

Une approche de la nucléation, de la propagation et de la refermeture de fissures couplant modèles d'endommagement à gradient et méthode du troisième corps

Thomas Helfer⁽¹⁾, Pedro Nava Soto⁽²⁾, Dorian Chanteloup⁽³⁾, Jean-Michel Scherer⁽⁴⁾, Olivier Fandeur⁽⁵⁾, Adrien Jaccon⁽⁶⁾, Jacques Besson⁽⁷⁾

⁽¹⁾ CEA, DES, IRESNE, DEC, SESC, Cadarache, F-13108 Saint-Paul-Lez Durance, France, thomas.helfer@cea.fr

⁽²⁾ CEA, DES, IRESNE, DEC, SESC, Cadarache, F-13108 Saint-Paul-Lez Durance, France, pedro.NAVASOTO@cea.fr

⁽³⁾ CEA, DES, IRESNE, DEC, SESC, Cadarache, F-13108 Saint-Paul-Lez Durance, France, chpdorian83@gmail.com

⁽⁴⁾ Mines Paris, Université PSL, Centre des Matériaux (MAT), UMR7633 CNRS, Versailles, 78000, France, jean-michel.scherer@minesparis.psl.eu

⁽⁵⁾ Université Paris-Saclay, CEA, Service d'Études Mécaniques et Thermiques, 91191, Gif-sur-Yvette, France, olivier.fandeur@cea.fr

⁽⁶⁾ Université Paris-Saclay, CEA, Service d'Études Mécaniques et Thermiques, 91191, Gif-sur-Yvette, France, adrien.jaccon@cea.fr

⁽⁷⁾ Mines Paris, Université PSL, Centre des Matériaux (MAT), UMR7633 CNRS, Versailles, 78000, France, jacques.besson@minesparis.psl.eu

Résumé — Dans cette étude, nous proposons une approche nouvelle pour décrire la refermeture de fissures approximées par un modèle d'endommagement à gradient, même en cas de mouvement relatifs importants des lèvres de la fissure.

Nous introduisons une surface de nucléation fermée conduisant à un endommagement à la fois en traction et compression. Au comportement du matériau, un comportement dit de troisième corps est ajouté pour traiter la refermeture des fissures.

Mot clés Modèle d'endommagement à gradient, troisième corps, refermeture de fissures.

Introduction

La simulation des pastilles de combustibles nucléaires nécessite de décrire la nucléation, la propagation et la refermeture d'un réseau complexe de fissures dû aux sollicitations extrêmes subies par le matériau, induit notamment, en début de vie, par de forts gradients thermiques.

Les modèles d'endommagement à gradient offrent un cadre intéressant pour décrire ces différentes phases, à l'exception de la phase de refermeture: lors de la simulation de la fragmentation d'une pastille lors de la première montée en puissance, des difficultés de convergence du problème d'équilibre mécanique sont apparues et ont été attribuées aux grands mouvements relatifs possibles entre les lèvres des fissures formant les fragments (1).

En effet, ces modèles introduisent communément une décomposition de l'énergie libre élastique pour décrire la différence de comportement entre traction et compression. Les différentes décompositions proposées dans la littérature interdisent généralement l'endommagement du matériau en compression, la surface de nucléation n'étant pas bornée, au moins pour un chargement sphérique en compression. Par ailleurs, aucune ne semble totalement satisfaisante, même s'il a été montré théoriquement et numériquement que certaines d'entre elles avaient le comportement attendu pour des situations de chargements spécifiques. Toutes ont cependant le défaut d'être par essence limitées à de petites transformations et donc de faibles mouvements relatifs des lèvres de fissures.

Dans ce papier, nous introduisons, en section 1, le cadre des modèles d'endommagement utilisés et une surface de nucléation fermée conduisant à un endommagement à la fois en traction et compression.

En section 2, nous décrivons comment l'introduction d'un troisième corps permet de traiter le phénomène de contact unilatéral et les régularisations possibles rendant cette approche numériquement robuste. L'implémentation que nous avons réalisée est vérifiée par comparaison à différents cas de la littérature.

La section 3 propose de superposer un troisième corps au matériau endommageable. Nous montrons ensuite sur deux cas simples que cette approche permet de décrire la propagation et la refermeture de fissures même en cas de mouvements relatifs importants des lèvres de la fissure.

