

Approche stochastique multi-échelle de la propagation de fissures dans les matériaux hétérogènes

D. A. Hun¹, J. Guillemot², J. Yvonnet¹, M. Bornert³

¹ MSME, Université Paris-Est, France, julien.Yvonnet@univ-paris-est.fr

² CEE, Duke University, NC, USA, johann.guillemot@duke.edu

³ Navier, École des ponts ParisTech, France, michel.bornert@enpc.fr

Résumé — Dans ce travail, nous présenterons une approche stochastique pour caractériser la propagation de fissures dans des milieux hétérogènes à propriétés d'élasticité et d'endommagement mésoscopique. Les propriétés méso-élastiques sont obtenues via une méthode d'homogénéisation par fenêtre glissante sur des microstructures de référence. Le champ aléatoire traduisant le changement d'échelle est quantifié par un modèle probabiliste. Les propriétés de méso-endommagement sont déterminées par la résolution d'un problème inverse basé sur l'invariance de la réponse en efforts au travers des échelles.

Mots clés — Propagation de fissures, méthode champs de phase, méso-échelles, champs aléatoires non-gaussien, problème inverse.

1 Introduction

La modélisation de l'endommagement et des propriétés de résistance des matériaux fragiles ou quasi fragiles représentent un intérêt majeur dans les secteurs tels que le génie civil, la biomécanique, ou tout autre champ s'intéressant à l'intégrité mécanique de systèmes. Actuellement avec les moyens numériques de simulation et les avancées technologiques de reconstitution microstructurale décrivant la complexité naturelle du matériau, il est possible de pouvoir prédire le comportement d'une microstructure à la fracture [1]. Cependant, simuler un problème complet de l'échelle microscopique à macroscopique voir au-delà n'est pas actuellement traitable. Pour cette raison, des techniques multi-échelles ont été récemment développées. Dans le cadre de la fissuration, notre étude s'approche des travaux de [2] qui étudie les propriétés de matériaux dans des échelles inférieures à l'aide de volumes élémentaires représentatifs qu'il partitionne à l'aide des tessellations de Voronoï et où la propagation de fissure se déclare pour des seuils limites de contrainte. Dans ce travail nous utilisons une autre méthode pour générer les champs mésoscopiques semblable au travaux de [3] qui sera explicitée et nous utilisons la méthode champs de phase, une extension de la théorie de Griffith pour modéliser le processus de fissuration, afin de pouvoir proposer des propriétés matériaux mésoscopiques.

Dans ce papier, la première partie traitera de l'approche numérique permettant de propager les fissures pour constituer une base de données microscopique de référence et son impact sur les réponses macroscopiques. La deuxième partie décrit la méthode utilisée pour générer les champs d'élasticité mésoscopique. Le caractère aléatoire de ces champs sera étudié et identifié au travers d'une étude probabiliste. Enfin le problème d'optimisation sera explicité afin de permettre d'accéder à la seconde propriété mésoscopique : l'endommagement. Une étude comparative de la réponse mécanique macroscopique entre le modèle mésoscopique proposé, issue des microstructures de référence sera conduite.

2 Échelle microscopique

Dans cette section, l'approche de Monte-Carlo est utilisée pour quantifier les réponses macroscopiques de fissuration (réponse en force F et chemin de fissure Γ , voir Fig. 1 (a)-(b)) sur des échantillons de microstructures hétérogènes ($\theta = 1000$ réalisations) à fibres disposées aléatoirement, de rayon constant R , sur un domaine de longueur L et pré-fissuré sur la demi-hauteur (voir Fig. 2). Le contraste entre les propriétés d'élasticité et d'endommagement de la phase inclusion sur la matrice est de : $(k_i, \mu_i, g_{c,i}) = 10 \times (k_m, \mu_m, g_{c,m})$. Des sollicitations de cisaillement sont appliquées sur ces structures de référence au travers d'une condition limite de Dirichlet u_D .

