

Simulation numérique de la fissuration d'un matériau granulaire cimenté par une approche peridynamique

Xavier Frank^a, Jean-Yves Delenne^a

a. IATE, UMR1208 INRA-CIRAD-Montpellier Supagro-Université Montpellier 2,
2 place Pierre Viala - 34060 Montpellier cedex 01, France

Résumé :

Le comportement à la rupture et la propagation des fissures dans les matériaux composites ont fait l'objet de différentes études numériques (éléments fusibles, méthodes sur réseaux déformables, éléments finis, zones cohésives...). Récemment, une méthode appelée peridynamique a été appliquée par différents auteurs à la simulation de la propagation de fissures dans des milieux hétérogènes. Cette méthode s'appuie sur une description alternative de la mécanique des milieux continus reposant sur l'intégration de forces à distance s'exerçant entre points matériels. Un avantage majeur de cette approche est de limiter la dépendance des directions de propagation de fissures à la discrétisation du milieu. Dans cet exposé on s'intéresse à une approche peridynamique simple (dite "bond-based") pour laquelle on s'attachera à caractériser l'impact d'une distribution de phases complexes, de type granulaire cimenté, sur le comportement mécanique et les régimes de ruptures.

Abstract :

Crack growth in composite materials was studied using various numerical approaches (fusible elements, deformable lattice methods, finite elements, cohesive elements...). Recently, several authors applied the so-called peridynamics method to simulate crack growth in heterogeneous media. Such an approach is deduced from an alternative theoretical framework, built upon long-range forces instead of contact forces. One crucial advantage of peridynamics is to limit influence of the discretization upon crack growth directions. In the present study, a simple peridynamics approach (called "bond-based") is used to simulate crack growth in a cemented granular material. Influence of phases distribution upon mechanical behavior and rupture regimes is focused.

Mots clefs : Simulation peridynamique ; Fissuration ; Matériau granulaire cimenté

1 Introduction

De nombreux matériaux naturels, aliments, bio-composites, présentent une structure constituée de grains sous forme d'inclusions noyées dans une matrice cohésive. Les propriétés mécaniques de ces matériaux peuvent être particulièrement complexes même dans le cas où la rhéologie des phases est linéaire élastique. Si, à l'échelle macroscopique, le comportement peut apparaître dicté, au premier ordre, par le mélange des phases, les concentrations de contraintes au niveau des interfaces entre grains peuvent devenir prédominantes pour des suspensions très denses ou des milieux granulaires cimentés. Dans cette limite, le rôle combiné de la ténacité aux interfaces avec la texture granulaire reste encore peu exploré [11, 1].

Dans cet article on s'intéresse à la méthode peridynamique récemment utilisée avec succès pour la simulation de fissures dans les matériaux hétérogènes [2]. Cette méthode qui s'appuie sur une description alternative aux approches classiques continues (éléments finis + zones cohésives) et aux approches discrètes de type éléments en réseaux (Elements Fusibles, Lattice Element Method), repose sur l'intégration de forces à distance s'exerçant entre points matériels. Un avantage majeur de la peridynamique est son aptitude à prendre en compte les hétérogénéités du matériau tout en limitant les

effets de maillages. Après avoir présenté succinctement le principe de la méthode et avoir vérifié son aptitude à simuler les propriétés élastiques et à la rupture d'un échantillon homogène, on s'intéresse à la simulation d'un matériau composite pour lequel on fait varier la fraction d'inclusions solides. On illustre l'aptitude de la méthode à rendre compte aussi bien de l'hétérogénéité de la transmission des contraintes que de la propagation de fissures à travers les différentes phases.

2 Approche peridynamique

L'approche peridynamique est un cadre théorique alternatif à la mécanique des milieux continus classique en ceci qu'elle s'appuie uniquement sur des interactions à distance [10]. Dans cette approche non locale, le comportement mécanique est décrit à partir d'équations intégréo-différentielles plutôt que par des équations aux dérivées partielles. Les actions internes exercées en un point \mathbf{r} au sein d'un matériau vont donc résulter d'interactions dans un voisinage $H_{\mathbf{r}} = \{\mathbf{r}' \mid \|\mathbf{r}' - \mathbf{r}\| < \delta\}$ défini comme l'ensemble des points situés à une distance inférieure à un horizon δ à l'instant initial (Fig. 1 :A). Un avantage majeur de cette approche est sa capacité à intégrer des discontinuités du matériau, et, ainsi, à décrire facilement des fissures.

