



**HAL**  
open science

## Simulation numérique de la rupture dynamique des matériaux hétérogènes

Frédéric Perales, Yann Monerie, Frédéric Dubois, Laurent Stainier

► **To cite this version:**

Frédéric Perales, Yann Monerie, Frédéric Dubois, Laurent Stainier. Simulation numérique de la rupture dynamique des matériaux hétérogènes. 7ème Colloque National en Calcul des Structures, May 2005, Giens, France. hal-00580802

**HAL Id: hal-00580802**

**<https://hal.science/hal-00580802v1>**

Submitted on 30 Nov 2016

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

# Simulation numérique de la rupture dynamique des matériaux hétérogènes

Frédéric Perales\*, Yann Monerie\*, Frédéric Dubois\*\*,  
Laurent Stainier\*\*\*

\* Institut de Radioprotection et de Sécurité Nucléaire (IRSN)  
DPAM/SEMCA/LEC, bat 702 - CE Cadarache - BP3  
13115 St Paul-Lez-Durance, France  
{frederic.perales,yann.monerie}@irsn.fr

\*\* Laboratoire de Mécanique et Génie Civil (LMGC)  
LMGC/UMR CNRS 5508, Université Montpellier II, CC048  
Place E. Bataillon, 34095 Montpellier Cedex 5, France

\*\*\* Département AéroSpatiale, Mécanique et mATériaux (ASMA)  
LTAS-MCT, Université de Liège  
1 ch. des chevreuils, 4000 Liège, Belgique

*RÉSUMÉ. Ce papier présente un outil de simulation numérique permettant l'étude de la fissuration dynamique des matériaux hétérogènes et à gradients de propriétés. Cet outil est basé sur la notion de Modèles de Zone Cohésive Frottante et sur l'approche Non-Smooth Contact Dynamics. La plateforme numérique, composée de trois bibliothèques avec une conception orientée objet, permet des simulations tridimensionnelles en grandes déformations depuis l'amorçage des fissures jusqu'à la ruine finale du matériau. Un exemple de fissuration de matériau hétéro-gène utilisé dans l'industrie nucléaire, le Zircaloy-4 hydruré, est présenté.*

*ABSTRACT. This paper presents a new numerical simulation framework dedicated to the study of the dynamic fracture of functionally graded heterogeneous materials. This framework is based on the concept of Frictional Cohesive Zone Model in the framework of Non-Smooth Contact Dynamics. The numerical platform, composed of three object-oriented libraries, allows for three dimensional finite deformation simulations, from crack initiation to post-fracture behavior. An example of fracture in hydrided Zircaloy-4, an heterogeneous material used in the nuclear industry, is presented.*

*MOTS-CLÉS : Fissuration, dynamique non régulière, matériaux hétérogènes, simulation numérique, Modèles de Zone Cohésive*

*KEYWORDS: Fissuration, non smooth dynamics, heterogeneous materials, numerical simulation, Cohesive Zone Models*

## 1. Introduction

Ce travail concerne la simulation numérique de la rupture dynamique des matériaux hétérogènes. Un logiciel permettant ces simulations a été développé dans le cadre des recherches de l'Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire (IRSN) relatives à la sûreté des réacteurs à eau sous pression. Il est basé sur la notion de Modèles de Zone Cohésive Frottante (MCZF) pour la fissuration en présence de conditions de contact frottant, et sur la méthode Non-smooth Contact Dynamics (NSCD) pour le traitement des problèmes de dynamique non régulière. La plateforme se compose d'une bibliothèque Fortran90 dédiée aux comportements surfaciques en dynamique non régulière (LMGC90), d'une bibliothèque C++ dédiée à la résolution des EDPs (PELICANS) et d'une bibliothèque C++ consacrée aux modèles constitutifs volumiques (MATLIB). Les modèles utilisés dans cette plateforme sont présentés, puis son architecture est évoquée et enfin, ses potentialités sont illustrées sur un exemple de rupture d'un matériau hétérogène utilisé dans l'industrie nucléaire, le Zircaloy-4 hydruré.