Environnement logiciel

Les simulations numériques présentées ont été réalisées avec le solveur **Manta** (2), couplé au générateur de code **MFront** (3) pour l'implémentation des comportements mécaniques endommageables, de troisième corps et micromorphes.

1 Modèles d'endommagement micromorphe, surface de nucléation

Cette section décrit la classe des modèles d'endommagement à gradient considérés dans cette étude avec une attention particulière à la description de la surface de nucléation.

1.1 Cadre général

Les modèles d'endommagement à gradient considérés dans cette étude peuvent être décrits par le lagrangien incrémental suivant (4):

$$\mathcal{L}(\vec{u}^*, d^*) = \int_{\Omega} \left[\psi(\underline{\epsilon}(\vec{u}^*), d^*, \nabla d^*) + \Delta t \phi \left(\frac{d - d|_t}{\Delta t} \right) \right] dV - \int_{\partial\Omega_T} \vec{T} \cdot \vec{u}^* dS$$

où:

- ψ est l'énergie libre,
- ϕ est le potentiel de dissipation,
- Δt est l'incrément de temps considéré,
- $d|_t$ est le champ d'endommagement en début de pas,
- \vec{T} désigne le vecteur des forces imposées sur la frontière $\partial\Omega_T$,
- $\underline{\epsilon}$ désigne une mesure de déformation,
- \vec{u}^*, d^* désignent l'ensemble des champs de déplacements et d'endommagements admissibles.

Le potentiel de dissipation ϕ est supposé être une fonction positivement homogène de degré 1 pour décrire un matériau indépendant du temps, ce qui permet d'éliminer l'incrément de temps de l'expression du Lagrangien:

$$\Delta t \phi \left(\frac{d^* - d|_t}{\Delta t} \right) = \phi(d^* - d|_t)$$

Ce potentiel de dissipation ne contient ici qu'une fonction indicatrice imposant l'irréversibilité de l'endommagement:

$$\phi(\dot{d}) = \mathbb{I}_{\mathbb{R}_+}(\dot{d})$$

Les champs de déplacements et d'endommagement solutions minimisent ce Lagrangien:

$$\left(\vec{u}|_{t+\Delta t}, d|_{t+\Delta t} \right) = \underset{\vec{u}^* \in C.A.}{\operatorname{argmin}} \mathcal{L}(\vec{u}^*, d^*)$$

1.2 Approximation micromorphe des modèles d'endommagement à gradient

Les modèles d'endommagement précédents peuvent être approximés par des modèles micromorphes introduisant une variable supplémentaire, l'endommagement micromorphe d_χ dérivant d'un nouveau Lagrangien incrémental (4):

$$\mathcal{L}(\vec{u}^*, d^*, d_\chi^*) = \int_{\Omega} \left[\psi(\underline{\epsilon}^*, d^*, d_\chi^*, \nabla d_\chi^*) + \Delta t \phi \left(\frac{d - d|_t}{\Delta t} \right) \right] dV - \int_{\partial\Omega_T} \vec{T} \cdot \vec{u}^* dS$$

Cette approche a essentiellement pour vertu de minimiser les développements informatiques et permet, par une unique implémentation éléments finis d'approximer, dans un cadre variationnel strict, la majorité des modèles d'endommagement à gradient proposés dans la littérature par un appel à des lois de comportements dédiées:

- le cas des modèles classiques AT1 et AT2 (5, 6) a été traité en détails dans (1, 7),
- le cas de modèles cohésifs est traité dans (8).

L'énergie libre se décompose alors ainsi:

$$\psi(\underline{\epsilon}, d, d_\chi, \nabla d_\chi) = \psi^{el}(\underline{\epsilon}, d) + \psi^d(d) + \psi^{d,d_\chi}(d, d_\chi) + \psi^{\nabla d_\chi}(\nabla d_\chi)$$

Le terme ψ^{d,d_χ} pénalise la différence entre d et d_χ .

$$\psi^{d,d_\chi}(d, d_\chi) = \frac{H_\chi}{2} (d - d_\chi)^2$$

Les énergies $\psi^d(d)$ et $\psi^{\nabla d_\chi}$ dépendent du modèle que l'on cherche à approximer. Dans cette étude, nous retenons celles correspondant au modèle AT1:

$$\begin{aligned} \psi^d(d) &= \frac{8G_c}{3l_c} d \\ \psi^{\nabla d_\chi}(\nabla d_\chi) &= \frac{2}{3} G_c l_c \nabla d_\chi \cdot \nabla d_\chi \end{aligned}$$

où G_c est l'énergie dissipée par la propagation de la fissure et l_c une longueur caractéristique déterminant la taille de la zone endommagée. Le potentiel de dissipation est inchangé.

