DE LA RECHERCHE À L'INDUSTRIE

Modélisation par champ de phase de la fissuration des matériaux fragiles: aspects numériques et applications au combustible nucléaire oxyde et au béton

Club Utilisateurs Cast3M | THOMAS HELFER, BENOÎT BARY, TRAN THANG DANG, OLIVIER FANDEUR, RÉMY CNOCQUART

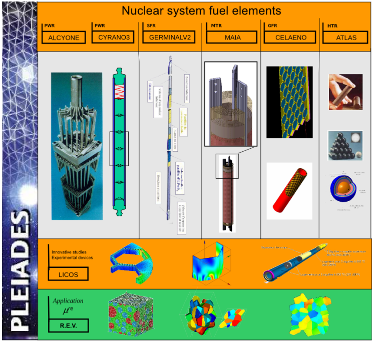
25 NOVEMBRE 2016

Contexte

Sommaire

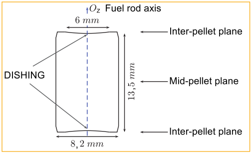
- Contexte
- Modélisation de la fissuration par champ de phase
- Une première implantation dans Cast3M
- Implantation dans Cast3M : 2 algorithmes implicites
- Vérifications
- Exemples d'applications
- Conclusions et perspectives

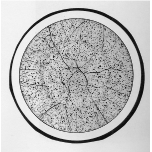
La plate-forme PLEIADES

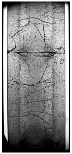


- une grande variété de matériaux et de phénomènes mécaniques :
  - céramiques, métaux, composites
  - **fissuration**, comportement viscoplastique, gonflement sous irradiation, transitions de phases, etc.
- une large gamme de sollicitations

Fissuration de la pastille combustible : que de phénomènes en 4 *mm* !







- fragmentation en début de vie : rupture fragile
- fissuration périphérique secondaire en rampe de puissance
- croissance de porosité (en situation incidentelle)
- décohésion des joints de grains (en situation incidentelle)
- écoulement viscoplastique

Les besoins côté combustible

- Nous souhaitons disposer d'un modèle :
  - permettant de décrire la formation réseau de fissures fragiles
  - compatible avec la thermodynamique
  - couplée à un écoulement viscoplastique
  - pouvant être utilisé en grandes transformations
  - insensible à la discrétisation E.F. (orientation des mailles) et permettant d'utiliser des éléments finis quadratiques
  - efficace numériquement

Les besoins côté béton

On s'intéresse à la modélisation et à la simulation des microfissures dans le béton.

- Etude numérique à l'échelle mésoscopique du béton sous chargements mécanique + température + humidité.
- Effet des granulats, des auréoles de transition.

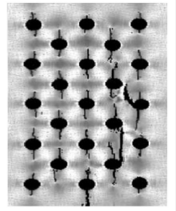


Fig 1. Microfissures en compression.

Ref: *Nguyen et al. 2015.*

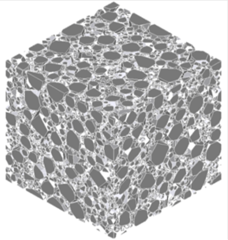


Fig 2. VER du béton en 3D.

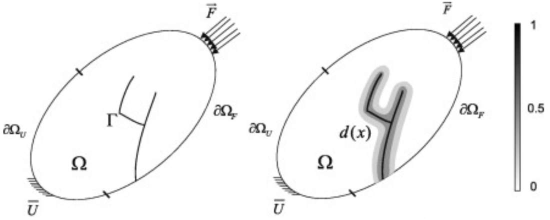
Ref: *Bary Benoît 2016.*

Modélisation de la fissuration par champ de phase

Bibliographie

- MARIGO, J.-J. *l'endommagement et la rupture : hier, aujourd'hui et demain*. IPSI : Comportements non linéaires des matériaux, 2000.
- BOURDIN, Blaise, FRANCFORT, Gilles A. et MARIGO, Jean-Jacques. Numerical experiments in revisited brittle fracture. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* [en ligne]. Avril 2000. Vol. 48, n° 4, pp. 797-826. DOI 10.1016/S0022-5096(99)00028-9. Disponible à l'adresse : `http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022509699000289`
- MIEHE, Christian, HOFACKER, Martina et WELSCHINGER, Fabian. A phase field model for rate-independent crack propagation : Robust algorithmic implementation based on operator splits. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* [en ligne]. 15 novembre 2010. Vol. 199, n° 45, pp. 2765-2778. DOI 10.1016/j.cma.2010.04.011. Disponible à l'adresse : `http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045782510001283`
- NGUYEN, T. T., YVONNET, J., ZHU, Q. -Z., BORNERT, M. et CHATEAU, C. A phase field method to simulate crack nucleation and propagation in strongly heterogeneous materials from direct imaging of their microstructure. *Engineering Fracture Mechanics* [en ligne]. Mai 2015. Vol. 139, pp. 18-39. DOI 10.1016/j.engfracmech.2015.03.045. Disponible à l'adresse : `http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0013794415001332`

