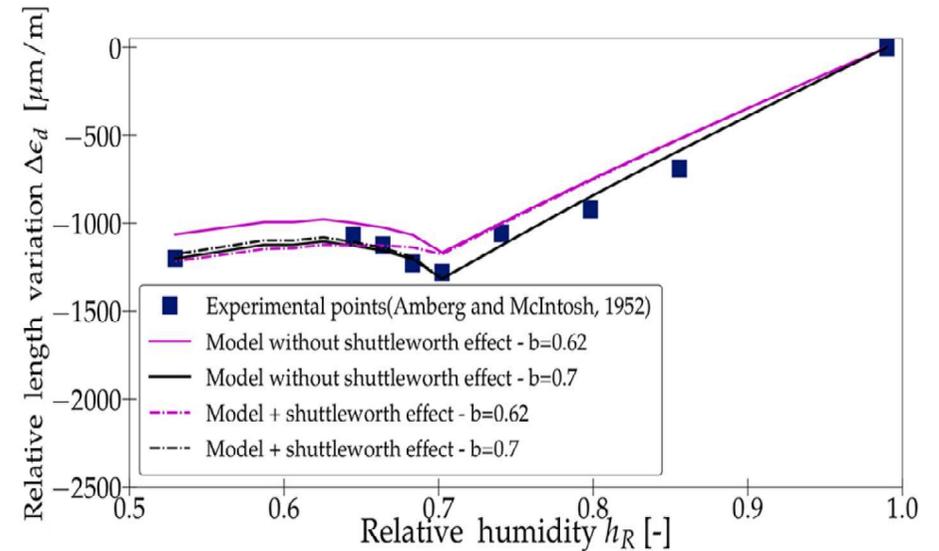
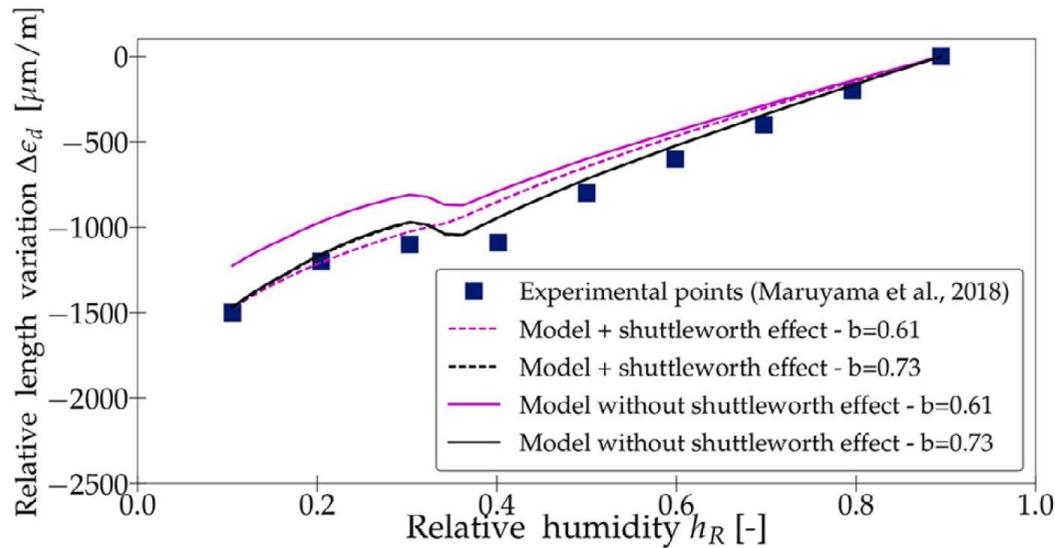
$$\begin{aligned} \pi &= P_L \cdot S_w + P_G \cdot (1 - S_w) \\ &+ \int_1^{S_w} P_c(S_w) \cdot dS_w \end{aligned}$$

$S_L(h_R)$: Fraction volumique d'eau liquide (eau non adsorbée)
 $\omega_G(h_R)$: Fraction surfacique de pores non saturés
 A_0 : Surface spécifique de matériau (surface des pores) en m^2/m^3



SÉCHAGE DU BÉTON (2/2)

Exemples de validation



El Tabbal, Ginger & Dangla, Patrick & Vandamme, Matthieu & Bottoni, Marina & Granet, S. (2020). Modelling the Drying Shrinkage of Porous Materials by Considering both Capillary and Adsorption Effects. Journal of the Mechanics and Physics of Solids. 142. 104016. 10.1016/j.jmps.2020.104016.

CALCULS HPC EN THM (1/2)

□ Des travaux en cours depuis 2019 pour des calculs massivement parallèles

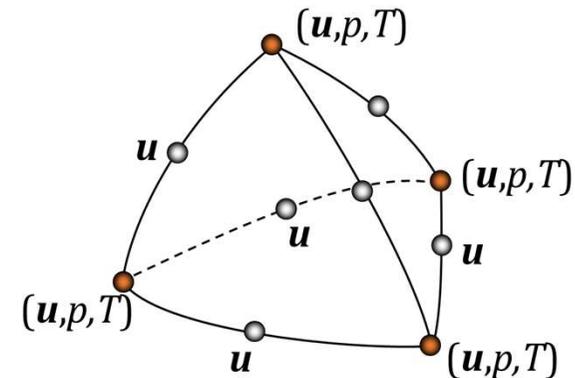
- pour bénéficier du nouveau parallélisme Code_Aster
- En développant des solveurs linéaires adaptés à la THM
 - Solveurs directs (MUMPS) : robustes mais gourmands en temps et en mémoire
 - Solveurs itératifs actuels : rapides mais instables et non dédiés à la THM

□ Thèse Ana Ordonez (EDF+ Cerfacs, soutenue en 2022)