1.3 Surface de nucléation

La surface de nucléation est définie comme la surface dans l'espace des contraintes conduisant à l'apparition d'endommagement à partir d'un état initialement homogène (9). Cette surface a souvent été induite par le choix d'une modélisation du caractère unilatéral de l'endommagement, c'est à dire par le fait qu'un matériau s'endommage différemment en traction et en compression. Si les décompositions proposées par Amor (10) et Miehe (11) sont classiquement utilisées, des travaux récents (12–14) permettent de décrire des surface de nucléation arbitraires. En gardant une surface non bornée le long de l'axe hydrostatique en compression, ces modèles peuvent prétendre à vérifier les résultats de Γ -convergence vers un modèle de contact unilatéral établi par Chambolle (15).

Cependant ces résultats sont limitées aux petites transformations. Pour éviter cette limitation, nous considérons également dans ce travail des surfaces de nucléation fermées: le matériau peut donc s'endommager complètement en compression.

1.4 Schéma de minimisation alternée

Un schéma de minimisation alternée (6) est utilisé pour trouver numériquement les solutions $\bar{u}|_{t+\Delta t}$, $d|_{t+\Delta t}$ et $d_\chi|_{t+\Delta t}$:

- un problème non linéaire en déplacements à endommagements d et d_χ fixés .
- un problème non linéaire en d et d_χ à déplacements fixés. Dans ce problème d_χ est une inconnue nodale et d une variable interne. Le lecteur pourra consulter (1, 7) pour plus de détails.

2 Traitement du contact par une méthode de troisième corps

Soient deux corps Ω_1 et Ω_2 dans la configuration de référence. La méthode du troisième corps, proposée en 2013 par Wriggers *et al.* (16), consiste à modéliser le milieu situé entre Ω_1 et Ω_2 par un troisième corps Ω_3 décrit par un comportement hyperélastique¹.

Les paramètres de la loi de troisième corps doivent être choisis pour que celui-ci ait une influence négligeable avant contact: la méthode repose sur le fait que la loi de comportement hyperélastique retenue pour le troisième corps voit sa rigidité augmenter fortement quand le déterminant, noté J , du gradient de la transformation, noté \underline{F} , tend vers 0.

2.1 Description du troisième corps

Pour décrire le troisième corps, une loi hyper-élastique néo-hookéenne est retenue. Cette loi est caractérisée par la densité d'énergie suivante:

$$W_m(\underline{C}) = \frac{\gamma K}{2} [\ln J]^2 + \frac{\gamma \mu}{2} (J^{-\frac{2}{3}} \text{tr} \underline{C} - 3)$$

où \underline{C} le tenseur de Cauchy droit², K et μ respectivement le module de compressibilité et le module de cisaillement qui sont pris du même ordre de grandeur que les modules des solides entrant en contact. Le paramètre γ est ajouté afin de contrôler simplement le rapport des rigidités entre ces solides et ceux du troisième corps: γ doit être choisi suffisamment petit pour que l'influence du troisième corps soit négligeable.

L'introduction du troisième corps dans un schéma variationnel revient à ajouter le terme $\int_{\Omega_3} W_m(\underline{C}) dV$ au Lagrangien du système.

2.2 Régularisation

L'extrême déformation des éléments finis associés au troisième corps au moment du contact conduit à des difficultés de convergence rédhitoires. Des termes de régularisation ont alors été introduits dans la littérature (17–19).

Dans cette étude, nous avons repris la régularisation proposée par Wriggers *et al.* qui consiste à pénaliser les grands gradients de changements de volume ∇J et les grands gradients de rotations propres ∇R , ce qui est possible en rajoutant dans le Lagrangien du système considéré des termes du type $\beta_J \int_{\Omega_3} |\nabla J|^2 dV + \beta_R \int_{\Omega_3} |\nabla R|^2 dV$, où β_J et β_R sont des coefficients de pénalisations.