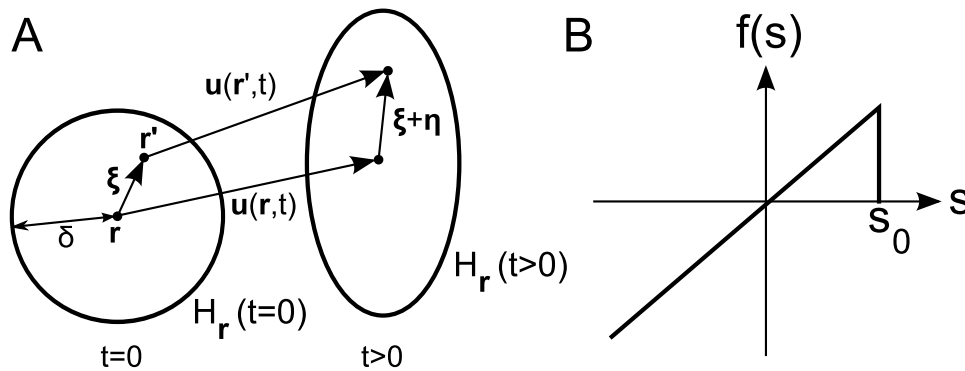


FIGURE 1 – A : Déformation d'un matériau dans le cadre de la peridynamique. B : Modèle de liaison avec endommagement.

Si on définit $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ comme le déplacement à l'instant t du point matériel initialement à la position \mathbf{r} à l'instant $t = 0$ (Fig. 1 :A), on peut écrire de manière générale l'équation locale du mouvement sous la forme suivante

$$\rho \ddot{\mathbf{u}}(\mathbf{r}, t) = \int_{H_{\mathbf{r}}} \mathbf{f}(\mathbf{u}(\mathbf{r}', t) - \mathbf{u}(\mathbf{r}, t), \mathbf{r}' - \mathbf{r}) \, d\mathbf{r}' + \mathbf{b}(\mathbf{r}, t) \quad (1)$$

où ρ est la masse volumique du matériau, $\mathbf{f}(\mathbf{u}(\mathbf{r}', t) - \mathbf{u}(\mathbf{r}, t), \mathbf{r}' - \mathbf{r})$ le terme décrivant les interactions internes au matériau et $\mathbf{b}(\mathbf{r}, t)$ une action externe exercée localement.

En définissant $\boldsymbol{\xi} = \mathbf{r}' - \mathbf{r}$ comme la position relative et $\boldsymbol{\eta} = \mathbf{u}(\mathbf{r}', t) - \mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ comme le déplacement relatif (Fig. 1 :A), et en faisant l'hypothèse que seules des interactions de paire interviennent, on aboutit à l'équation suivante

$$\rho \ddot{\mathbf{u}}(\mathbf{r}, t) = \int_{H_{\mathbf{r}}} f(\boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\xi}) \frac{\boldsymbol{\eta} + \boldsymbol{\xi}}{\|\boldsymbol{\eta} + \boldsymbol{\xi}\|} \, d\mathbf{r}' + \mathbf{b}(\mathbf{r}, t) \quad (2)$$

où $f(\boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\xi})$ est un scalaire pouvant être défini comme l'intensité d'une interaction de paire. Dans cette première étude, on choisit d'utiliser un modèle simple qui consiste à assimiler les interactions de paire à des liaisons harmoniques comme suit

$$s = \frac{\|\boldsymbol{\eta} + \boldsymbol{\xi}\| - \|\boldsymbol{\xi}\|}{\|\boldsymbol{\xi}\|} \quad (3)$$

$$f(\boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\xi}) = \begin{cases} cs(\boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\xi}) & \|\boldsymbol{\xi}\| \leq \delta \\ 0 & \|\boldsymbol{\xi}\| > \delta \end{cases} \quad (4)$$

Où c est appelé micromodule élastique. On notera qu'avec les hypothèses simplificatrices réalisées, le coefficient de Poisson est $\nu = 1/3$ dans le cas d'un matériau homogène [6]. L'endommagement des liaisons, qui permet de décrire la formation de fissures, est introduit en considérant que celles-ci sont rompues au-delà d'une élongation critique s_0 . (Fig. 1 :B).

