

Une approche multi-échelle basée sur les données pour la prédiction de l'endommagement anisotrope des structures

Z. Chafia^{1,2}, J. Yvonnet², J. Bleyer¹

¹ MSME, Université Gustave Eiffel, {zakaria.chafia2, julien.yvonnet}@univ-eiffel.fr

² NAVIER, Ecole des Ponts ParisTech, jeremy.bleyer@enpc.fr

Résumé — Une méthode multi-échelle basée sur les données est proposée pour modéliser l'endommagement anisotrope dans les structures quasi-fragiles. Cette approche utilise des résultats de calculs de fissuration sur des volumes élémentaires représentatifs (VER) comme données pour construire un modèle macroscopique de remplacement décrivant la loi de comportement et l'évolution des variables internes macroscopiques. Plus précisément, une analyse harmonique de l'évolution du tenseur élastique au cours de la fissuration dans le VER combinée à de l'homogénéisation numérique (Méthode DDHAD - Data Driven harmonic analysis of Damage) est utilisée pour définir le comportement et les variables internes macroscopiques. Des techniques d'interpolation sont appliquées pour évaluer les lois d'évolution de ces variables internes. Des applications à la propagation de fissures dans des structures composites sont présentées.

Mots clés — Endommagement, Modélisation multi-échelle, Anisotropie, Méthode champs de phase, Approches Data-Driven.

1 Introduction

Maîtriser l'évolution de la dégradation des structures et leur comportement à la rupture est un enjeu majeur pour assurer leur stabilité et optimiser leur dimensionnement. Généralement dans les structures, les matériaux hétérogènes sont les plus utilisés en raison de la diversité des propriétés qu'ils offrent, mais rendant le comportement à la rupture des structures fortement dépendant de la microstructure. Dans un objectif de prévision de la tenue de ces structures et de leur optimisation, le développement de méthodes numériques multi-échelles est un point crucial.

L'un des verrous actuels est de construire des modèles complets tridimensionnels pour modéliser et simuler la fissuration des matériaux hétérogènes à l'échelle de la structure en tenant compte de l'évolution des microfissures. Malgré l'avancée de la technologie et des moyens de calculs, il est difficile de modéliser une structure avec toutes ses hétérogénéités et de mener sur celle-ci des simulations en champs complets. La méthode multi-échelle FE^2 [6], constitue une approche possible pour simuler ces problèmes. Cependant, cette méthode reste très coûteuse en termes de temps de calcul. Notre projet de recherche s'intègre dans ce cadre, l'objectif étant de développer une approche à deux échelles permettant le calcul de l'endommagement des structures hétérogènes tout en permettant des simulations peu coûteuses en temps de calculs.

2 Une méthode multi-échelle d'endommagement anisotrope pour les matériaux quasi fragiles basée sur les données

Dans l'approche proposée, des calculs de fissuration à l'échelle d'un volume élémentaire représentatif (VER) sont menés dans une étape préliminaire (calculs off-line). La méthode de champs de phase [3, 2, 4, 5] est utilisée pour simuler la propagation de fissures à chaque incrément de chargement du VER. Une technique d'homogénéisation numérique (voir par exemple [7]) est appliquée pour évaluer le tenseur élastique effectif du VER au cours du chargement. Une analyse harmonique de l'endommagement [11] est utilisée pour décrire l'évolution de ce tenseur par un faible nombre de paramètres, utilisés comme variables internes (DDHAD model [8, 9]). Ces calculs sont menés dans une phase préliminaire

et stockés comme données. Celles-ci sont utilisées pour construire la loi de comportement et les lois d'évolution des variables interne à l'échelle macro par le biais de modèles de remplacement interpolés (surrogate models).

2.1 Problème à l'échelle microscopique

La simulation de la fissuration à l'échelle microscopique est établie par le biais de la méthode champs de phase (Phase field method) [3, 2, 4, 5]. Cette méthode, basée sur la minimisation de l'énergie totale, est devenue un outil très répandu pour décrire l'initiation et la propagation des fissures. La méthode Phase field est capable de traiter des géométries de fissures arbitraires et complexes, ainsi que la coalescence et la ramification des fissures. Ces avantages fournissent un cadre très robuste et bien adapté au cas de la fissuration des matériaux hétérogènes. Dans notre travail nous avons utilisé la formulation à seuil proposée dans [5].