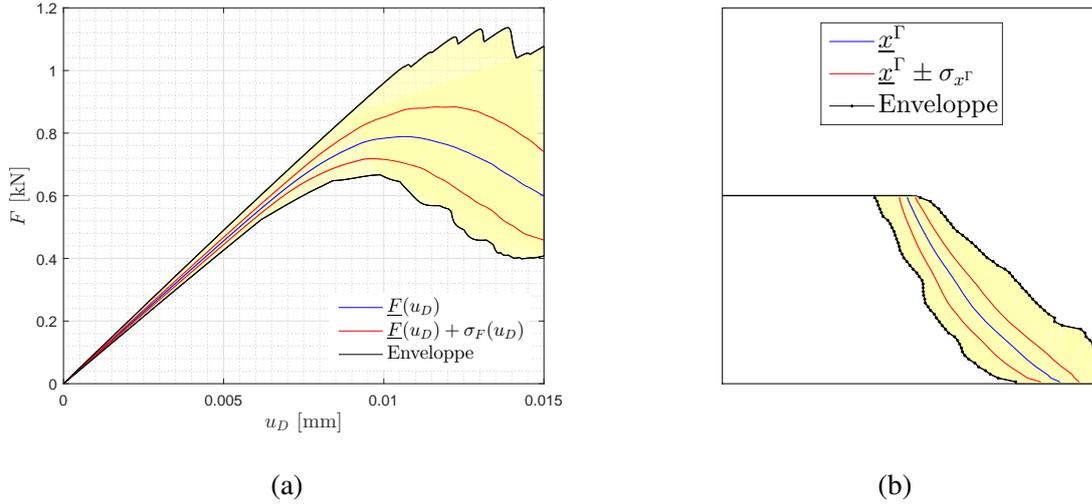


FIGURE 1 – Enveloppe, moyenne et écart-type pour (a) la courbe réponse en force : F et déplacement imposé : u_d et (b) le chemin de propagation de fissure.

La propagation de fissure est étudié au travers de simulations numériques utilisant la méthode champs de phase proposée dans [4]. La formulation repose sur une minimisation de l'énergie totale du système Ω et où la fissure est représentée par un champ d'endommagement d régularisé sur son voisinage. Cette méthode décrit un processus de fissuration couplé entre l'élasticité (Eqs. (1) - (2)) et l'endommagement (Eqs. (1) - (5)).

$$\begin{cases} \nabla \cdot [\sigma(\mathbf{u}, d)] = \mathbf{0} , \\ \frac{g_c}{\ell} (d - \ell^2 \Delta d) - 2(1-d) \mathcal{H}([\boldsymbol{\varepsilon}]) = 0. \end{cases} \quad (1)$$

Pour la partie de l'élasticité (linéaire), on suppose le comportement local isotrope par phase, réduisant la paramétrisation à une paire de coefficients : modules de compressibilité et de cisaillement (k, μ) . Le couplage s'effectue sur la relation de comportement, où la déformation est décomposée en partie négative ($\boldsymbol{\varepsilon}^-$) et positive ($\boldsymbol{\varepsilon}^+$) :

$$[\sigma(\mathbf{u}, d)] = \frac{\partial \Psi}{\partial [\boldsymbol{\varepsilon}]} = \mathbb{C}(\lambda, \mu) : [(\mathcal{D}(d) + \eta) \boldsymbol{\varepsilon}^+ + \boldsymbol{\varepsilon}^-]. \quad (2)$$

La loi de comportement choisie [5] permet au système lorsqu'il est endommagé ($\mathcal{D} \mapsto 0$) de pénaliser la partie positive de la contrainte uniquement. $0 < \eta \ll 1$ est un paramètre assurant une résistance résiduel du matériau endommagé, et les déformations ($\boldsymbol{\varepsilon}^+, \boldsymbol{\varepsilon}^-$) s'obtiennent par la décomposition spectrale suivante :

$$\boldsymbol{\varepsilon}^\pm = \sum_{i=1}^m \langle \boldsymbol{\kappa}_i \rangle^\pm \boldsymbol{\phi}_i \otimes \boldsymbol{\phi}_i \quad (3)$$

avec $\{(\boldsymbol{\kappa}_i, \boldsymbol{\phi}_i)\}_{i=1}^m$ sont les paires associées aux valeurs propres vecteurs, vecteurs propres. m représente la dimension du problème et l'opérateur $\langle \cdot \rangle^\pm$ est défini comme :

$$\langle z \rangle^\pm = \frac{1}{2} (z \pm |z|), \quad \forall z \in \mathbb{R} \quad (4)$$