La discrétisation consiste alors à décrire le système comme un ensemble de points matériels de masse m_i aux points \mathbf{r}_i présentant chacun des liaisons avec ses voisins inclus dans $H_{\mathbf{r}}$, ce qui aboutit à l'équation suivante

$$m_i \ddot{\mathbf{u}}_i(t) = \sum_{\mathbf{r}_j \in H_{\mathbf{r}}} ks(\boldsymbol{\eta}_{ij}, \boldsymbol{\xi}_{ij}) \frac{\boldsymbol{\eta}_{ij} + \boldsymbol{\xi}_{ij}}{\|\boldsymbol{\eta}_{ij} + \boldsymbol{\xi}_{ij}\|} + \mathbf{b}_i(\mathbf{r}, t) \quad (5)$$

Où $k = c(\Delta x)^4$ est la raideur des liaisons et où Δx est le pas de la grille. L'analogie de cette approche avec une méthode de type dynamique moléculaire apparaît clairement [9].

A l'échelle macroscopique, le matériau ainsi décrit se comportera comme un solide élastique fragile endommageable. A titre d'exemple, une série d'essais numériques 2D de traction simple sur des échantillons homogènes est réalisée. Ces échantillons sont des blocs carrés de côté 1, discrétisés via une grille de points 200×200 . L'horizon est fixé à $\delta = 4\Delta x$. Dans ces simulations, une dissipation visqueuse a été ajoutée de façon à converger vers un état d'équilibre. Au vu des résultats, le solide est élastique linéaire avant rupture avec un module d'Young E proportionnel à k (Fig. 2 :A). Cette constatation est conforme à la relation entre micromodule et module macroscopique à la limite continue $E = c(\pi\delta^3(1-\nu)/6)$ [7]. La différence peut être attribuée aux erreurs de discrétisation liées au choix de δ et Δx [13].

Une série d'essais numériques de fissuration sans branchement sous traction simple est ensuite réalisée. Les mêmes échantillons sont pré-fissurés en leur centre par une fissure de longueur 0.5 orthogonale à la direction de traction. L'énergie consommée par le processus d'endommagement de chaque liaison peut facilement être calculé sous la forme $\delta\omega = \frac{1}{2}ks_0^2\xi$, l'énergie impliquée à l'échelle de l'échantillon est la somme de toutes les énergies de liaison. L'énergie de fracture peut également être calculée à la limite continue selon l'expression $G_0 = (9E\delta s_0^2)/4\pi$ [7], en bon accord avec les résultats numériques de la Fig. 2 :B.

3 Construction des échantillons

On s'intéresse ici plus particulièrement à la propagation de fissures dans un matériau composite 2D constitué d'inclusions circulaires noyées dans une matrice cohésive. Dans cet échantillon, la position des inclusions est déduite d'une simulation d'empilement de grains circulaires. L'échantillon granulaire est réalisé en utilisant une approche en éléments discrets (DEM) explicite avec un traitement des interactions basé sur des lois de contact et de frottement régulières [8]. Une loi de contact linéaire avec un coefficient de frottement de 0.1 et un amortissement visqueux égal à 80% de l'amortissement critique sont utilisés. Les diamètres des grains sont choisis selon une loi statistique β avec une faible dispersion de tailles [12]. Après avoir positionné les grains sur une grille régulière ces derniers sont confinés entre quatre murs jusqu'à l'obtention d'un échantillon dense soumis à une contrainte suffisamment faible pour limiter les interpénétrations aux niveaux des contacts.

Le matériau composite est ensuite construit à partir de l'échantillon granulaire selon trois étapes successives :

- Le rayon de chaque grain est réduit $R_i^g \rightarrow \beta \times R_i^g$ avec $\beta < 1$