2.2 Transition d'échelle : de l'échelle microscopique à l'échelle macroscopique

L'objectif de cette section est de développer les lois d'évolution des variables internes et de définir un modèle d'endommagement à l'échelle macroscopique.

2.2.1 Simulations « Offline » à l'échelle microscopique

Dans le but de capturer tous les mécanismes de dégradation du VER, plusieurs simulations d'endommagement sont établies en utilisant la méthode de champs de phase. Chaque simulation réalisée sur le VER, soumis aux conditions aux limites périodiques correspondant à une déformation macroscopique menant le VER à son état de dégradation complète.

Dans le cas 2D, considéré ici, le tenseur des déformations macroscopiques est constitué de trois composantes ($\bar{\epsilon}_{11}$, $\bar{\epsilon}_{22}$ et $\bar{\epsilon}_{12}$). Les trajectoires de chargement correspondent à des variations linéaires des déformations le long de lignes reliant le centre d'un ellipsoïde et des points répartis sur sa surface (voir Figure 1), dont l'équation est donnée par :

$$(E) : \frac{x^2}{\bar{\epsilon}_{11}^{max}} + \frac{y^2}{\bar{\epsilon}_{22}^{max}} + \frac{z^2}{\bar{\epsilon}_{12}^{max}} = 1$$

où $\bar{\epsilon}_{11}^{max}$, $\bar{\epsilon}_{22}^{max}$ et $\bar{\epsilon}_{12}^{max}$ représentent les valeurs maximales des composants de toutes les déformations macroscopiques, et :

$$\begin{cases} x = \bar{\epsilon}_{11}^{max} \cos(\theta) \sin(\varphi) \\ y = \bar{\epsilon}_{22}^{max} \sin(\theta) \cos(\varphi) \\ z = \bar{\epsilon}_{12}^{max} \sin(\varphi) \end{cases} \quad \text{avec } \theta \in [0, 2\pi] \quad \text{et } \varphi \in \left[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right]$$

Le long de chaque trajectoire, le chargement est discrétisé. Pour chacun des états de chargements obtenus, la méthode de champ de phase est appliquée et le tenseur élastique effectif $\bar{\mathbb{C}}$ est calculé par homogénéisation numérique (voir par exemple [7]).

2.2.2 Analyse harmonique de l'endommagement et calcul des variables internes

Le cadre proposé pour construire le modèle d'endommagement macroscopique anisotrope suit la méthode Data Driven Harmonic Analysis of Damage (DDHAD) proposée dans [8, 9]. Celle-ci combine un cadre numérique avec l'approche proposée dans [10, 11, 12], où des fonctions d'orientations sont introduites pour définir le tenseur élastique et l'état endommagé. Une approche harmonique permet ensuite de paramétrer ses fonctions d'orientation par le biais de leur identification en séries de Fourier. Dans ce cadre, deux fonctions d'orientations sont introduites :

$$\begin{aligned} \bar{\eta}(\theta, t) &= \mathbf{N}(\theta) : \bar{\mathbb{C}}(t) : \mathbf{N}(\theta) = n_i n_j n_k n_l \bar{\mathbb{C}}_{ijkl}(t) \\ \bar{\kappa}(\theta, t) &= \mathbf{I} : \bar{\mathbb{C}}(t) : \mathbf{N}(\theta) = \delta_{ij} n_k n_l \bar{\mathbb{C}}_{ijkl}(t) \end{aligned}$$

où $\bar{\eta}(\theta, t)$ et $\bar{\kappa}(\theta, t)$ représentent, respectivement, le module d'élongation et le module de compressibilité à l'état endommagé du VER à l'instant t (t représente l'évolution du chargement), $\bar{\mathbb{C}}(t)$ est le tenseur