Pour la partie endommagement, la loi de comportement est une diffusion de l'endommagement d paramétrée par ℓ la longueur de régularisation de la fissure et g_c un paramètre matériau représentant la densité d'énergie critique de fissuration. Le terme source de la propagation $\mathcal{H}([\varepsilon])$ est associé à l'histoire de l'énergie élastique de traction Ψ^+ :

$$\mathcal{H}(\mathbf{x}, t) = \max_{\tau \in [0, t]} \{ \Psi^+(\mathbf{x}, \tau) \}. \quad (5)$$

On propose dans cette étude, l'identification des paramètres matériaux (élasticité et endommagement) aux méso-échelles, soit : $(\tilde{k}, \tilde{\mu}, \tilde{g}_c)$.

3 Méso-élasticité

Ici on présente la méthode utilisée pour obtenir le champ d'élasticité mésoscopique, dans un cas 2D de déformation plane.

Une fenêtre circulaire de rayon \tilde{R} est définie et extraite au point d'intérêt \mathbf{x} dans un sous-domaine de la microstructure. Le rapport de taille $\tilde{\alpha}$ entre la fenêtre et le rayon de la fibre définit la méso-échelle (voir Fig. 2).

Une homogénéisation numérique classique est ensuite appliquée pour deux conditions limites (KUBC/SUBC : cinématiquement et statiquement uniforme) caractérisant le comportement apparent de la méso-échelle.

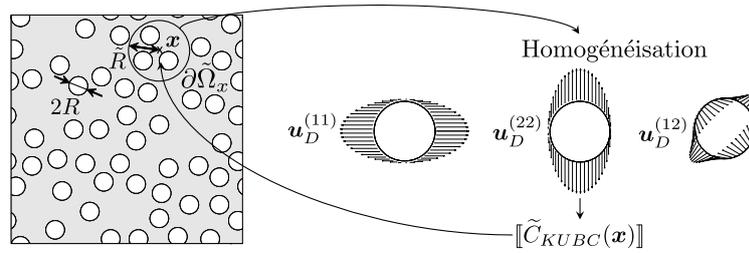


FIGURE 2 – Schéma de la méthode de filtrage (cas KUBC).

L'application de ce filtrage sur le contraste de l'élasticité peut être observée sur la figure Fig. 3 pour plusieurs rapports d'échelles (micro \mapsto macro).

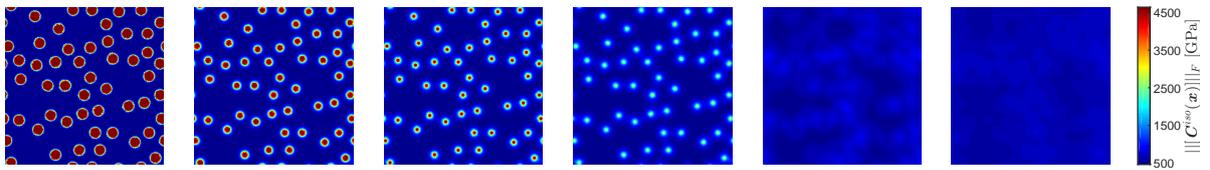


FIGURE 3 – Une réalisation du champ aléatoire $\{ \|[C^{iso}(\mathbf{x})]\|_F, \mathbf{x} \in \Omega \}$ pour $\tilde{\alpha} \in \{0.2, 0.6, 0.8, 1, 2, 4\}$ (de gauche à droite).

