

MECAMAT

COMPTE RENDU de la journée scientifique du groupe de travail
« PHYSIQUE ET MECANIQUE DE L'ENDOMMAGEMENT ET DE LA RUPTURE »

Modélisation et simulation de l'endommagement dans le cadre des approches multi-échelle

Mercredi 4 juin 2008

Université Pierre et Marie Curie
Institut d'Alembert, Tour 55-65, 5ème étage
4 Place Jussieu, 75005 Paris

Orientations de la journée

Les phénomènes d'endommagement s'étudient à de nombreuses échelles : défauts à l'échelle des dislocations, microcavités, décohésion-rupture d'inclusions, ruine de la structure, etc. Les modélisations et les simulations de ces mécanismes s'orientent ainsi naturellement vers un échange avec les échelles voisines : tirer l'information pertinente des échelles inférieures, offrir des modèles équivalents judicieux aux échelles supérieures. Cette journée vise à faire un point partiel sur les modèles et les simulations récentes qui entrent dans cette démarche, au travers de matériaux et de mécanismes variés : métaux, céramiques, géomatériaux, polymères, croissance-coalescence de cavités, fatigue, etc.

Participants

Cette journée a réuni 40 participants du monde académique et industriel ou semi-industriel (BRGM, EdF, IFP, IRSN, etc.).

Déroulement de la journée, l'avis des organisateurs

Le nombre de participants a montré l'intérêt de la communauté mécanicienne et mécamaticienne pour ces problèmes de changements d'échelle. Cet intérêt semble très prononcé chez la génération montante, fortement représentée lors de cette journée.

Par ailleurs, la variété des matériaux a illustré l'aspect transversal de ces préoccupations :

- céramiques hautes températures (Vincent),
- polymères amorphes (Estévez),
- polymères semi-cristallins (Cangémi),
- argilite (Abou-Chakra),
- milieux ductiles poreux (Kondo, Vincent),
- milieux élastiques fissurés (Kondo, Marigo),
- métaux (Laverne).

On peut en dire de même des mécanismes envisagés :

- endommagement (Abou-Chakra, Cangémi, Kondo, Marigo, Vincent),
- rupture (Estévez, Marigo),
- fatigue (Laverne, Marigo),
- sensibilité à la vitesse, à la température, aux conditions environnementales (Cangémi, Estévez),
- diffusion (Abou-Chakra, Cangémi, Kondo).

Cette journée a de plus indiquée que, malgré les avancées significatives obtenues dans les modélisations multi-échelle ces dernières années, les problèmes restent souvent complexes et ouverts, notamment lorsqu'on s'intéresse aux couplages multi-physique, aux chargements autres que monotones et quasi-statiques, aux franchissements successifs de plusieurs échelles. Les présentations ont clairement montré que ces difficultés incitent le mécanicien à combiner plusieurs outils simultanément : simulations numériques classiques (de type EF), simulations numériques enrichies (zones cohésives, dynamique moléculaire, ab initio, éléments à discontinuités internes), principes variationnels, extensions des méthodes d'homogénéisation linéaire et non linéaire en dehors de leur cadre usuel, approches phénoménologiques, recouplement de résultats expérimentaux issus de disciplines variées, etc.

Les différents débats ont en particulier fait ressortir le besoin d'améliorer les modélisations dans le cadre multi-physique et notre compréhension des modèles d'endommagement non locaux au travers d'approches micromécaniques.

Les résumés des auteurs

Pierre-Guy VINCENT (IRSN, LMA) :

Modélisation de micromécanique de l'endommagement ductile d'un milieu poreux saturé à deux échelles (Vincent, Monerie, Suquet)

Ce travail vise à la construction d'un modèle élastoplastique endommageable pour une céramique poreuse à deux populations de pores saturés : le combustible nucléaire d'oxyde d'uranium fortement irradié et à haute température. La démarche suivie consiste en une approche multiéchelle basée sur l'hypothèse de séparation des échelles entre les deux populations de cavités (pores intragranulaires sphérique et pores intergranulaires ellipsoïdaux) et sur celle de l'isotropie macroscopique. Le modèle élastoplastique endommageable proposé traite séparément de l'élasticité, de la surface de plasticité et de l'évolution des paramètres internes du modèle avec le chargement. La prise en compte de pressions différentes dans chaque population de cavités est effectuée pour les trois régimes élasticité-plasticité-endommagement.