Représentation en volume d'une fissure : lissons la discontinuité géométrique



$$\gamma(d) = \frac{d^2}{2\,l} + \frac{l}{2}\,\vec{\nabla} d \cdot \vec{\nabla} d$$

- l est une longueur caractéristique :
  - plus l est petit, plus la singularité associée à une fissure est marquée
- $\gamma(d)$ représente la densité volumique de fissure

Expression de l'énergie libre Ψ

$$\Psi = (m(d) + k)\ \Psi^+ + \Psi^- + g_c\,\gamma\,(d)$$

- Ψ^+ et Ψ^- sont respectivement l'énergie de déformation liée à la traction et à la compression :

$$\begin{cases} \Psi^+ = 2\,\mu\,\left\langle \underline{\epsilon}^{el} \right\rangle_+ : \left\langle \underline{\epsilon}^{el} \right\rangle_+ + \lambda\,\left\langle \mathrm{tr}\ \underline{\epsilon}^{el} \right\rangle_+^2 \\ \Psi^- = 2\,\mu\,\left\langle \underline{\epsilon}^{el} \right\rangle_- : \left\langle \underline{\epsilon}^{el} \right\rangle_- + \lambda\,\left\langle \mathrm{tr}\ \underline{\epsilon}^{el} \right\rangle_-^2 \end{cases}$$

- $m(d) = (1-d)^2$
- g_c est l'**énergie de surface** dissipée par la propagation de fissure.
- k est une constante $<< 1$.

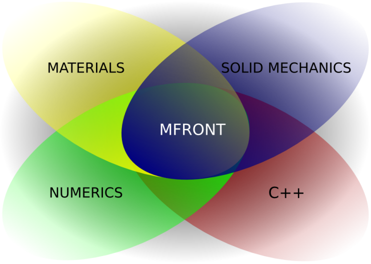
Évolution de l'endommagement

- Utilisation de l'inégalité de Clausius-Duhem pour vérifier que la dissipation mécanique est possible.
- Choix d'une évolution de l'endommagement et traitement de l'irréversibilité de l'endommagement :

$$\frac{g_c}{l}\left[d - l^2 \triangle d\right] = 2\,(1-d)\,H$$

avec $H(x,t) = \max_{\tau \in [0,t]} \Psi^+(x,\tau)$

Implantation dans Cast3M



- Implantation de la loi de comportement : `MFront`

  `http://tfel.sourceforge.net`

- Une procédure mécanique et un opérateur d'intégration dédiés à `PLEIADES` : `INCREPL` et `COPL`
  - Support de la matrice tangente cohérente
  - Support des lois non locales

2 algorithmes : notations

- Si $\Delta\, d$ est connu, l'incrément de déplacement s'obtient par la résolution de l'équilibre :

$$\Delta\,\vec{u} = \mathcal{L}_d\left(\vec{u}\big|_t\,, d\big|_t\,, \Delta\, d\right)$$

- Si $\Delta\,\vec{u}$ est connu, l'incrément d'endommagement s'obtient par la résolution de l'équation de phase-field $\Delta\, d$:

$$\Delta\, d = \mathcal{L}_u\left(\vec{u}\big|_t\,, d\big|_t\,, \Delta\,\vec{u}\right)$$

- La solution quasi-statique est le couple $\Delta\,\vec{u}, \Delta\, d$ qui vérifie **simultanément** les deux équations :

$$\begin{cases} \Delta\,\vec{u} = \mathcal{L}_d\left(\vec{u}\big|_t\,, d\big|_t\,, \Delta\, d\right) \\ \Delta\, d = \mathcal{L}_u\left(\vec{u}\big|_t\,, d\big|_t\,, \Delta\,\vec{u}\right) \end{cases}$$