¹Les comportements des corps Ω_1 et Ω_2 ne sont pas précisés: nous supposons qu'ils sont donnés par des contributions à un Lagrangien similaire à celui décrit en section 1.

²On rappelle que $\underline{C} = \underline{F}^T \cdot \underline{F}$ et $J = \det(\underline{F}) = \sqrt{\det(\underline{C})}$.

2.2.1 Cas de la rotation propre en 2D

En 2D, la rotation propre peut être caractérisée par un unique angle φ , tel que $\tan \varphi = \frac{F_{12} - F_{21}}{F_{11} + F_{22}}$. Le terme de régularisation associé à la rotation propre peut donc être remplacé par $\beta_\varphi \int_{\Omega_3} |\nabla \varphi|^2 dV$ (20).

2.2.2 Régularisation micromorphe

L'utilisation directe des gradients ∇J et ∇R nécessiterait des éléments finis d'ordre élevé (quadratique à minima) et des formulations dédiées. Une régularisation micromorphe, proposée par Wriggers *et al.* (20), consiste à introduire deux inconnues supplémentaires J^χ et φ^χ et à ajouter dans le Lagrangien du système les termes:

$$\beta_{J^\chi} \int_{\Omega_3} (J - J^\chi)^2 dV + \beta_{\varphi^\chi} \int_{\Omega_3} (\varphi - \varphi^\chi)^2 dV + \beta_J \int_{\Omega_3} |\nabla J^\chi|^2 dV + \beta_\varphi \int_{\Omega_3} |\nabla \varphi^\chi|^2 dV$$

Les coefficients β_{J^χ} et β_{φ^χ} permettent de pénaliser les écarts respectivement entre J et J^χ , et entre φ et φ^χ .

2.2.3 Implantation numérique

La méthode du troisième corps nécessite de déterminer le minimum d'un Lagrangien portant sur le déplacement u et les variables β_{J^χ} et φ^χ . Une procédure de minimisation alternée similaire à celle proposée en section 1.4 a été mise en place.

2.3 Vérifications

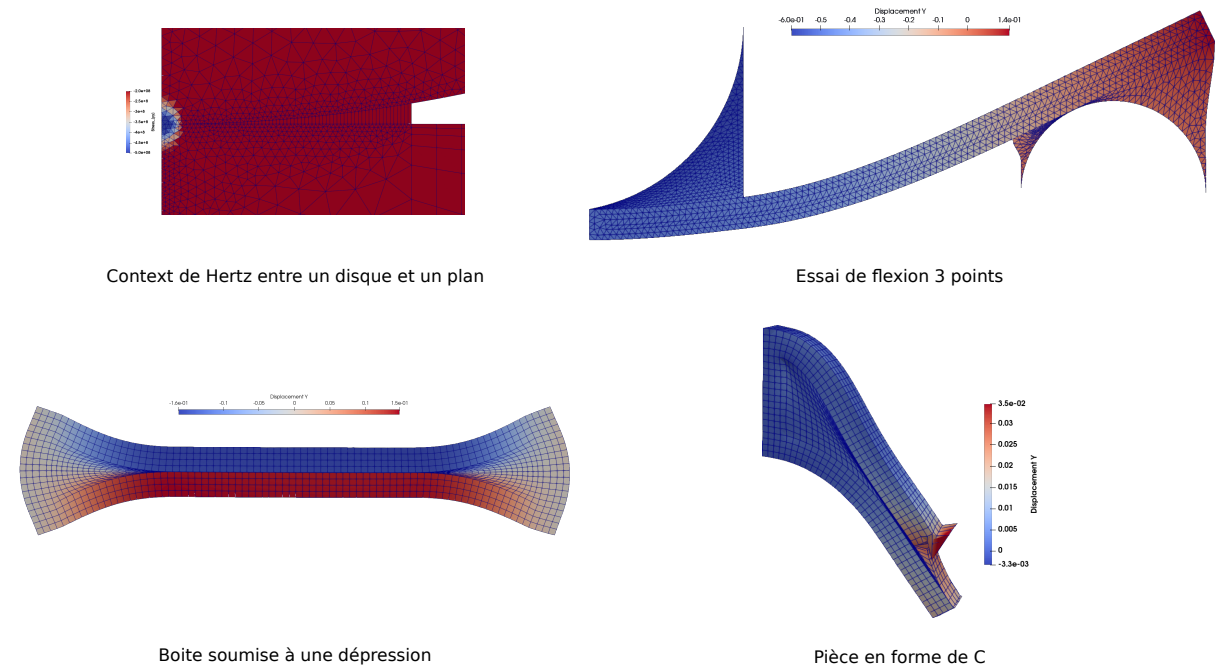


Figure 1: Quelques exemples de tests de vérification de l'implémentation de la méthode de troisième corps