Jean-Jacques MARIGO (IJLRDA-UPMC) :

Minimisation d'énergie et microstructuration induite: quelques exemples en endommagement et en rupture

Le plus souvent dans les approches multi-échelles, on commence par se donner la microstructure et son comportement avant d'obtenir le comportement effectif à l'échelle macroscopique via des techniques de passage micro-macro. C'est la vision créationniste du monde: Dieu crée les microstructures (forcément compliquées) et le malheureux chercheur se prend la tête en se demandant comment il va pouvoir faire pour en rendre compte. C'est évidemment une démarche incontournable pour un certain nombre de matériaux, tels les composites, où une microstructure est imposée. Par contre, dans beaucoup d'autres situations, la microstructure est le résultat d'une adaptation du matériau à ses sollicitations. C'est la vision évolutionniste du monde: la microstructure est la réponse optimale au sens d'un principe d'évolution à découvrir.

On se propose d'illustrer ce second point de vue dans des problèmes d'endommagement et de rupture. Le principe d'évolution est la minimisation de l'énergie. Lorsque cette dernière vit dans le Paradis de la Convexité, tout se passe bien et la réponse d'un milieu homogène se fait sans microstructuration. Par contre, dès que l'on entre dans le Purgatoire de la Non Convexité, un milieu homogène peut avoir intérêt à se microstructurer pour optimiser sa réponse, i.e. minimiser son énergie. On peut expliquer ainsi les process zones en pointe de fissure cohésive ou les mécanismes des phénomènes de fatigue.

Rafaël ESTEVEZ (MATHEIS-INSA) :

Approche multi-échelles de la rupture des matériaux : Modèles de zones cohésives complétées ou inspirées d'analyses moléculaires

Dans le cadre d'une analyse micromécanique de la rupture, intermédiaire entre les approches discrètes avec des modèles moléculaires et les analyses macroscopiques menées à l'échelle d'une structure ou d'une pièce, des modèles cohésifs sont formulés à partir des observations physiques disponibles. Nous montrons comment ces descriptions peuvent être complétées par des calculs moléculaires pour clarifier certains aspects du processus de rupture.

Dans un premier exemple concernant la modélisation de la rupture des polymères solides amorphes, une telle méthodologie a été mise en œuvre. Le craquelage étant le mécanisme sous-jacent la rupture, il est modélisé par une zone cohésive viscoplastique conformément aux observations. La loi du comportement du matériau sans craquelure,

élastique-viscoplastique avec adoucissement et durcissement à mesure que la déformation augmente, est également considérée.

Dans le cadre d'une analyse locale de la rupture en mode I, des prédictions quantitatives pour le PMMA ont ainsi été obtenues, en bon accord avec l'expérience, pour des essais quasi-statiques lents (temps de rupture supérieur à la seconde) et 'rapides' de traction ou de flexion à 1-5m/s. Dans ce dernier cas, des effets de température apparaissent et nous montrons que la source de chaleur principale est associée au craquelage. L'élévation de température conduit à une variation de la condition de rupture locale qui est responsable de l'augmentation de ténacité observée à mesure que la vitesse de chargement augmente, pour un temps de rupture voisin de la milli-seconde.

Pour des chargements plus sévères, l'augmentation de la ténacité se poursuit et un refroidissement thermoélastique précède la rupture (Rittel, IJSol.Struc., 1998, 2001). Dans ce cas, nous montrons que des conditions d'amorçage notablement différentes de celles rencontrées à basse vitesse peuvent être à l'origine d'un tel effet. Une étude par dynamique moléculaire est réalisée, destinée à compléter la formulation par zone cohésive et dédiée à l'analyse à la cavitation sous jacente à l'amorçage du craquelage. L'objectif est de clarifier le processus d'endommagement précédent la fibrillation et de déterminer le critère d'amorçage pour des temps de rupture de l'ordre de la micro-seconde ou inférieur.

Nous avons développé une méthodologie analogue pour modéliser la fissuration lente dans les céramiques. Une rupture inter-granulaire associée à un processus d'hydrolyse assisté par la contrainte est responsable de la fissuration. Des résultats expérimentaux suggèrent de rendre compte d'un tel effet par un modèle cohésif dépendant du temps dont certains points de la formulations ont pu être clarifiée grâce à des calculs atomistiques récents reportés dans la littérature (Zhu et al., JMech.Phys.Sol., 2005). A partir de la description proposée, nous présentons quelques simulations de propagation sous critique dans un polycristal 2D et indiquons la nature de l'interaction microstructure - propagation de fissure.