## 2. Modèle de Zone Cohésive Frottante (MCZF)

Le MCZF considéré ici est obtenu par le couplage d'une force adhésive avec des conditions de contact unilatéral et de frottement de Coulomb.

$$(R_N + R_N^{adh}) \in \partial I_{\mathbb{R}^+}(u_N) \quad [1]$$

$$(R_T + R_T^{adh}) \in \partial(\mu |R_N + R_N^{adh}| \|\dot{u}_T\|) \quad [2]$$

$$R^{adh} = K(\beta) \cdot [u] \quad \text{et} \quad \beta = \min(\beta_0, g(\|[u]\|)) \quad [3]$$

où  $I_X$  est la fonction indicatrice de l'ensemble  $X$ , les indices  $N$  et  $T$  désignent les composantes normales et tangentielles de la force totale ( $R = R_N n + R_T t$ ), de la force adhésive ( $R^{adh} = R_N^{adh} n + R_T^{adh} t$ ) et du saut de déplacement ( $[u] = u_N n + u_T t$ ),  $n$  la normale unitaire sortante,  $\mu$  le coefficient de frottement de Coulomb,  $\beta$  une variable traduisant l'endommagement surfacique,  $K(\beta)$  une matrice traduisant l'adoucissement progressif du comportement surfacique lors d'une fissuration et  $g$  une fonction décroissante de  $\|[u]\|$ .

Une variante de la loi d'endommagement surfacique de [MIC 94] est introduite (pour la présente écriture voir [MON 98]) :

$$K(\beta) = \beta \left( C_N n \otimes n + C_T \frac{u_T \otimes u_T}{\|u_T\|^2} \right), \quad g(x) = \begin{cases} \beta_0 & \text{si } x \leq \delta_0 \\ 0 & \text{si } x \geq \delta_c \\ \frac{\beta_0(\delta_c - x)}{\delta_c - 2\delta_0 + x} & \text{sinon} \end{cases}$$

avec  $\delta_0 = \sqrt{\frac{w}{(9 - 4\ln 4)} \left( \frac{1}{C_N} + \frac{1}{C_T} \right)}$ ,  $\delta_c = 3\delta_0$ ,  $C_N$  et  $C_T$  des raideurs ( $Pa/m$ ),  $0 \leq \beta_0 \leq 1$  un niveau d'endommagement surfacique initial et  $w$  une énergie de référence (en  $J/m^2$ ).

### 3. “Non-Smooth Contact Dynamics” et Modèle de Zone Cohésive Frottante

Le problème dynamique est composé des équations ([1]-[3]) et de la discrétisation spatiale de l'équation de la dynamique :

$$M\ddot{q} = F(q, \dot{q}, t) + r \quad [4]$$

où  $q$ ,  $\dot{q}$  et  $\ddot{q}$  sont respectivement les vecteurs déplacement, vitesse et accélération discrets,  $M$  est la matrice de masse,  $F(q, \dot{q}, t)$  représente les forces intérieures et extérieures et  $r$  les forces de contact. Cette équation est traitée dans le cadre de la méthode NSCD [JEA 99] et du cadre fonctionnel proposé par [MOR 88].

L'intégration de l'équation [4] est effectuée au sens des mesures différentielles et son intégration temporelle entre  $]t_i, t_{i+1}]$  par une  $\theta$ -méthode. Les inconnues du problème sont les valeurs discrètes de la vitesse  $\dot{q}_{i+1}$  et de l'impulsion  $hr_{i+1}$  au temps  $t_{i+1}$  et  $h$  est la longueur de l'intervalle  $]t_i, t_{i+1}]$ . Le système non-linéaire obtenu est résolu par une méthode de Newton-Raphson.