L'implantation proposée a été vérifiée par comparaison à différents cas tests de la littérature, dont certains sont illustrés en figure 1³:

³Par manque de place, la régularisation utilisée en 3D n'a pas été détaillée ici, différentes solutions ayant été implantées. Le lecteur pourra se référer aux articles en référence pour plus de détails.

- le contact de Hertz entre un disque et une surface infinie élastiques. Les déplacements et pressions de contact sont comparés à la solution analytique classique.
- l'essai de flexion trois points. La solution obtenue est comparée à une solution analytique basée sur la théorie de poutres.
- le cas d'un boîte soumise à une dépression. Ce cas a été proposé par Faltus *et al.* (18). Nous avons comparé favorablement nos résultats à ceux des auteurs.
- le cas d'une pièce en forme de C sur la branche supérieure de laquelle un déplacement négatif est imposé. Ce cas test, traité par Wriggers *et al.* (20), sert de référence pour tester la robustesse de la méthode et ne peut être traité sans régularisation. Là aussi, nos résultats se comparent favorablement aux résultats de ces auteurs.

Les jeux de données associés à ces différents cas tests sont disponibles en ligne: <https://github.com/thelfer/third-medium-contact-micromorphic-damage-gradients-giens-2026>

3 Traitement de la refermeture de fissures par une méthode de troisième corps

Dans cette partie, nous proposons de superposer directement les énergies liées au modèle d'endommagement à gradient décrit dans la section 1 au modèle de troisième corps décrit en section 2⁴. Le comportement de troisième corps est supposé n'avoir aucun effet sur le comportement volumique du matériau endommageable, ce que nous avons vérifié dans les deux cas décrits ci-dessous.

Il résulte de ce qui précède que le problème à résoudre est la minimisation d'un Lagrangien portant sur quatre variables: u , d_χ , J_χ et ϕ_χ . Là encore, un algorithme de minimisation alternée est utilisé dans les exemples ci-dessous.

3.1 Barreau uniaxial

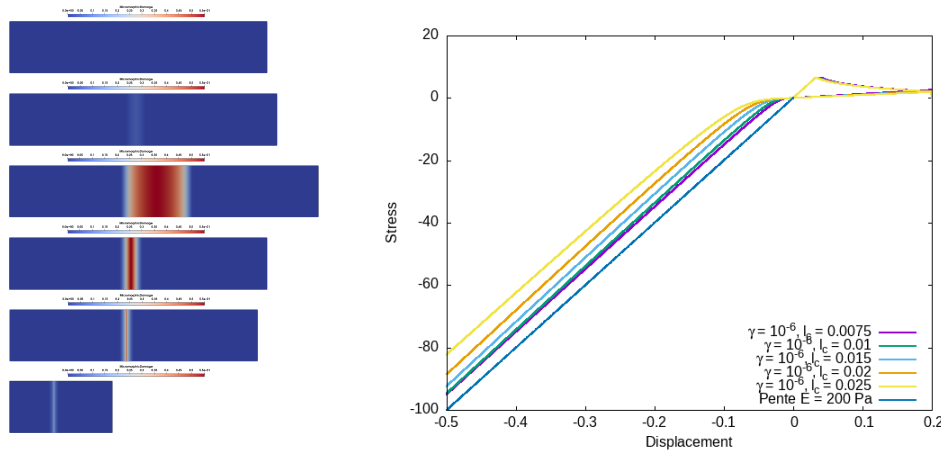


Figure 2: Résultat et exposition des différentes phases de la simulation (gauche). Courbes force/déplacement obtenue pour différentes longueurs caractéristiques (droite).

Pour ce premier exemple, nous considérons le cas d'un barreau uniaxial sans effet Poisson. Le barreau présente un léger défaut géométrique pour contrôler la localisation de l'endommagement.