Ce méso-comportement devant respecter l'isotropie inhérente au modèle de fissuration choisi, est projeté sur la classe isotrope définie par l'Eq. (6), pondérant par ailleurs une erreur de projection quasi nulle pour un filtrage $\tilde{\alpha} > 3$.

$$(\tilde{k}_{BC}(\mathbf{x}), \tilde{\mu}_{BC}(\mathbf{x})) = \underset{k>0, \mu>0}{\operatorname{argmin}} \|[\tilde{C}_{BC}(\mathbf{x})] - [\tilde{C}_{BC}^{iso}(\mathbf{x})]\|_F. \quad (6)$$

Pour cette résolution, la non-séparation d'échelle est clairement établie. La répartition des champs aléatoires est analysée dans la suite par un modèle stochastique.

4 Modèle stochastique inféré

Cette section traitera de l'extraction de l'information probabiliste de la méso-élasticité avec un modèle théorique basé sur le principe du maximum d'entropie. L'intérêt est de pouvoir tout d'abord quantifier la réparation des champs aléatoires mésoscopiques et ensuite de construire un modèle théorique probabiliste (similairement aux travaux dans [6]) afin de pouvoir générer par ailleurs ces méso-élasticités sans passer par l'étape de filtrage, en tout point de l'espace, en particulier dans des zones d'intérêt proches des fissures (maillage fin). Sous les restrictions de moyenne et de fluctuation statistique des propriétés d'élasticité mésoscopique : $(\tilde{k}, \tilde{\mu})$, le principe de maximum d'entropie donne une distribution de l'information mésoscopique selon une loi de probabilité bi-variée :

$$\tilde{k}_{BC}(\mathbf{x}) = F_{G(p_{\tilde{k}}, q_{\tilde{k}})}^{-1} \left(F_{N(0,1)}(\Xi_1(\mathbf{x})) \right), \quad \tilde{\mu}_{BC}(\mathbf{x}) = F_{G(p_{\tilde{\mu}}, q_{\tilde{\mu}})}^{-1} \left(F_{N(0,1)}(\rho \Xi_1(\mathbf{x}) + \sqrt{1-\rho^2} \Xi_2(\mathbf{x})) \right), \quad (7)$$

où $F_{G(p,q)}^{-1}$ est la fonction de distribution cumulative inverse de la loi gamma, $F_{N(0,1)}$ la fonction de distribution cumulative de la loi gaussienne, (Ξ_1, Ξ_2) des champs gaussiens normalisés statistiquement indépendants et ρ : la corrélation statistique entre les paramètres $(\tilde{k}, \tilde{\mu})$.

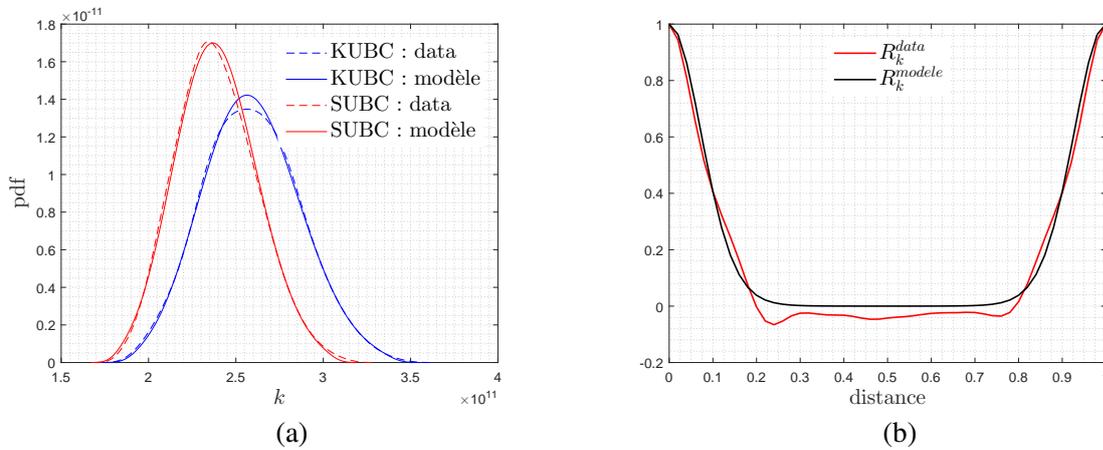


FIGURE 4 – (a) Estimations de la densité du noyau pour de la densité de probabilité du module méso-scopique de compressibilité \tilde{k} pour deux conditions aux limites : KUBC (bleu)/SUBC (rouge); (b) Identification de la structure de corrélation R_k avec la fonction cible r (noir, voir Eq. (8)).