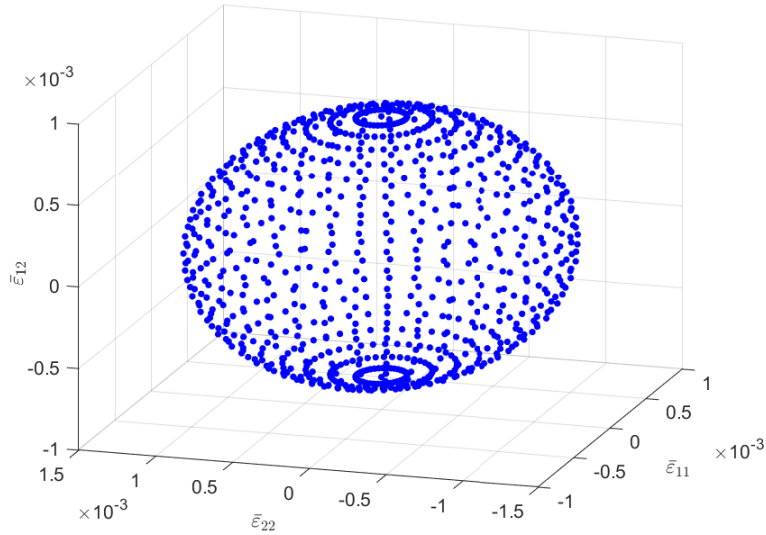


FIGURE 1 – Surface extérieure d’un ellipsoïde utilisé pour définir les trajets de chargements sur le VER avec $\bar{\epsilon}_{11}^{max} = 0.001$, $\bar{\epsilon}_{22}^{max} = 0.0012$ et $\bar{\epsilon}_{12}^{max} = 0.0008$

de rigidité effectif endommagé du VER à l’instant t , \mathbf{I} est le tenseur identité et $\mathbf{N}(\theta) = \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}$ avec $\mathbf{n} = \begin{pmatrix} \cos(\theta) \\ \sin(\theta) \end{pmatrix}$.

Ces fonctions unidirectionnelles permettent de construire un modèle d’endommagement par le biais de nouvelles fonctions d’orientations telles que :

$$\bar{\eta}(\theta, t) = [1 - \bar{d}(\theta, t)] \bar{\eta}_0(\theta)$$

$$\bar{\kappa}(\theta, t) = [1 - \bar{h}(\theta, t)] \bar{\kappa}_0(\theta)$$

où $\bar{d}(\theta, t)$ et $\bar{h}(\theta, t)$ sont les fonctions d’orientations d’endommagement, $\bar{\eta}_0(\theta)$ et $\bar{\kappa}_0(\theta)$ représentent, respectivement, le module d’élongation et le module de compressibilité du VER non endommagé.

Les fonctions d’orientations d’endommagement $\bar{d}(\theta, t)$ et $\bar{h}(\theta, t)$ peuvent être développées en deux séries de Fourier où les coefficients sont des tenseurs d’ordre pair [1] :

$$\bar{d}(\theta, t) = \bar{d}_0(t) + \bar{\mathbf{D}}(t) : \mathbf{F}(\theta) + \bar{\mathbb{D}}(t) :: \mathbb{F}(\theta)$$

$$\bar{h}(\theta, t) = \bar{h}_0(t) + \bar{\mathbf{D}}(t) : \mathbf{F}(\theta)$$

avec $\{1, \mathbf{F}, \mathbb{F}, \dots\}$ constituant une base orthogonale et $\bar{d}_0(t)$, $\bar{h}_0(t)$, $\bar{\mathbf{D}}(t)$ et $\bar{\mathbb{D}}(t)$ sont des coefficients scalaires et tensoriels. Ces coefficients fournissent un choix naturel pour les variables internes macroscopiques d’endommagement. En exploitant les propriétés de symétrie des tenseurs $\bar{\mathbf{D}}(t)$ et $\bar{\mathbb{D}}(t)$, seulement six variables internes au maximum suffisent pour représenter complètement et de manière exacte le tenseur élastique endommagé [12]. Dans le cas 2D, celles-ci sont définies par [9] :

$$\bar{\alpha}_1 = \bar{d}_0, \bar{\alpha}_2 = \bar{h}_0, \bar{\alpha}_3 = \bar{D}_{11}, \bar{\alpha}_4 = \bar{D}_{12}, \bar{\alpha}_5 = \bar{D}_{1111}, \bar{\alpha}_6 = \bar{D}_{1112}$$

2.2.3 Construction du modèle d’endommagement anisotrope à l’échelle macroscopique

Le modèle d’endommagement DDHAD [8, 9] fournit un modèle d’endommagement anisotrope sous la forme simple suivante :

$$\bar{\mathbb{C}}(\boldsymbol{\alpha}) = \bar{\mathbb{C}}^0 - \sum_m \tilde{\mathbb{C}}_m \bar{\alpha}_m \quad (1)$$

avec $\bar{\mathbb{C}}^0$ représente le tenseur élastique effectif du VER non endommagé et $\tilde{\mathbb{C}}_m$ sont des tenseurs dépendant seulement de l’état non endommagé du VER. Le détail de ces opérateurs peut être trouvé dans [9].