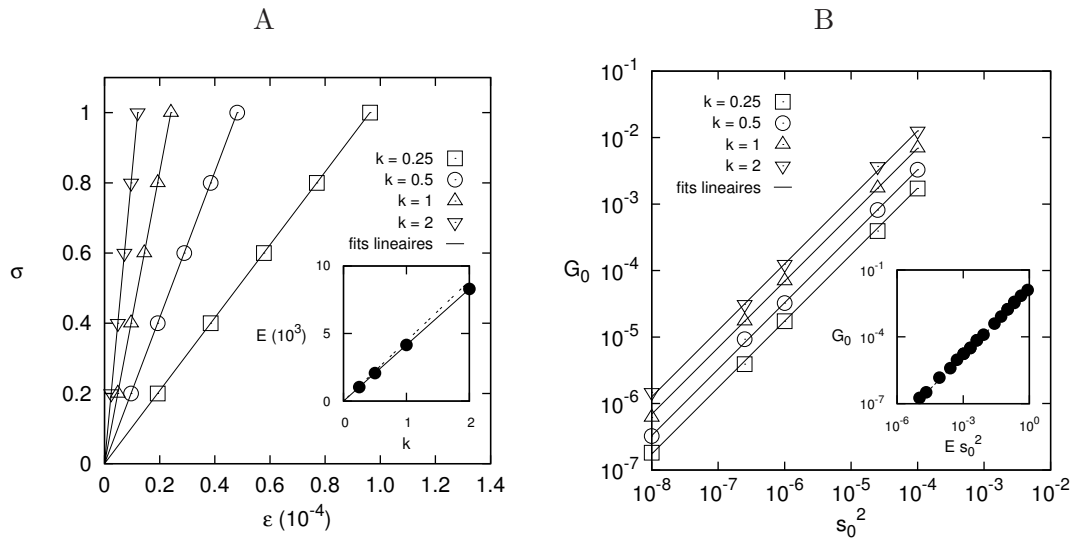


FIGURE 2 – A : Contrainte adimensionnée en fonction de la déformation en traction simple pour différentes valeur de la raideur k des liaisons. Inclusion : module d'Young adimensionné en fonction de k . La ligne pleine est un fit linéaire, la ligne en pointillé est la prédiction à la limite continue. B : Energie de fracture adimensionnée en fonction du carré de l'élongation critique s_0^2 pour différentes valeur de k . Inclusion : Energie de fracture en fonction du produit du carré de l'élongation critique s_0^2 par le module d'Young E , la ligne en pointillé est la prédiction à la limite continue.

- Une grille de points ($n_x \times n_y$) est définie, chaque grain reçoit un index indiquant s'il est situé dans un grain ou dans la matrice cimentaire
- Les liaisons ξ_{ij} sous l'horizon δ sont définies en fonction de la valeur respective de l'index au point \mathbf{r}_i et au point \mathbf{r}_j . Une liaison entre deux grains différents est considérée comme une liaison grain-matrice.

Trois types de liaison sont nécessaires :

- Les liaisons internes aux grains, de raideur k^{GG} et d'élongation critique s_0^{GG}
- Les liaisons internes à la matrice, de raideur k^{MM} et d'élongation critique s_0^{MM}
- Les liaisons dont un point matériel est dans la matrice et un point matériel est dans un grain, de raideur k^{MG} et d'élongation critique s_0^{MG} , et qu'on pourrait qualifier de liaison d'interface

Par souci de simplicité, on choisit $k^{MG} = (k^{GG} + k^{MM})/2$. Le module macroscopique est E_{GG} pour les grains, E_{MM} pour la matrice et E_{MG} pour l'interface. On définit la ténacité du matériau par $K = \sqrt{EG_0}$ et on note K_{GG} la ténacité des grains, K_{MM} celle de la matrice et K_{MG} celle de l'interface. La valeur de la ténacité d'interface est fixée égale à celle de la matrice $K_{MG} = K_{MM}$.

4 Fissuration des matériaux composites

La simulation numérique du système s'appuie sur un algorithme de type Velocity-Verlet [3], implémenté en FORTRAN et parallélisé par échange de messages via MPI (Message Passing Interface) selon une décomposition de domaine statique régulière. La résolution de la grille est fixée à $n_y = 2000$, $n_x \approx 2000$ et le nombre de liaisons à calculer à chaque itération est $\approx 10^8$. Chaque simulation requiert 30000 itérations, exécutées en 51 min sur 56 coeurs de notre cluster de PC sur réseau Infiniband.

A partir de l'échantillon DEM, deux structures de matériau composite ont été réalisées, pour deux facteurs de réduction des grains $\beta = 0.6$ et $\beta = 0.85$. Pour chacun de ces matériaux, trois valeurs du ratio entre ténacité des grains et ténacité de l'interface K_{GG}/K_{MG} ont été testées : $K_{GG}/K_{MG} = 1.5$, $K_{GG}/K_{MG} = 2.0$ et $K_{GG}/K_{MG} = 5.0$. Avant d'imposer un chargement mécanique, l'échantillon est pré-fissuré sur sa face gauche, à une position proche de la mi-hauteur. Par précaution, cette fissure initiale est toujours effectuée dans la matrice, de manière à ne pas endommager de grain avant le

chargement. Au début de la simulation, un incrément de contrainte constant est appliqué aux faces $y = 0$ et $y = 1$. Le chemin de fissure est défini comme l'ensemble des points matériels présentant un nombre non nul de liaisons rompues. On s'intéresse particulièrement à l'endommagement des grains.