La simulation de champs mésoscopiques synthétiques issus du modèle théorique est comparée aux données mésoscopiques filtrées directement sur les microstructures de référence (voir Fig. 4-a). La structure de corrélation a été capturée au travers d'une fonction cible r paramétrée (voir Fig. 4-b) tel que :

$$r(\tau; \alpha) = \exp \left(-\frac{2}{\alpha^2} \sin^2 \left(\frac{\pi \tau}{L} \right) \right). \quad (8)$$

La densité de probabilité jointe (voir Fig. 5) est également reproduite.

Finalement la construction de ce modèle robuste est capable sous les contraintes imposées de générer rapidement des champs mésoscopiques équivalents aux champs mésoscopiques filtrés sur les microstructures de référence. La comparaison entre les méso-élasticité directe et synthétique dans un processus de fissuration complet est étudié dans la suite, une fois l'identification des paramètres mésoscopiques d'endommagement déterminés.

5 Méso-endommagement

Muni de champs d'élasticité mésoscopique, le processus de fissuration nécessite un paramétrage sur les propriétés d'endommagement. N'ayant aucune information sur la nature de sa répartition aux échelles intermédiaires du champ \tilde{g}_c , l'identification de ce paramètre proposé comme homogène sera

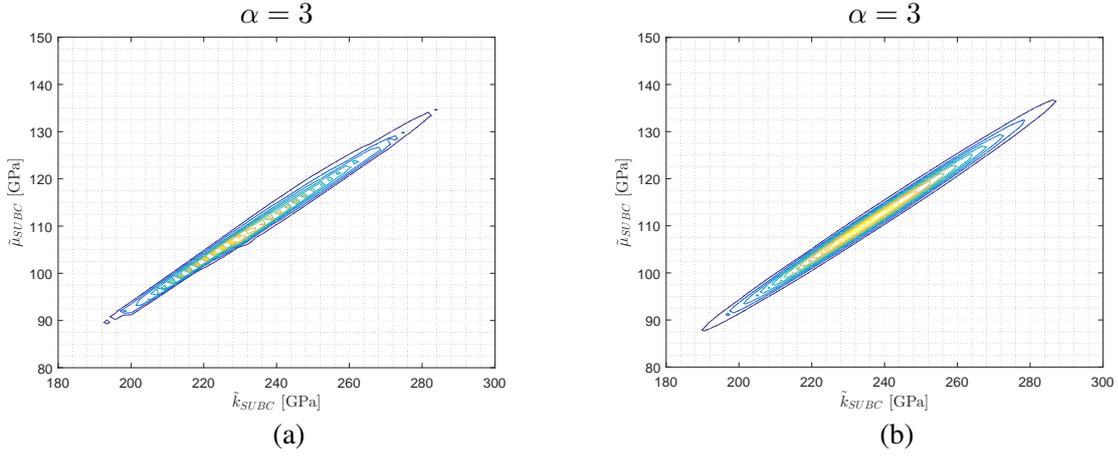


FIGURE 5 – Estimations de la densité du noyau pour la fonction de densité de probabilité jointe du module de compressibilité et de cisaillement des champs mésoscopique (a) de référence et (b) générée par le modèle probabiliste.