2 algorithmes : notations

- Si $\Delta\, d$ est connu, l'incrément de déplacement s'obtient par la résolution de l'équilibre :

$$\Delta\,\vec{u} = \mathcal{L}_d\left(\vec{u}\big|_t, d\big|_t, \Delta\, d\right)$$

- Si $\Delta\,\vec{u}$ est connu, l'incrément d'endommagement s'obtient par la résolution de l'équation de phase-field $\Delta\, d$:

$$\Delta\, d = \mathcal{L}_u\left(\vec{u}\big|_t, d\big|_t, \Delta\,\vec{u}\right)$$

- La solution quasi-statique est le couple $\Delta\,\vec{u}, \Delta\, d$ qui vérifie **simultanément** les deux équations :

$$\begin{cases} \Delta\,\vec{u} = \mathcal{L}_d\left(\vec{u}\big|_t, d\big|_t, \Delta\, d\right) \\ \Delta\, d = \mathcal{L}_u\left(\vec{u}\big|_t, d\big|_t, \Delta\,\vec{u}\right) \end{cases}$$

- $\Delta\,\vec{u}$ est obtenu par un algorithme itératif :

$$\Delta\,\vec{u}^{n+1} = \mathbb{K}^{-1}\left(\vec{u}\big|_t, d\big|_t, \Delta\,\vec{u}^n, \Delta\, d\right)\cdot\mathcal{R}\left(\vec{u}\big|_t, d\big|_t, \Delta\,\vec{u}^n, \Delta\, d\right)$$

2 algorithmes de la littérature

- Miehe et al. :

$$\begin{cases} \Delta\, d = \mathcal{L}_u \left(\vec{u}\big|_t , d\big|_t , \Delta\, \vec{0} \right) \\ \Delta\, \vec{u} = -\mathbb{K}^{-1} \left(\vec{u}\big|_t , d\big|_t , \vec{0}, \Delta\, d \right) \cdot \mathcal{R} \left(\vec{u}\big|_t , d\big|_t , \vec{0}, \Delta\, d \right) \end{cases}$$

- NGuyen et al. :

$$\begin{cases} \Delta\, d = \mathcal{L}_u \left(\vec{u}\big|_t , d\big|_t , \Delta\, \vec{0} \right) \\ \Delta\, \vec{u} = \mathcal{L}_d \left(\vec{u}\big|_t , d\big|_t , \Delta\, d \right) \end{cases}$$

Une première implantation dans Cast3M

Mise en œuvre

Schéma par incrémentation avec un petit pas de temps: $\delta t = t^{n+1} - t^{n}$.

Etape initiale: Initialisation $\boldsymbol{u}_0(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0}$, $d_0(\boldsymbol{x}) = 0, \mathcal{H}_0(\boldsymbol{x}) = 0$.

Etape n:

$\boldsymbol{\varepsilon}_n(\boldsymbol{u}),\ d_n$ connus

⇓ **MFRONT**

$\mathcal{H}_n = max\{\psi_{n-1}{}^{+}, \psi_n{}^{+}\}$

⇓ **CAST3M, COPL**

Résolution d'un ***problème thermique*** *pour* d_{n+1}

⇓ **MFRONT**

Construction des matrices $\boldsymbol{P}^{+}{}_{n}, \boldsymbol{P}^{-}{}_{n}, \mathbf{K}_{n}$

⇓ **CAST3M, COPL**

Résolution d'un ***problème mécanique*** *pour* $\boldsymbol{u}_{n+1}$

LINEAIRE

- de belles vidéos...

Mise en œuvre

Schéma par incrémentation avec un petit pas de temps: $\delta t = t^{n+1} - t^{n}$.

Etape initiale: Initialisation $\boldsymbol{u}_0(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0}$, $d_0(\boldsymbol{x}) = 0, \mathcal{H}_0(\boldsymbol{x}) = 0$.

Etape n:

$\boxed{\boldsymbol{\varepsilon}_n(\boldsymbol{u}),\ d_n \text{ connus}}$

$\Downarrow$ **MFRONT**

$\boxed{\mathcal{H}_n = max\{\psi_{n-1}{}^{+}, \psi_n{}^{+}\}}$

$\Downarrow$ **CAST3M, COPL**

Résolution d'un ***problème thermique*** *pour* d_{n+1}

$\Downarrow$ **MFRONT**

Construction des matrices $\boldsymbol{P}^{+}{}_{n}, \boldsymbol{P}^{-}{}_{n}, \mathbf{K}_{n}$