La surface de nucléation est choisie telle que la limite en compression est infinie: le matériau s'endommage uniquement en traction mais cet endommagement affecte son comportement en compression.

⁴D'autres stratégies, comme introduire une loi des mélanges utilisant la fonction de dégradation, ont également été testées et seront détaillées lors de la présentation orale.

La figure 2 gauche montre l'évolution de la variable d_χ dans un chargement de traction conduisant à l'endommagement partiel du matériau.

La courbe traction-compression obtenue est représentée sur cette même figure à droite. On constate que le troisième corps permet de retrouver la rigidité du matériau initial en compression et que l'instant où cette rigidité est totalement recouverte dépend de la longueur caractéristique de la zone endommagée.

3.2 Un cas présentant un fort mouvement relatif des fissures avant refermeture

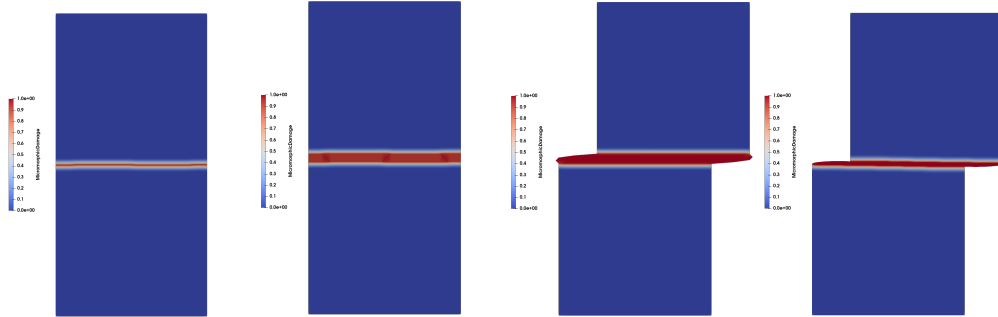


Figure 3: Résultats de la simulation avec un fort mouvement relatif des lèvres de fissure (déplacement relatif amplifié par un facteur 5), montrant de gauche à droite: l'amorçage de la fissuration, la fin de la traction et le début du déplacement relatif, la fin du déplacement relatif et le début de la compression, et la fin de la simulation, une fois les lèvres de la fissures refermées.

Nous reprenons l'exemple d'un barreau que nous rompons totalement avant de faire subir à la partie supérieure un mouvement relatif dans la direction transverse à l'axe du barreau de la moitié de la largeur du barreau puis nous venons comprimer les deux fragments ensemble. Cet exemple montre que de grands mouvements relatifs peuvent être pris en compte par cette approche.

Conclusions et perspectives

Cette étude propose un traitement de la refermeture des fissures induites par un modèle d'endommagement à gradient à l'aide de la méthode du troisième corps dans l'espoir de pouvoir traiter de grands mouvements relatifs des lèvres des fissures. Les exemples proposés donnent des résultats prometteurs, bien que préliminaires.

L'implantation proposée manque cependant de robustesse et présente un coût numérique important. Différentes pistes d'améliorations seront détaillées lors la présentation orale.

Remerciements Ces recherches ont été menées dans le cadre du projet CEA MECAN qui est financé par le Commissariat à l'Énergie Atomique et aux Énergies Alternatives (CEA).

Références

1. SIEDEL, D. Une approche numérique robuste pour la description de la rupture fragile et du comportement viscoplastique des crayons de combustible. Thèse. Université Paris sciences et lettres, 2023.
2. JAMOND, O., LELONG, N., BROOKING, G., HELFER, T., PRABEL, B., PRAT, R. et JACCON, A. MANTA: an industrial-strength open-source high performance explicit and implicit multi-physics solver. In : *16ème Colloque National en Calcul de Structures*. Giens, France : CNRS, CSMA, ENS Paris-Saclay, CentraleSupélec, mai 2024.