faite au travers d'une résolution d'un problème inverse reposant sur l'invariance moyenne de la résistance macroscopique maximale en force entre les échelles :

$$\tilde{g}_c = \tilde{g}_c^{opt} = \underset{g_c^e [g_{c,m}, g_{c,i}]}{\text{Argmin}} \mathcal{J}(\tilde{F}_{max}(\tilde{g}_c^*, \theta)), \quad (9)$$

où la fonction coût \mathcal{J} est définie comme :

$$j = \frac{|F_{max} - \tilde{F}_{max}(g_c^*)|}{F_{max}}. \quad (10)$$

La force \tilde{F} est obtenue sur une base de $N = 200$ réalisations. Pour les deux conditions limites de filtrage (KUBC/SUBC), le problème d'optimisation propose deux valeurs g_c mésoscopiques différentes (voir Fig. 6) avec une augmentation de $g_c^{KUBC} = 1.025 \times g_{c,m}$, et $g_c^{SUBC} = 1.25 \times g_{c,m}$ (voir Fig. 6 (a)). En utilisant ce paramètre d'optimisation comme le paramètre d'endommagement mésoscopique \tilde{g}_c , on peut observer son impact sur la réponse macroscopique en force (voir Fig. 6 (b)), ainsi que le trajet de fissure moyen (voir Fig. 7).

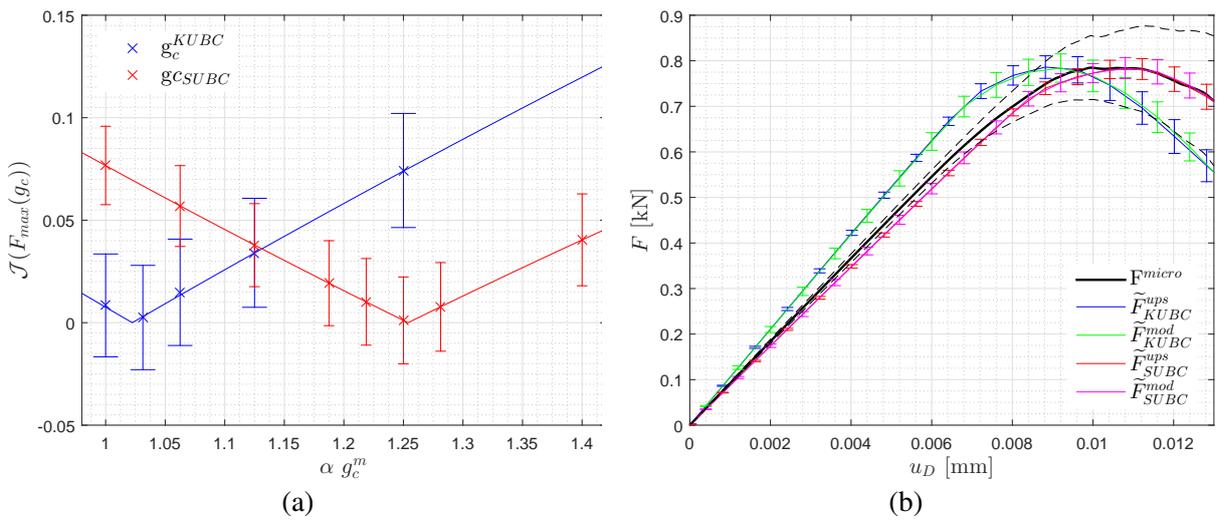


FIGURE 6 – (a) Identification de \tilde{g}_c par minimisation de la fonction coût \mathcal{J} ; (b) comparaison entre la réponse en force microscopique de référence et mésoscopique avec l'identification complète des propriétés mésoscopiques.