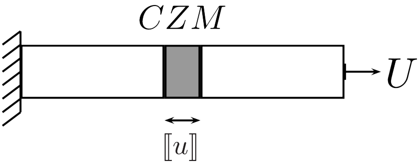
$\Downarrow$ **CAST3M, COPL**

Résolution d'un ***problème mécanique*** *pour* $\boldsymbol{u}_{n+1}$

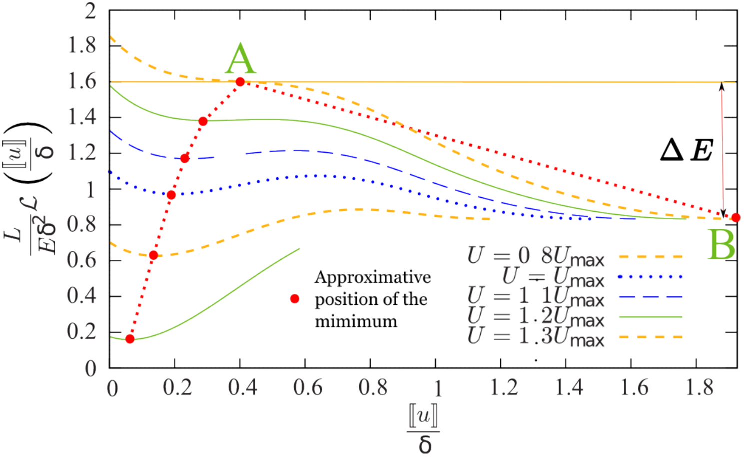
LINEAIRE

- de belles vidéos...
- dépendance des résultats au pas de temps

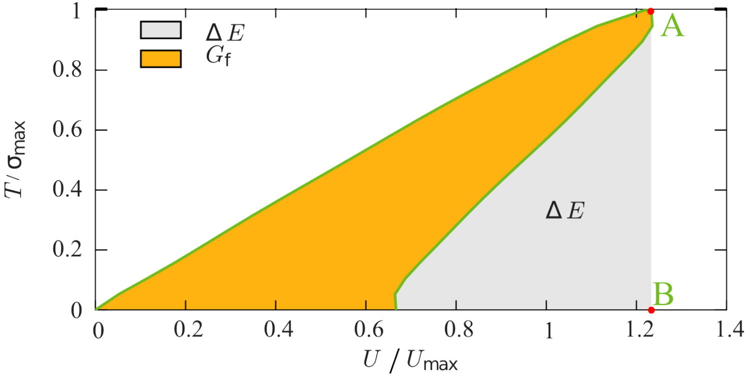
Propagation instable en quasi-statique



Propagation instable en quasi-statique



Propagation instable en quasi-statique



Implantation dans Cast3M : 2 algorithmes implicites

Premier algorithme

$$\begin{cases} \Delta\, d^{n+1} = \mathcal{L}_u \left(\vec{u}\big|_t, d\big|_t, \Delta\, \vec{u}^n \right) \\ \Delta\, \vec{u}^{n+1} = -\mathbb{K}^{-1} \left(\vec{u}\big|_t, d\big|_t, \Delta\, \vec{u}^n, \Delta\, d^{n+1} \right) \cdot \mathcal{R} \left(\vec{u}\big|_t, d\big|_t, \Delta\, \vec{u}^n, \Delta\, d^{n+1} \right) \end{cases}$$

- Modification mineure d'`INCREPL` :
  - On résoud l'équation de phase-field avant l'intégration de la loi de comportement.
  - On converge sur l'équilibre.
  - L'opérateur de recherche $\mathbb{K}$ le plus efficace est l'opérateur sécant.
  - On dispose de tout l'arsenal de Cast3M :
    - accélération de convergence
    - convergence forcée

Second algorithme

$$\begin{cases} \Delta\, d^{n+1} = \mathcal{L}_u \left(\vec{u}\big|_t \,, d\big|_t \,, \Delta\, \vec{u}^n \right) \\ \Delta\, \vec{u}^{n+1} = \mathcal{L}_d \left(\vec{u}\big|_t \,, d\big|_t \,, \Delta\, d^{n+1} \right) \end{cases}$$

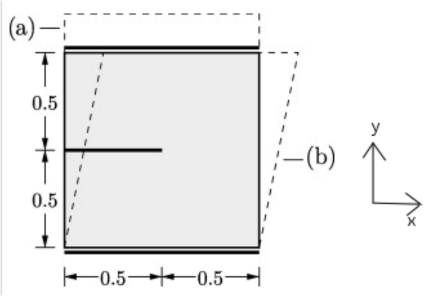
- On résoud la mécanique à endommagement constant :
  - convergence quadratique avec l'opérateur sécant !
- On réalise un point fixe sur l'endommagement :
  - On arrête quand l'endommagement est stationnaire :

$$\delta^n \,\Delta\, d = \Delta\, d^{n+1} - \Delta\, d^n < \varepsilon_d$$

  - La convergence sur $\Delta\, d$ peut être accélérée
- Cette approche ne fonctionne pas...