L'évolution des variables d'endommagement macroscopiques $\bar{\alpha}$ est fourni par interpolation des relations $\bar{\varepsilon}$ - $\bar{\alpha}$ pré-calculées lors des calculs off-line. Pour cela, l'ellipsoïde décrivant le domaine paramétrique associé aux déformations macroscopiques est discrétisé et maillé. Une interpolation par le biais des fonctions de forme éléments finis dans ce maillage permet d'évaluer continument les variables d'endommagement en 2D, pour des déformations macroscopiques $\bar{\varepsilon}$ données sous la forme :

$$\bar{\alpha}_i = f_i(\bar{\varepsilon}_{11}, \bar{\varepsilon}_{22}, \bar{\varepsilon}_{12}) \quad (2)$$

2.3 Problème à l'échelle macroscopique

Après avoir déterminé les lois d'évolutions des variables internes d'endommagement et le modèle de dégradation du tenseur de rigidité. Les simulations « on-line » à l'échelle macroscopique peuvent être menées. Nous considérons une structure définie par un domaine $\bar{\Omega} \subset \mathbb{R}^2$ et par sa frontière $\partial\bar{\Omega}$ composée de parties associées aux conditions aux limites de Dirichlet et de Neumann, respectivement ; notées $\partial\bar{\Omega}_u$ et $\partial\bar{\Omega}_F$. Le problème à résoudre à l'échelle macroscopique est donné par :

$$D_{\delta\bar{u}}\bar{\mathcal{E}}(\bar{\mathbf{u}}, \bar{\alpha}) = \int_{\bar{\Omega}} \frac{\partial\bar{\Psi}_e}{\partial\bar{\varepsilon}}(\bar{\varepsilon}(\bar{\mathbf{u}}), \bar{\alpha}) : \bar{\varepsilon}(\delta\bar{\mathbf{u}})d\bar{\Omega} - \int_{\bar{\Omega}} \bar{\mathbf{f}} \cdot \delta\bar{\mathbf{u}}d\bar{\Omega} - \int_{\partial\bar{\Omega}_F} \bar{\mathbf{F}}^* \cdot \delta\bar{\mathbf{u}}d\bar{\Omega} = 0$$

avec

$$\bar{\Psi}_e(\bar{\varepsilon}(\bar{\mathbf{u}}), \bar{\alpha}) = \frac{1}{2}\bar{\varepsilon}(\bar{\mathbf{u}}) : \bar{\mathbb{C}}(\bar{\alpha}) : \bar{\varepsilon}(\bar{\mathbf{u}})$$

et $\bar{\mathbb{C}}(\bar{\alpha})$ est donné par (1). L'évolution des variables internes est évaluée en utilisant la base de données (2). Le modèle d'endommagement obtenu par les données reste cependant un modèle local à l'échelle macro. Une régularisation est alors nécessaire pour garantir la convergence par rapport au raffinement du maillage. Pour cela, deux stratégies sont expérimentées. La première réalise une régularisation du champ des déformations macroscopiques (voir par exemple [13]). Celle-ci consiste à résoudre une équation différentielle, contenant des dérivées d'ordre supérieur du tenseur des déformations, exprimée comme suit :

$$\bar{\varepsilon} = \tilde{\varepsilon} - \bar{\ell}_0^2 \Delta \tilde{\varepsilon}$$

avec $\Delta(\cdot)$ est l'opérateur Laplacien, $\bar{\varepsilon}$ est la déformation calculée par le problème de déplacement (??), $\tilde{\varepsilon}$ est la déformation régularisée et $\bar{\ell}_0$ représente la longueur caractéristique à l'échelle macroscopique. Dans ce travail, la régularisation est réalisée sur chaque composantes $\bar{\varepsilon}_{ij}$.