- Développement de méthodes utilisant des préconditionneurs par blocs dédiés à la THM en saturé

• Système linéaire

$$\begin{bmatrix} A_{uu} & A_{up} & A_{uT} \\ A_{pu} & A_{pp} & A_{pT} \\ A_{Tu} & A_{Tp} & A_{TT} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \delta u \\ \delta p \\ \delta T \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} r_u \\ r_p \\ r_T \end{Bmatrix}$$



• Preconditionneur

$$P^{-1} = \begin{bmatrix} \tilde{A}_{uu}^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & I & 0 \\ 0 & 0 & I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I & -A_{up} & -A_{uT} \\ 0 & I & 0 \\ 0 & 0 & I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I & 0 & 0 \\ 0 & \tilde{A}_{pp}^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I & 0 & 0 \\ 0 & I & -A_{pT} \\ 0 & 0 & I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I & 0 & 0 \\ 0 & I & 0 \\ 0 & 0 & \tilde{A}_{TT}^{-1} \end{bmatrix}$$

Where $\tilde{A}_{xx}^{-1} = ksp(A_{xx}, AMG)$

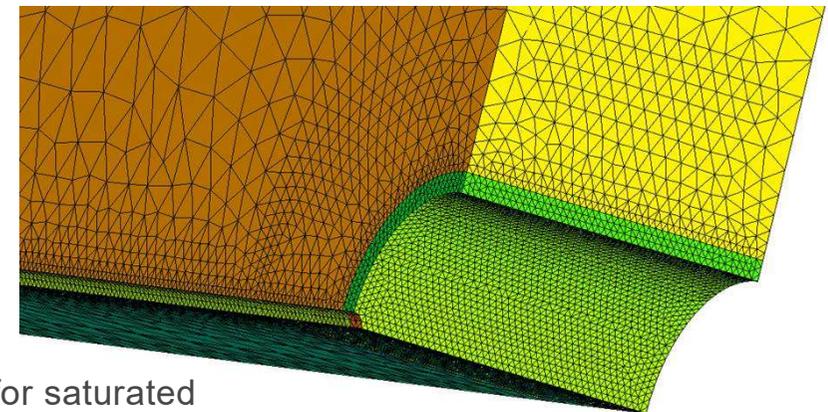
CALCULS HPC EN THM (2/2)

Ana Ordonez' PhD
(2022)

□ Simulation d'un problème industriel

- Excavation + consolidation
 - Plusieurs solveurs non linéaires (130 itérations de Newton en tout)
 - 10 étapes de consolidations (150 dans l'étude cible)
- Drücker-Prager avec écrouissage positif
- 64 nœuds (40 MPI chacun)

DOF	CPU	Total Solve time (s)
341 292 114	2 560	5300

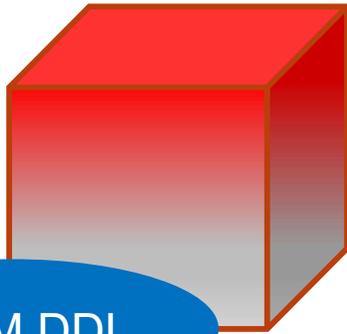


Ordonez, A.C., Tardieu, N., Kruse, C. et al. Scalable block preconditioners for saturated thermo-hydro-mechanics problems. Adv. Model. and Simul. in Eng. Sci. 10, 10 (2023).

□ Perspectives

- Application et exploitation industrielle des solveurs développés dans la thèse (écrouissage négatif, etc.)
- Thèse Mehdi Ettaouchi pour améliorer les solveurs pour des problèmes THM diphasiques => débutée en Mars 2023 (N. Tardieu EDF + C Kruse et L Giraud Cerfacs)

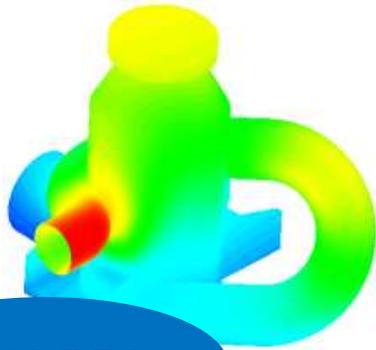
PERFORMANCE : RÉÉCRITURE DE CODE_ASTER



500 M DDL

Nouvelle architecture orientée objets
permettant une structure de données
entièrement distribuée

Sur 700 cœurs en moins de 2 mn

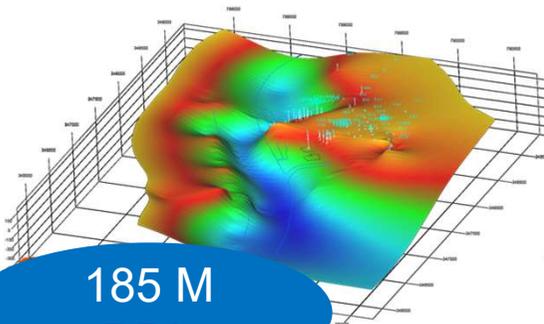


40 M DDL

Non-linear

Amélioration des traitements pour les
problèmes massivement parallèles

Sur 1080 cœurs en moins de 5 mn



185 M
DDL

Nouveaux solveurs itératifs issus de la librairie
PETSc

Sur 1080 cœurs en moins de 5 s
(un pas de temps sur 2000)



CONCLUSION

- ❑ **Code_Aster** : un code open source généraliste pour la géomécanique
 - ❑ Adapté aux problèmes diphasiques traitant de l'hydrogène et de l'eau dans les milieux poreux
 - ❑ Nombreuses lois de comportement mécaniques pour les sols et les roches

- ❑ **En développement constant** (interface Mfront pour faciliter l'intégration de lois de comportement)

- ❑ **Tourné vers les problèmes HPC**