Ariane ABOU-CHAKRA GUERY (LML) :

Approche multi-échelle du couplage plasticité-endommagement dans les argilites (Abou-Chakra Guéry, Cormery, Shao, Kondo)

Cette étude, réalisée au Laboratoire de Mécanique de Lille et en partenariat avec l'ANDRA (Agence nationale pour la gestion des déchets radioactifs) vise à prédire la zone endommagée, dite EDZ (Excavation Damaged Zone), autour d'ouvrages souterrains dont l'étude est destinée à la faisabilité d'un éventuel stockage de déchets radioactifs à haute activité et à vie longue. Le matériau concerné se situe dans la couche d'argilite du Callovo-Oxfordien (entre -400m et environ -500m). Il est envisagé comme matériau constitutif de la barrière géologique vis à vis des radioéléments des colis de déchets, ceci en raison de sa forte compacité et de sa très faible perméabilité. Ces bonnes propriétés peuvent néanmoins être modifiées en présence de l'endommagement susceptible de se développer sous l'effet de sollicitations thermo-hyromécaniques et/ou chimiques couplées. Compte tenu du caractère fortement hétérogène de l'argilite du Callovo Oxfordien, l'objectif de la présente étude est de développer et valider dans une première étape une approche d'homogénéisation non linéaire de son comportement mécanique; cette approche doit prendre en compte les deux mécanismes prépondérants de déformation que sont la microplasticité de la matrice argileuse et la microfissuration intragranulaire et/ou intergranulaire.

Après une brève description de la microstructure du matériau ainsi que des origines physiques des déformations inélastiques de l'argilite, on présentera la méthode incrémentale d'homogénéisation de type Hill. Celle-ci requiert au préalable la mise au point de lois constitutives appropriées pour les différentes phases constituant le matériau. La plasticité est considérée de type Drucker-Prager, tandis que pour les grains, on a développé un modèle isotrope d'endommagement dont l'originalité est de rendre

compte de manière adéquate de l'éventuelle désactivation des effets de la microfissuration qui s'y développe. Le modèle micro-macro complet mis au point est tout d'abord évalué grâce à une comparaison à des solutions obtenues par éléments finis sur une cellule représentative. Il est ensuite validé sur de nombreux trajets de sollicitations multiaxiales pour lesquels on dispose de données expérimentales de laboratoire obtenues sur des échantillons prélevés à différentes profondeurs géologiques. La prise en compte des déformations différées dans le cadre micromécanique adopté sera brièvement discutée.

Dans une dernière partie de la présentation, après une brève description de la mise en œuvre numérique du modèle d'homogénéisation dans un code d'éléments finis (Abaqus), on présentera quelques résultats de simulations numériques du creusement d'un puit d'accès du laboratoire souterrain (site de Bure en Meuse/haute Marne). La distribution des déformations plastiques autour du puits, ainsi que l'étendue de la zone endommagée seront analysées et commentées.

Djimédo KONDO (LML) :

Modélisations micromécaniques de l'endommagement par microfissuration et de l'endommagement ductile (Kondo, Charkaluk, Domieux, Monchiet, Shao, Zhu)

Malgré son unité dans les concepts de base, la mécanique de l'endommagement s'est subdivisée en deux sous disciplines dont la distinction, amorcée dans les premiers développements à caractère purement macroscopique, s'est de plus en plus confirmée dans les approches micromécaniques progressivement mises en place pour leur étude plus fine. L'objet de la présentation est de résumer quelques contributions récentes de la micromécanique, d'une part à l'étude de l'endommagement des matériaux quasi fragiles et, d'autre part, à la modélisation de l'endommagement des milieux ductiles fissurés.

1. Sur le couplage élasticité-endommagement par microfissuration.

S'agissant de l'endommagement des matériaux quasi fragiles (bétons, roches, céramiques, certains composites à matrice fragile etc.) dont le mécanisme principal est la croissance de microfissures dans une matrice solide élastique, il s'agit essentiellement de coupler l'endommagement à l'élasticité. Malgré l'apparente simplicité de la tâche, la modélisation des comportements élastiques endommageables s'est heurté à de nombreuses difficultés dont la plupart sont liées à la prise en compte de l'anisotropie induite par la multifissuration et la nécessité d'une gestion cohérente des effets liés au contact unilatéral des lèvres des microfissures, sans oublier les couplages avec d'autres mécanismes dissipatifs tels que le frottement sur les lèvres de fissures fermées. A la suite de travaux développés au début des années 80 par l'Ecole française de la mécanique de l'endommagement, de nombreux progrès ont pu être réalisés sur ces questions, en partie grâce aux approches micro-macro de la multifissuration. Nous nous concentrerons sur certains aspects saillants de ces développements : (i) prise en compte dans les modèles d'endommagement de l'interaction entre fissures ainsi que de la distribution spatiale des fissures. On montrera que ceci est particulièrement cruciale pour la qualité des prédictions du modèle d'endommagement; ii) modélisation des effets de frottement et de dilatance dans le cas des géomatériaux; iii) analyse numérique de structures dégradées.