Par la suite, Les variables d'endommagement non-locales sont calculées par :

$$\bar{\alpha}_i = f_i(\tilde{\varepsilon})$$

Une seconde option est d'effectuer la régularisation des différentes variables internes obtenues par ((2)) vérifiant :

$$\bar{\alpha}_i = \tilde{\alpha}_i - \bar{\ell}_0^2 \Delta \tilde{\alpha}_i$$

avec

$$\bar{\alpha}_i = f_i(\tilde{\varepsilon})$$

3 Exemple numérique

Nous considérons une structure de forme carrée et de côté $L = 19 \text{ mm}$ avec un trou de rayon $R = 0.19L$, soumise aux conditions aux limites présentées dans la figure 2a. Un maillage macro non uniforme est défini dans la zone de propagation de la fissure avec $h_{min} = 0.01 \text{ mm}$ et $h_{max} = 0.1 \text{ mm}$ ailleurs. La longueur de régularisation à l'échelle macroscopique est $\bar{\ell}_0 = 0.1 \text{ mm}$. Un déplacement $\bar{u}(t)$ est appliqué sur le bord supérieur de la structure avec un incrément $\bar{U} = 7,5.10^{-6} \text{ mm}$.

La microstructure est caractérisée par un VER carré de coté $l = 1 \text{ mm}$ contenant une inclusion circulaire plus rigide de rayon $r = 0.2 \text{ mm}$ (voir figure 2b). les propriétés mécaniques de l'inclusion sont : $E_i = 10000 \text{ GPa}$, $\nu_i = 0.3$ et $\sigma_c^i = 10000 \text{ GPa}$. Les propriétés mécaniques de la matrice sont :

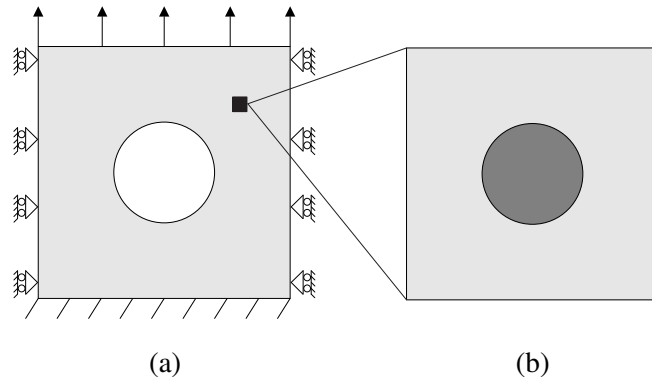


FIGURE 2 – (a) Structure à l'échelle macroscopique avec conditions aux limites appliquées ; (b) Volume élémentaire représentatif (VER).

$E_m = 52 \text{ GPa}$, $\nu_m = 0.3$ et $\sigma_c^m = 0.03 \text{ GPa}$. Le maillage micro est uniforme de taille $h_{max} = 0.01 \text{ mm}$. La longueur de régularisation à l'échelle microscopique est choisie comme $l_0 = 0.02 \text{ mm}$.

Des résultats préliminaires sont présentées dans les figures 3 et 4, présentant respectivement la distribution de la variable d'endommagement $\bar{\alpha}_1$ et la courbe de réponse force/déplacement de la structure. Dans chaque cas, nous avons comparé les résultats pour l'approche de régularisation basée sur la déformation ou sur les variables d'endommagement. Nous constatons que pour ce cas, une légère différence est constatée. Des validations basées sur des calculs de structures complètement maillées doivent être menées prochainement pour analyser la qualité des différentes stratégies.

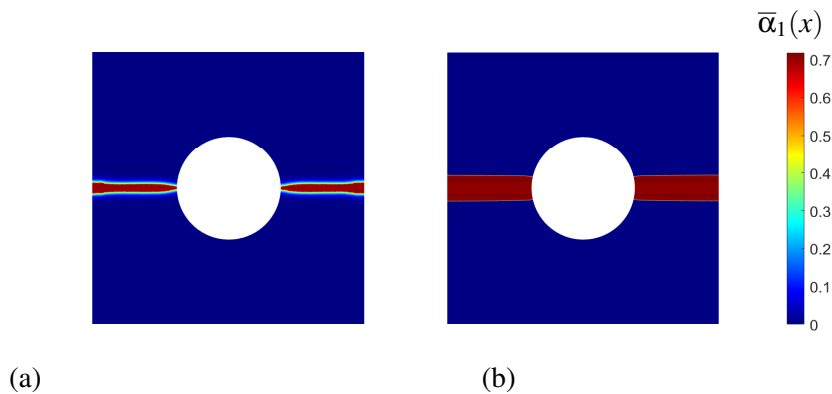


FIGURE 3 – Distribution de la variable interne d'endommagement $\bar{\alpha}_1(x)$: (a) approche par régularisation de l'endommagement ; (b) approche par régularisation de la déformation.