En utilisant le changement de variable de [MON 01], le système tridimensionnel pour chaque contact  $\alpha$  s'écrit :

$$\begin{cases} U^\alpha - U_{locib}^\alpha - W^{\alpha\alpha} h(R + R^{adh})^\alpha = 0 \\ R_N^\alpha - \text{proj}_{\mathbb{R}^+}(R_N^\alpha - \rho U_N^\alpha) = 0 \\ R_T^\alpha - \text{proj}_{D(\mu|R_N^\alpha|)}(R_T^\alpha - \rho U_T^\alpha) = 0 \end{cases} \quad [5]$$

où  $\rho > 0$  et  $D(\mu|R_N^\alpha|)$  est le disque de centre 0 et de rayon  $\mu|R_N^\alpha|$ ,  $U$  et  $R$  les valeurs locales de la vitesse et de l'impulsion,  $U_{locib}^\alpha$  la vitesse au contact  $\alpha$  sans réaction adhésive et  $W^{\alpha\alpha}$  la condensation de l'inverse de la matrice des itérations.

Le système non linéaire [5] est résolu par la méthode de Newton généralisé proposée dans [ALA 88].

### 4. Plateforme numérique

La mise en œuvre de l'outil numérique s'appuie sur une conception orientée objet qui permet une évolution future du logiciel. Cette conception repose sur le couplage encapsulé de trois bibliothèques LMGC90>PELICANS>MATLIB :

*LMGC90* est une plateforme conçue avec une approche orientée objet et réalisée en Fortran 90 [DUB 03]. Cette plateforme développée au Laboratoire de Mécanique et Génie Civil de Montpellier est dédiée à la modélisation et au traitement des problèmes d'interaction entre corps. Elle se base sur la méthode NSCD.

Gestion :

- discrétisation temporelle (dynamique)
- Newton (Non linéaire)
- méthode NSCD (comportements surfaciques)

*PELICANS* est une bibliothèque consacrée à la résolution notamment par la méthode des Eléments Finis des EDPs et développée à l’Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire [PIA 03] en C++.

Gestion : – Eléments finis

*MATLIB* est une bibliothèque portable de modèles constitutifs volumiques développée au Laboratoire des Techniques Aéronautiques et Spatiales (LTAS) de Liège par Stainier [STA 03] en C++. Elle est basée sur un formalisme variationnel de la viscoplasticité incrémentale adaptée à une structure orientée objet [ORT 99].

Gestion : – Modèles volumiques

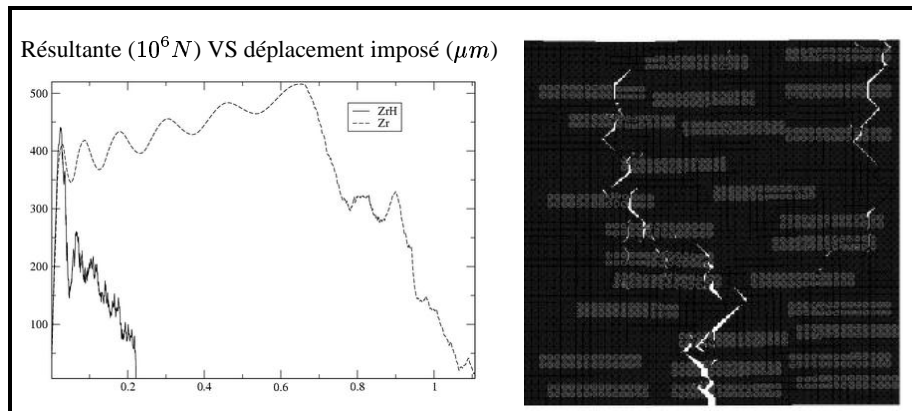
Afin de pouvoir amorcer et propager des fissures en tout point de la discrétisation, un modèle de zones cohésives est implémenté entre chaque maille d’une discrétisation Eléments Finis [XU 94]. Le logiciel permet de simuler, en 3D et grandes déformations, la rupture dynamique des matériaux hétérogènes et à gradients de propriétés, de l’amorçage de multifissures jusqu’à la ruine finale.