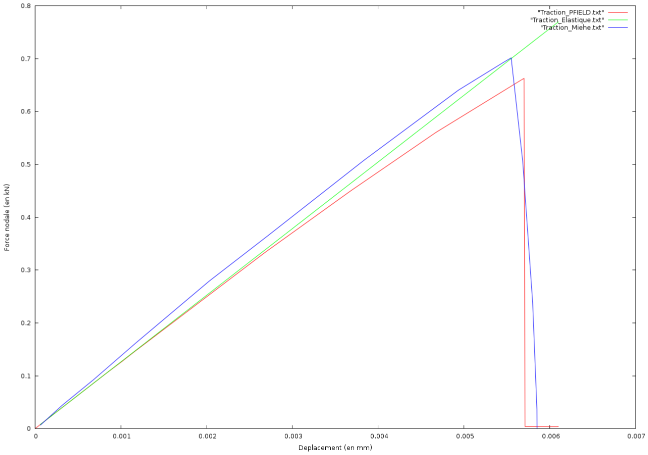
Vérifications

Cas test de Miehe en traction et en cisaillement

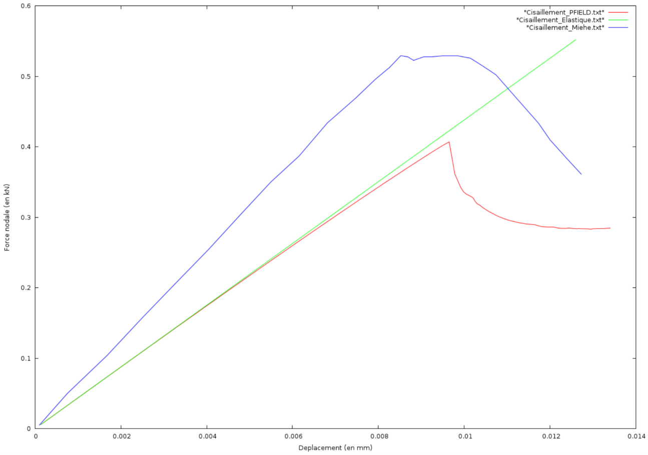


- Représentation du cas test de Miehe (a) en traction et (b) en cisaillement.
- On considère que la ligne du bas est encastrée et que la ligne du haut subit un déplacement uniforme selon (a) Uy ou (b) Ux.