Au vu des résultats de la Fig. 3, il apparaît clairement que lorsque la valeur du ratio K_{GG}/K_{MG} dépasse un certain seuil, les grains ne sont plus endommagés, et les fissures les contournent en traversant la matrice cimentaire.

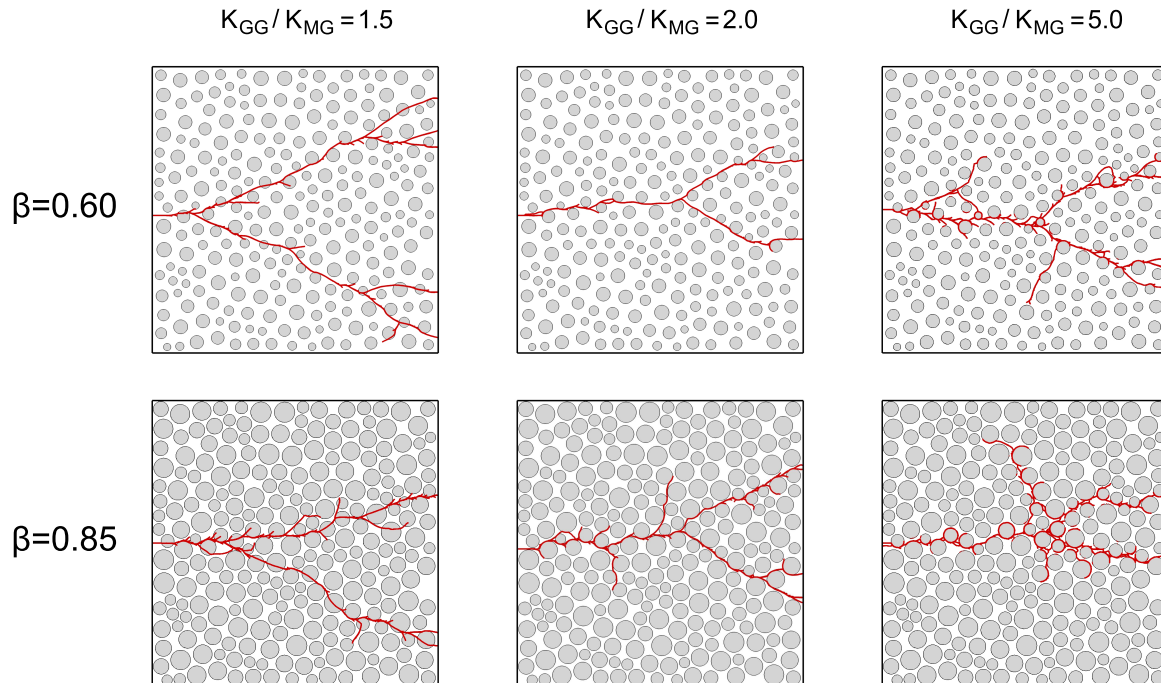


FIGURE 3 – Fissuration de matériaux composites pour deux valeurs du facteur de réduction des grains β et trois valeurs du ratio entre ténacité des grains et ténacité de l'interface K_{GG}/K_{MG} .

Ce comportement est cohérent avec les résultats expérimentaux obtenus pour des grains fortement dilués dans la matrice cimentaire [5]. D'autre part, il apparaît que l'interface est davantage endommagée lorsque la densité de grains est élevée (Fig. 3 : $K_{GG}/K_{MG} = 5.0$). On peut vraisemblablement attribuer ce comportement à une plus forte concentration des contraintes au voisinage des "contacts" entre grains (Fig. 4).

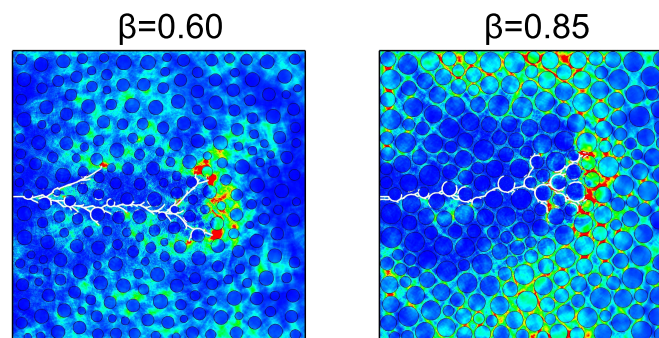


FIGURE 4 – Champ de densité d'énergie élastique en cours de fissuration ($t = 0.2$) de matériaux composites pour deux valeurs du facteur de réduction des grains β , le ratio entre ténacité des grains et ténacité de l'interface étant $K_{GG}/K_{MG} = 5.0$. Echelles de couleurs identiques.