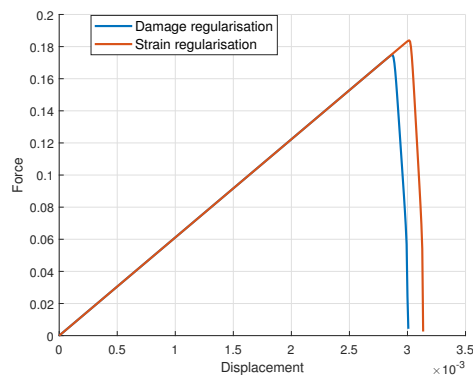


FIGURE 4 – Courbes force-déplacement pour les deux approches de régularisation (Régularisation de la déformation (courbe rouge) et la régularisation de l'endommagement (courbe bleue)).

4 Conclusion

Une méthode multi échelle pour la prédiction de l'endommagement des structures hétérogènes basée sur les données a été proposée. Dans cette approche, des calculs de fissuration combinés avec de l'homogénéisation numérique sont menés sur des volumes élémentaires représentatifs (VERS). A partir de ces calculs, une analyse harmonique est utilisée pour décrire le comportement homogénéisé et les variables internes macroscopiques. Ces résultats sont utilisés comme données, et une technique d'interpolation est appliquée pour décrire les lois d'évolution de ces variables internes. Nous avons appliqué cette approche à la propagation de fissure dans une structure composite et avons étudié les influences de plusieurs paramètres de la méthode telles que les techniques de régularisation des variables internes à l'échelle macroscopique. Les travaux en cours concernent la validation de ces résultats par des calculs de référence en champs complets sur des structures hétérogènes et l'étude de VERs induisant des anisotropies plus fortes.

Références

- [1] A.J.M. Spencer. *A note on the decomposition of tensors into traceless symmetric tensors*, International Journal of Engineering Science, 8(6) :475–481, 1970.
- [2] B. Bourdin. *Numerical implementation of the variational formulation of quasistatic brittle fracture*, Interface Free Bound., 9 :411–430, 2007.
- [3] B. Bourdin, G.A. Francfort, and J.J. Marigo. *Numerical experiments in revisited brittle fracture*, J. Mech. Phys. Solids, 48 :797–826, 2000.
- [4] B. Bourdin, G.A. Francfort, and J.J. Marigo. *The Variational Approach to Fracture*, Springer-Verlag, Berlin, 2008.
- [5] Christian Miehe, Lisa-Marie Schaezel, and Heike Ulmer. *Phase field modeling of fracture in multi-physics problems. part i. balance of crack surface and failure criteria for brittle crack propagation in thermo-elastic solids*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 294 :449–485, 2015.
- [6] F. Feyel. *Multiscale FE2 elastoviscoplastic analysis of composite structures*, Computational Materials Science, 16(1) :344–354, December, 1999.
- [7] J. Yvonnet. *Computational Homogenization of Heterogeneous Materials with Finite Elements*, Springer Nature, 2019.
- [8] J. Yvonnet, Q.-C. He, P. Li, *A data-driven harmonic approach to constructing anisotropic damage models with a minimum number of internal variables*, Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 162 :104828, 2022.
- [9] J. Yvonnet, Q.-C. He, P. Li, *Reducing internal variables and improving efficiency in data-driven modeling of anisotropic damage from RVE simulations*, Computational Mechanics, 72 : 37–55, 2023.
- [10] P. Ladevèze. *Sur une théorie de l'endommagement anisotrope*, Rapport interne No. 34, Laboratoire de Mécanique et Technologie, 1983.
- [11] Q.-C. He and A. Curnier. *A more fundamental approach to damaged elastic stress-strain relations*, International Journal of Solids and Structures, 32(10) :1433–1457, 1995.
- [12] Q.-C. He and A. Curnier. *Characterising a 2D elasticity tensor by two orientation distribution functions*, In Proc. of 1994 IUTAM Symposium on "Anisotropy, Inhomogeneity and Nonlinearity in Solid Mechanics", pages 25–30, 1995.
- [13] R.H.J Peerlings R De and J De Vree. *Gradient enhanced damage for quasi-brittle materials*, International Journal for numerical methods in engineering, 39(3391-3403) :68, 1996.