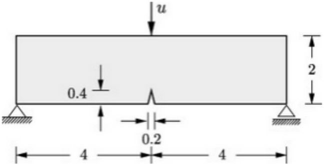
Résultats en traction

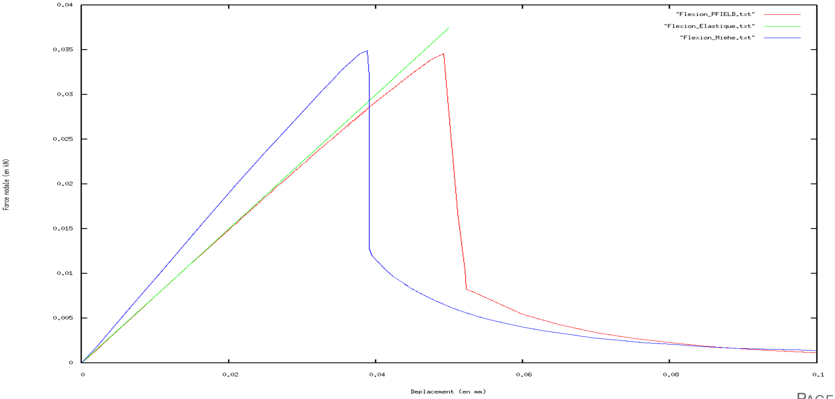


Résultats en cisaillement



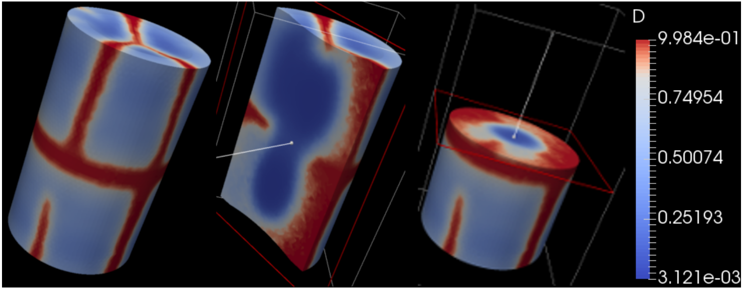
Cas test de Miehe en flexion 3 points





Exemples d’applications

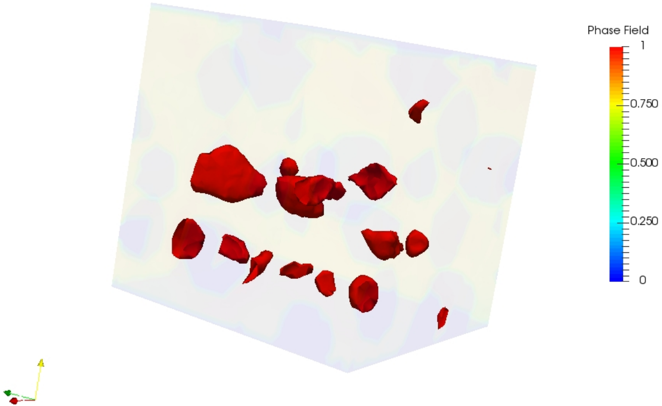
Fissuration de la pastille combustible



Application aux bétons : traction d'un VER

Application aux bétons : traction d'un VER

Application aux bétons : compression d'un VER

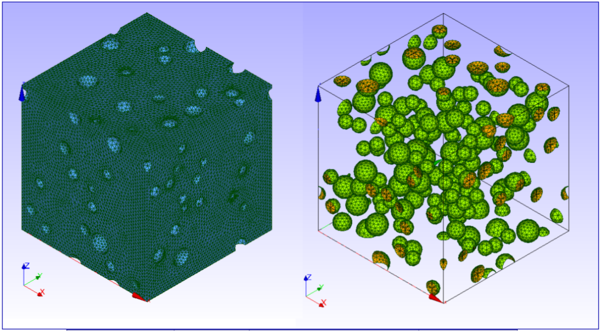


Conclusions et perspectives

Conclusions sur l'implantation actuelle

- la structure de Cast3M permet d'implanter les approches par champ de phase :
  - de manière très simple
  - sans aucun développement spécifique
  - en testant différents algorithmes numériques
- nous avons une solution fonctionnelle :
  - mais les performances sont encore à améliorer

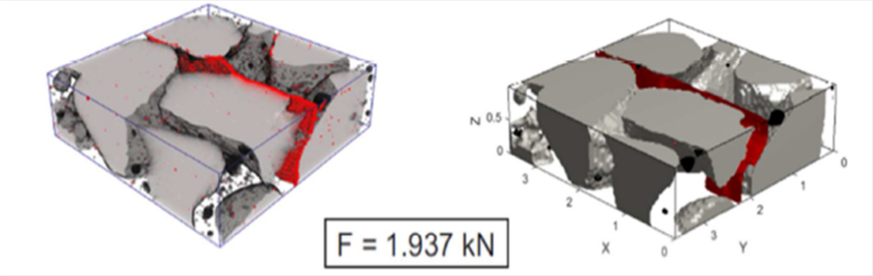
Application aux microstructures HBS



- fragmentation du combustible nucléaire sous l'effet des bulles de produits de fissions gazeux en situation incidentelle
- travaux de Coralie Esnoul

Application à des microstructures réelles

Référence: Comparaison entre la simulation et l'essai expérimental (Nguyen et al. 2015)



Fissuration dans un béton 3D: l'essai expérimentale (gauche) et la simulation numérique (droite).

20 millions d'éléments

Merci pour votre attention !

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives
Centre de Cadarache | DEN/DEC/SESC b151 - 13108 Saint-Paul-Lez-Durance
T. +33 (0)4.42.25.23.66 | F. +33 (0)4.42.25.47.47
Établissement public à caractère industriel et commercial | RCS Paris B 775 685 019

Direction de l'Énergie Nucléaire
Département d'Études des Combustibles
Service d'Études et de Simulation du comportement des Combustibles