Malgré son importance pour les applications industrielles, le cas de matériaux constitués d'une phase granulaire très dense reste peu étudié dans la littérature [11, 1]. Dans ce cas, la proximité des grains génère des concentrations de contraintes et des interactions de contact qui sont à l'origine de propagations de fissures plus complexes. Une étude paramétrique en cours devrait permettre de préciser la transition de comportement mécanique entre un régime de grains dilués (composite classique) et un régime de suspension très dense (granulaire).

5 Conclusions

L'approche peridynamique, en raison de son caractère non local, s'avère être un cadre bien adapté à la description de phénomènes de fissuration. En particulier, cette approche est bien adaptée à la simulation numérique de la fissuration dynamique d'un matériau hétérogène complexe. Le cas particulier de la fracture d'un matériau composite constitué de grains noyés dans une matrice cimentaire donne lieu à différents modes de propagation de fissure, en cohérence avec les résultats de la littérature, expérimentaux et numériques. L'endommagement des grains s'avère être inhibé si le ratio entre ténacité des grains et ténacité de l'interface est supérieur à un certain seuil. Les perspectives du présent travail sont larges. L'efficacité numérique de la méthode permet un passage à la 3D relativement aisé. Les travaux déjà réalisés ont montré que l'algorithme de calcul est bien adapté à la parallélisation par MPI, ouvrant la possibilité de réaliser des analyses dans des espaces paramétriques étendus. De ce point de vue, une des perspectives de ce travail est d'analyser les chemins de fracture en fonction de la texture du matériau et de la densité de la phase particulaire.

Références

- [1] Affes, R., Delenne, J.-Y., Monerie, Y., Radjai, F., Topin, V. 2012 Tensile strength and fracture of cemented granular aggregates. *Eur. Phys. J. E* **35** 117
- [2] Agwai, A., Guven, I., Madenci, E. 2011 Crack propagation in multilayer thin-film structures of electronic packages using the peridynamic theory. *Microelec. Reliability* **51** 2298-2305
- [3] Allen, M.P., Tildesley, D.J. 1986 Computer Simulation of Liquids. *Oxford University Press, Oxford*
- [4] Askari, E., Bobaru, F., Lehoucq, R.B., Parks, M.L., Silling, S.A., Weckner, O. 2008 Peridynamics for multiscale materials modeling. *J. of Phys. : Conf. Series* **125** 012078
- [5] Buyukozturk, O., Hearing, B. 1998 Crack propagation in concrete composites influenced by interface fracture parameters. *Int. J. Solids Structures* **35** 4055-4066
- [6] Gerstle, W., Sau, N., Silling, S. 2007 Peridynamic modeling of concrete structures. *Nuclear Eng. & Design* **237** 1250-1258
- [7] Ha, Y.D., Bobaru, F. 2011 Characteristics of dynamic brittle fracture captured with peridynamics. *Eng. Fracture Mech.* **78** 1156-1168
- [8] Radjai, F., Dubois, F. 2011 Discrete Numerical Modeling of Granular Materials. *Wiley ISTE*
- [9] Seleson, P., Parks, M.L., Gunzburger, M., Lehoucq, R.B. 2009 Peridynamics as an upscaling of molecular dynamics. *Multiscale Model. Simul.* **8** 204-227
- [10] Silling, S.A. 2000 Reformulation of elasticity theory for discontinuities and long-range forces. *J. Mech. Phys. Solids* **48** 175-209
- [11] Topin, V., Delenne, J.Y., Radjai, F., Brendel, L., Mabilille, F. 2007 Strength and failure of cemented granular matter. *Eur. Phys. J. E* **23** 413-429
- [12] Voivret, C., Radjai, F., Delenne J.Y., El Youssoufi, M.S. 2007 Space-filling properties of polydisperse granular media. *Phys. Rev. E* **76** 021301
- [13] Yu, K., Xin, X.J., Lease, K.B. 2010 New method of adaptive integration with error control for bond-based peridynamics. *Proc. of the World Congr. on Eng. and Comp. Sci.* **II**