2. Quelques résultats nouveaux dans le domaine des milieux plastiques poreux ou fissurés.

Depuis les travaux pionniers de Rice et Tracey (1969) et de Gurson (1977) dans le cadre des méthodes d'analyse limite, l'étude micromécanique de l'endommagement ductile a fait l'objet de progrès remarquables. Outre les modifications apportées au critère de Gurson à des fins de calcul numérique, on pourra mentionner un certain nombre d'extensions dont en particulier celle de Gologanu-Leblond Devaux (GLD) ou de Garajeu et Suquet (et plus récemment de Vincent et al., 2007) qui permettent de prendre en compte l'effet de forme des cavités.

L'objectif de ce second volet de l'exposé est de présenter quelques extensions récentes des critères à la base de la modélisation de l'endommagement ductile, en considérant de nouveaux champs de vitesse (non axisymétriques) dans l'approche par analyse limite. Ces champs sont inspirés de la solution du problème d'inclusion inhomogène d'Eshelby (1957). Nous montrons que les critères macroscopiques de plasticité des milieux poreux issus de ces nouvelles extensions améliorent de manière significative le critère de Gurson et ses dérivés. Ces critères se révèlent également en accord avec ceux issus des approches variationnelles d'homogénéisation non linéaire (Ponte-Castaneda et Suquet, 1998). Le cas particulier des milieux plastiques fissurés que nous présenterons en détail permettra d'illustrer de manière concrète ces améliorations. Enfin, sur la base des résultats établis, on évoquera brièvement le cas des milieux poroplastiques saturés.

Laurent CANGEMI (IFP) :

Modélisation biphasique du comportement mécanique des polymères semi-cristallin et endommagement par décompression de gaz (Cangémi, Baudet, Grandidier, Meimon)

En environnement pétrolier, les matériaux polymères assurent le plus souvent la fonction d'étanchéité des structures de production. Les deux cas les plus répandus sont les joints d'étanchéité au niveau des raccords de conduite et les gaines intérieures d'étanchéité des conduites flexibles. Dans de telles situations, les polymères sont utilisés sous hautes températures et dans des conditions de pression en effluent élevée et de surcroît fluctuantes. Dans le cas particulier d'une décompression brutale, les structures subissent fréquemment des dommages irréversibles qui affectent leur résistance mécanique et inhibe leur caractère étanche. On présentera lors de cet exposé le cadre de modélisation développé à l'IFP pour décrire le comportement viscoplastique des polymères semi-cristallins (PSC), lorsqu'ils sont soumis à un environnement pétrolier. Les spécificités microstructurales des PSC et la problématique de l'endommagement par décompression rapide de gaz sera introduite. Des parallèles entre le comportement mécanique des PSC et celui des géomatériaux seront également évoqués. Ces observations physiques à différentes échelles nous amèneront à proposer une approche de modélisation pragmatique définie dans le cadre de la thermodynamique des milieux continus et ouverts, et s'appuyant sur une représentation du matériau à l'échelle mésoscopique. Enfin, la problématique de la modélisation de l'endommagement par cavitation du PVDF, lors d'une décompression rapide de CO₂ sera détaillée et discutée, en s'attardant notamment sur la prise en compte de certains couplages multiphysiques (diffusion et mécanique) au sein de la modélisation.

Jérôme LAVERNE (EdF) :

Quelques résultats numériques sur la propagation de fissure par fatigue avec un modèle de zones cohésives (Laverne, Taheri)

L'approche variationnelle de la fatigue proposée par A. Jaubert et J.-J. Marigo s'appuie sur un principe de minimisation d'énergie, une énergie de surface cohésive et une condition d'irréversibilité basée sur le cumul d'ouverture de la fissure au cours des cycles de chargement. Les résultats théoriques mettent en évidence deux échelles, l'une macro au niveau de la structure et l'autre micro au niveau de la zone cohésive. En s'appuyant sur les ingrédients cités précédemment, cette approche permet, lorsque la longueur caractéristique du modèle cohésif tend vers zéro, de construire des lois de propagation de type Paris sans hypothèse phénoménologique *a priori*.