3. HELFER, T., MICHEL, B., PROIX, J.-M., SALVO, M., SERCOMBE, J. et CASELLA, M. Introducing the open-source mfront code generator: Application to mechanical behaviours and material knowledge management within the PLEIADES fuel element modelling platform. *Computers & Mathematics with Applications*. septembre 2015. Vol. 70, no. 5, p. 994-1023.
4. FOREST, Samuel et LORENTZ, Eric. Localization phenomena and regularization methods. In : BESSON, J. (éd.), *Local approach to fracture*. Les presses de l'école des mines de paris, 2004. p. 311-371. Ecole d'été « Mécanique de l'endommagement et approche locale de la rupture » (MEALOR), juillet 2004.
5. AMBROSIO, L. et TORTORELLI, V. M. Approximation of functional depending on jumps by elliptic functional via t-convergence. *Communications on Pure and Applied Mathematics*. 1990. Vol. 43, no. 8, p. 999-1036.
6. BOURDIN, B., FRANCFORT, G. A. et MARIGO, J.-J. Numerical experiments in revisited brittle fracture. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. avril 2000. Vol. 48, no. 4, p. 797-826.
7. FANDEUR, O., HELFER, T., SIEDEL, D., AMMAR, K. et FOREST, S. Une approche micromorphe de l'endommagement de matériaux quasi-fragiles : implémentation numérique et lien avec la méthode par champ de phase. In : *15ème colloque national en calcul des structures*. 16 mai 2022.
8. NAVA SOTO, P., HELFER, T., SCHERER, J.-M., FANDEUR, O. Fandeur et BESSON, J. Numerical assessment of a micromorphic approach to approximate cohesive damage gradient models: role of the penalisation factor. In : *17ème colloque national en calcul des structures*.
9. PHAM, K. et MARIGO, J.-J. From the Onset of Damage to Rupture: Construction of Responses with Damage Localization for a General Class of Gradient Damage Models. *Continuum Mechanics and Thermodynamics*. 2013. Vol. 25, no. 2-4, p. 147-171.
10. AMOR, H., MARIGO, J.-J. et MAURINI, C. Regularized Formulation of the Variational Brittle Fracture with Unilateral Contact: Numerical Experiments. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. août 2009. Vol. 57, no. 8, p. 1209-1229.
11. MIEHE, C., WELSCHINGER, F. et HOFACKER, M. Thermodynamically Consistent Phase-Field Models of Fracture: Variational Principles and Multi-Field FE Implementations. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*. 2010. Vol. 83, no. 10, p. 1273-1311.
12. DE LORENZIS, L. et MAURINI, C. Nucleation under Multi-Axial Loading in Variational Phase-Field Models of Brittle Fracture. *International Journal of Fracture*. septembre 2022. Vol. 237, no. 1, p. 61-81.
13. ZOLESI, C. et MAURINI, C. Stability and Crack Nucleation in Variational Phase-Field Models of Fracture: Effects of Length-Scales and Stress Multi-Axiality. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. novembre 2024. Vol. 192, p. 105802.
14. VICENTINI, F., ZOLESI, C., CARRARA, P., MAURINI, C. et DE LORENZIS, L. On the Energy Decomposition in Variational Phase-Field Models for Brittle Fracture under Multi-Axial Stress States. *International Journal of Fracture*. septembre 2024. Vol. 247, no. 3, p. 291-317.
15. CHAMBOLLE, A., CONTI, S. et FRANCFORT, G. A. Approximation of a Brittle Fracture Energy with a Constraint of Non-interpenetration. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*. juin 2018. Vol. 228, no. 3, p. 867-889.
16. WRIGGERS, P., SCHRÖDER, J. et SCHWARZ, A. A finite element method for contact using a third medium. *Computational Mechanics*. octobre 2013. Vol. 52, no. 4, p. 837-847.
17. BLUHM, G. L., SIGMUND, O. et POULIOS, K. Internal contact modeling for finite strain topology optimization. *Computational Mechanics*. avril 2021. Vol. 67, no. 4, p. 1099-1114.

18. FALTUS, O., HORÁK, M., DOŠKÁŘ, M. et ROKOŠ, O. Third medium finite element contact formulation for pneumatically actuated systems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. novembre 2024. Vol. 431, p. 117262.
19. FREDERIKSEN, A. H., DALKLINT, A., SIGMUND, O. et POULIOS, K. Improved third medium formulation for 3D topology optimization with contact. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. mars 2025. Vol. 436, p. 117595.
20. WRIGGERS, P., KORELC, J. et JUNKER, Ph. A third medium approach for contact using first and second order finite elements. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. mars 2025. Vol. 436, p. 117740.