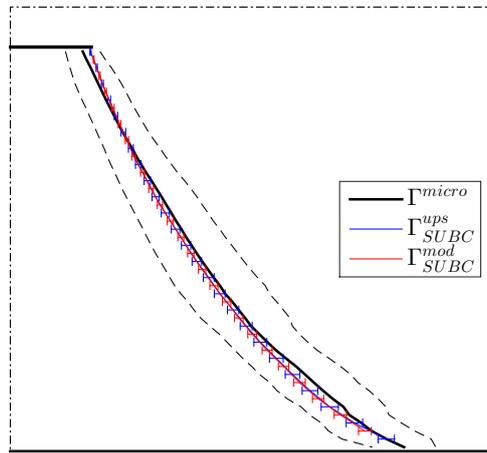


FIGURE 7 – trajectoire de fissure moyenne

Le comportement macroscopique moyen de fissuration à l'échelle mésoscopique est bien reproduit. On notera que sur l'aspect homogénéisation, que la condition aux limites SUBC permet une reproduction de la réponse moyenne en force bien meilleure que son analogue KUBC. Dans la théorie de l'homogénéisation, il a été démontré que la condition aux limites KUBC est une borne supérieure d'homogénéisation. Il a été également observé dans la littérature que cette condition limite dans le cas d'inclusions rigides raidissait globalement la structure. Concernant la partie stochastique, notons que les champs synthétiques générés par le modèle théorique probabiliste construit permettent de retrouver la même tenue mécanique moyenne que les méso-élasticités obtenues par filtrage directe.

6 Conclusion

Une approche stochastique pour modéliser la propagation de fissure dans un milieu aléatoire multi-échelles a été menée. La formulation s'appuyant sur la méthode champs de phase a été étendue avec l'identification de paramètres matériaux (élasticité et endommagement) obtenus par calculs multi-échelles. Les simulations de Monte-Carlo ont été d'abord effectuées sur des microstructures hétérogènes aléatoires de référence nous fournissant l'impact sur la variabilité des réponses macroscopiques. La définition de paramètres mésoscopiques a ensuite été traitée. Au point de vue de la méso-élasticité, elle est le résultat d'un filtrage basé sur de l'homogénéisation à fenêtre glissante sous deux conditions aux limites (KUBC/SUBC) ensuite projeté sur sa classe isotrope. La fluctuation entraînée par ce changement d'échelle a été quantifiée au travers d'un modèle stochastique, permettant par ailleurs une génération équivalente des champs méso-élastique robustes et rapide. Au point de vue de l'endommagement, l'identification de ce paramètre a été obtenue par la résolution d'un problème inverse basé sur la réponse en force macroscopique maximale. Les résultats montrent que les conditions aux limites SUBC utilisées permettent une reproduction fidèle de la réponse mécanique bien meilleure que la condition aux limites KUBC qui comme ce qui a été référencé dans la littérature provoque une augmentation de la raideur des propriétés apparentes. Il est à noter que le modèle stochastique proposé produit également les mêmes effets sur le processus de fissuration que les méso-structures où le filtre est appliqué directement. L'approche utilisée et les résultats quantitatifs ont été reportés dans [7].

Références

- [1] T.T Nguyen, J. Yvonnet, Q-Z. Zhu, M. Bornert. *A phase field method to simulate crack nucleation and propagation in strongly heterogeneous materials from direct imaging of their microstructure*, [Engineering Fracture Mechanics](#), page 18-39, 2015.
- [2] K.A. Acton, S.C. Baxter, B. Bahmani, P.L. Clarke, R. Abedi. *Voronoi tessellation based statistical volume element characterization for use in fracture modeling*, [Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering](#), page 135-155, 2018.
- [3] L.L. Graham, K. Gurley , F. Masters. *Non-Gaussian simulation of local material properties based on a moving-window technique*, [Probabilistic Engineering Mechanics](#), page 223-234, 2003.
- [4] B. Bourdin ,G.A. Francfort, J-J.Marigo. *The variational approach to fracture* [Journal of elasticity](#), [Journal of elasticity](#), page 5-148, 2008.
- [5] C. Miehe, M. Hofacker, F. Welschinger. *A phase field model for rate-independent crack propagation : Robust algorithmic implementation based on operator splits*, [Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering](#), page 2765-2778, 2010.
- [6] V. P. Tran, J. Guilleminot, S. Brisard, K. Sab. *Stochastic modeling of mesoscopic elasticity random field*, [Mechanics of Materials](#), page 1-12, 2016.
- [7] D.A. Hun, J. Guilleminot, J. Yvonnet, M. Bornert. *Stochastic Multi-Scale Modeling of Crack Propagation in Random Heterogeneous Media*, [International Journal for Numerical Methods in Engineering](#). (Submitted)