Au cours de l'exposé, après avoir rappelé les grandes lignes du cadre théorique, on présente le modèle élément fini ainsi que la loi cohésive adoptée, puis les premiers résultats sur une poutre DCB. On illustre la capacité de l'approche précédente à reproduire des évolutions de fissures par fatigue et l'on identifie une loi de Paris. Les coefficients de cette dernière dépendent du spectre de chargement, de la géométrie de

la structure et de son comportement.

Ces travaux sont en cours de développement. Ils dégagent des perspectives prometteuses pouvant conduire à la simulation de la fissuration dans des structures industrielles soumises à des chargements cycliques complexes.

Liste des participants

NOM	Prénom	Entreprise/ Labo	EMAIL
ABOU-CHAKRA	Ariane	LML	ariane.guery@polytech-lille.fr
ANDRE	Stéphane	LEMTA (Nancy)	stephane.andre@inpl-nancy.fr
ARSON	Chloé	CERMES UR Navier, Ecole des Ponts (Université Paris Est)	arson@cermes.enpc.fr
BARGELLINI	Renaud	IJLRDA	renaud.bargellini@yahoo.fr
BERINGHIER	Marianne	LMPM-ENSMA	marianne.beringhier@lmpm-ensma.fr
BLAISE	Arnaud	LEMTA (Nancy)	arnaud.blaise@ensem.inpl-nacy.fr
BOUCHARD	Pierre-Olivier	CEMEF Mines ParisTech	pierre-olivier.bouchard@ensmp.fr
CANGEMI	Laurent	IFP	laurent.cangemi@ifp.fr
CAZES	Fabien	LAMCOS	f.cazes@insa-lyon.fr
CHARPAIL	Estelle	Ecole des Mines Saint-Etienne (CIS)	charpail@emse.fr
DEBRUYNE	Gilles	EDF/R&D/AMA	gilles.debruyne@edf.fr
DI CARLO	Antonio	LMS-RomaTre	adicarlo@mac.com
DI PAOLA	François	LMSSMat	francois.di-paola@cea.fr
ESTEVEZ	Rafael	MATEIS/INSA Lyon	rafael.estevez@insa-lyon.fr
GALENNE	Erwan	EDF/R&D/AMA	erwan.galenne@edf.fr
GRANDIDIER	Jean-Claude	LMPM-ENSMA	grandidier@lmpm.ensma.fr
GRONDIN	Frédéric	GeM	frederic.grondin@ec-nantes.fr
GUY	Nicolas	LMT/BRGM	guy@lmt.cnrs-cachan.fr
HALM	Damien	LMPM-ENSMA	halm@lmpm.ensma.fr
JAUBERT	André	IRSN	andre.jaubert@irsn.fr
KONDO	Djimeddo	LML	djimeddo.kondo@univ-lille1.fr
LAVERNE	Jérôme	EdF/R&D et LaMSID	jerome.laverne@edf.fr
LE	Thi Thu Huong	Université Paris-Est et CSTB	thithuhoong.le@cstb.fr
LECLERCQ	Sylvain	EDF/R&D	sylvain.leclercq@edf.fr
MARIGO	Jean-Jacques	IJLRDA-UMPC	marigo@lmm.jussieu.fr
MASSIN	Patrick	LaMSID	patrick.massin@edf.fr
MATHIEU	Jean-Philippe	EDF/R&D	jean-philippe.mathieu@edf.fr
MESSIER	Julien	EDF/R&D/AMA	julien.messier@edf.fr
MONERIE	Yann	IRSN et Laboratoire MIST	yann.monerie@irsn.fr
PASTOR	Joseph	LOCIE/Polytech Savoie	joseph.pastor@univ-savoie.fr
PELISSOU	Céline	IRSN	celine.pelissou@gmzil.com
PERALES	Frédéric	IRSN	frederic.perales@irsn.fr
PHAM	Kim	LMN	phamngoc-kimhung@ychan.fr
REZAEI	Saeid	LMSSMat	saeid.rezaei@ecp.fr
SARFATI	Alexandre	LPMI-ENSAM	alexandre.sarfati-3@etudiants.ensam.fr
SEYEDI	Darius	BRGM	m.seyedi@brgm.fr
STAINIER	Laurent	LTAS/Ulg	l.stainier@ulg.ac.be
VINCENT	Pierre-Guy	IRSN et LMA	pgvincent@gmail.com
WANG	Huaidong	LMSS Mat (ECP)	huaidong.wang@ecp.fr