## 5. Rupture dynamique d’un volume élémentaire de Zircaloy-4 hydruré

L’exemple qui suit consiste à étudier l’effet d’inclusions fragiles (hydrures) dans une matrice élastoplastique (Zircaloy-4). Ce problème concerne l’analyse de la rupture des tubes-gaine de combustible nucléaire lors de situations accidentelles. Ces tubes sont initialement constitués de Zircaloy-4. Durant leur vie en réacteur, des inclusions d’hydrures apparaissent sous forme de plaquettes, principalement orientées dans la direction orthoradiale. Deux cas sont considérés ici : un volume élémentaire de Zircaloy-4 sans inclusions et un volume élémentaire de Zircaloy-4 hydruré contenant des inclusions d’hydrures rectangulaires, orientées dans le sens de la sollicitation et distribuées aléatoirement (fraction volumique de 30 %). Les volumes élémentaires carrés envisagés font  $10\mu m$  de coté. La matrice est élastoplastique ( $E = 98\text{ GPa}$ ,  $\nu=0.325$ , limite élastique =  $500\text{ MPa}$ , plasticité  $J_2$ ) avec écrouissage isotrope linéaire (module  $200\text{ MPa}$ ) et les hydrures de type neo-Hookéens ( $E=135\text{ GPa}$ ,  $\nu=0.32$ ). L’adhérence entre la matrice et les hydrures est “forte” ( $w^i/w^h \simeq 10^5$ , où  $w^i$  et  $w^h$  désignent respectivement l’énergie de décohésion de l’interface matrice-hydrure et matrice-matrice). Les données interfaciales sont résumées dans le Tableau 1. Enfin, le frottement est supposé faible pour toutes les interfaces en présence :  $\mu = 0.05$ . Le chargement est constitué de vitesses imposées sur les faces horizontales :  $V = 2m/s$  (à “droite”) et  $V = -2m/s$  (à “gauche”).

	Matrice-Matrice	Matrice-Hydrure	Hydrure-Hydrure
$c_N = c_T$	$2 \times 10^{19}$	$2 \times 10^{19}$	$4 \times 10^{19}$
$w\ (J/m^2)$	$7 \times 10^{-2}$	$7 \times 10^3$	$3 \times 10^{-2}$

**Tableau 1.** Paramètres utilisés dans le MZCF.



**Figure 1.** *Faciès de rupture du volume élémentaire de Zircaloy-4 hydruré et résultante sur la structure VS déplacement appliqué dans le cas du Zircaloy-4 avec hydrures (ZrH) et sans hydrures (Zr).*

L'effet fragilisant des inclusions d'hydrures est illustré sur la Figure 1. Les courbes de gauche indiquent l'évolution de résultante sur la cellule en fonction du déplacement appliqué pour le Zircaloy pur (courbe "supérieure") et pour le Zircaloy hydruré à 30% (courbe "inférieure"). Pour le Zircaloy pur, il apparaît clairement que la juxtaposition d'un comportement volumique élastoplastique et de MZCFs entre chaque maille conduit à un comportement apparent de type *élastoplastique endommageable* tel qu'il est observé expérimentalement : déformation à rupture aux alentours de 10%. L'introduction de 30% d'hydrures réduit cette déformation à rupture d'environ 80%. Le comportement apparent du Zircaloy hydruré est ainsi d'avantage du type élastique fragile. Dans ce dernier cas, la fissure s'initie dans les hydrures, créant une multifissuration du matériau, puis se propage dans la matrice (voir le faciès de rupture sur la Figure 1 à droite). Les hydrures jouent ainsi un rôle fragilisant : l'énergie nécessaire pour rompre la cellule de Zircaloy hydruré à 30% est environ 10 fois plus faible que pour le cas du Zircaloy pur.

## 6. Conclusion

Ce papier a présenté un outil de simulation numérique pour l'étude de la fissuration dynamique de matériaux hétérogènes, depuis l'initiation de fissures jusqu'à la ruine du matériau. Cet outil est basé sur les Modèles de Zone Cohésive Frottante (MZCF) et sur la méthode Non-Smooth Contact Dynamics (NSCD). Une simulation numérique de la rupture dynamique du Zircaloy-4 vierge et hydruré a permis de mettre en évidence :

- un traitement pertinent des situations de dynamique rapide par des algorithmes *implicites*,

- la gestion des conditions non régulières de contact frottant sans pénalisation ni régularisation par la méthode NSCD,
- l’obtention de comportements apparents élastoplastiques endommageables par la juxtaposition de modèles de comportement volumique élastoplastiques et de MZCF fragiles,
- la pertinence de l’approche pour l’analyse de la fissuration et de la rupture des matériaux hétérogènes,
- dans le cas du Zircaloy, le caractère fragilisant d’inclusions d’hydrures.

## 7. Bibliographie

- [ALA 88] ALART P., CURNIER A., « A generalized newton method for contact problems with friction. », *Journal de Mécanique Théorique et Appliquée*, vol. 7, 1988, p. 67–82.
- [DUB 03] DUBOIS F., JEAN M., « Une plateforme de développement dédiée à la modélisation des problèmes d’interaction », *Actes du sixième colloque national en calcul de structures - CSMA-AFM-LMS*, vol. 1, Giens, 2003, p. 111–118.
- [JEA 99] JEAN M., « The non-smooth contact dynamics method », *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 177, 1999, p. 235–257.
- [MIC 94] MICHEL J.-C., SUQUET P., THÉBAUD F., « Une modélisation du rôle des interfaces dans le comportement des composites à matrice métallique », *Revue Européenne des Elements Finis*, vol. 3, 1994.
- [MON 98] MONERIE Y., RAOUS M., LEROY F., SUDRE O., FEYEL F., CHABOCHE J., « Comparaison de lois d’interface fibre/matrice sur la base d’un modèle uniaxial d’expérience de micro-indentation », LAMON J., BAPTISTE D., Eds., *Comptes Rendus des Onzièmes Journées Nationales sur les Composites*, vol. II, Arcachon, 18-20 Novembre 1998, AMAC, p. 565-574.
- [MON 01] MONERIE Y., ACARY V., « Formulation dynamique d’un modèle de zone cohésive tridimensionnel couplant endommagement et frottement. », *Revue Européenne des Elements Finis*, vol. 10, 2001, p. 489–503.
- [MOR 88] MOREAU J.-J., « Unilateral contact and dry friction in finite freedom dynamics. », MOREAU J.-J., PANAGIOTOPOULOS P., Eds., *Non Smooth Mechanics and Applications*, vol. 302 de *CISM - Courses and Lectures*, Vienna, 1988, Springer, p. 1–82.
- [ORT 99] ORTIZ M., STAINIER L., « The variational formulation of viscoplastic constitutive updates », *Computer methods in applied mechanics and engineering*, vol. 171, 1999, p. 419–444.
- [PIA 03] PIAR B., CHAILAN L., VOLA D., « Scientific Software Architectures Designed to Survive Change », *Trend in Physical and Numerical of Multiphase Industrial Flows. Car-gèse*, 2003.
- [STA 03] STAINIER L., DUBOIS F., PEYROUX R., « MatLib, une bibliothèque portable de modèles constitutifs pour la mécanique non-linéaire des solides : concepts et implémentation », POTIER-FERRY M., BONNET M., BIGNONNET A., Eds., *6ème Colloque National en Calcul des Structures*, vol. 3, Giens, France, 2003, p. 25–32.
- [XU 94] XU X.-P., NEEDLEMAN A., « Numerical simulations of fast crack growth in brittle solids », *Journal of Mechanics and Physics of Solids*, vol. 42, n° 9, 1994, p. 1397–1434.