

Calcul X-FEM : Impact des erreurs de level sets sur les résultats de la mécanique de la rupture G.

Noé Poyet¹, Pascal Duranton², Eric Feulvarch³

¹ Framatome, Paris La Défense, France, noe.poyet@outlook.fr

² Framatome, Paris La Défense, France, pascal.duranton@framatome.com

³ Univ. Lyon, Ecole Centrale de Lyon, LTDS, UMR 5513 CNRS, Saint-Étienne, France, eric.feulvarch@enise.fr

Résumé — Les calculs X-FEM nécessitent une description de la fissure à l'aide de level sets respectant un ensemble de conditions spécifiques. Dans le cas de fissures complexes, il est souvent impossible de respecter toutes les conditions sur tout le domaine. Les différentes méthodes de définition des level sets aboutissent à des approximations de solutions de level sets distinctes. Ce résumé étendu propose d'étudier l'impact de ces différences d'erreurs des level sets sur les résultats de la mécanique de la rupture, notamment sur le taux de restitution d'énergie G.

Mots clefs — X-FEM, level sets

Introduction

Calculer et simuler les propagations de fissures complexes en 3 dimensions (3D) est une tâche extrêmement complexe à mettre en œuvre en éléments finis classiques (FEM). La méthode FEM classique nécessite de mailler explicitement le défaut pour chaque incrément d'avancée de fissure. Les opérations de remaillages successifs étant très coûteuses en temps humain, de nombreuses méthodes de calculs de propagation de fissures sans remaillage ont été mises au point. Parmi celles-ci, la méthode eXtended Finite Element Method (X-FEM) apparaît désormais comme une des principales méthodes. Une discussion intéressante concernant différentes méthodes de propagation de fissure en dynamique rapide a été menée par Song et al [7].

Les X-FEM introduit par Moës [4] et Belytschko [1] permettent de représenter la fissure sans la mailler explicitement. Un maillage suffisamment raffiné autour du front de fissure est néanmoins nécessaire. Il est alors possible de réaliser un calcul de propagation de fissure sans les fastidieuses opérations de remaillage. La représentation de la fissure est alors implicite et indépendante du maillage, grâce aux level sets [8]. Les level sets permettent de définir et de suivre au cours de la propagation des fissures en 3D à l'aide d'une paire de fonctions de distances signées (level sets). Cette paire de fonctions doit respecter des conditions d'orthogonalité et des propriétés de distances signées. Le non-respect de ces conditions peut mener à des résultats X-FEM et de la mécanique de la rupture incohérents. Il n'existe pas de problématiques pour les fissures simples telles que des fissures circulaires ou planes. Cependant, il apparaît que les conditions citées précédemment sont impossibles à respecter sur l'ensemble du domaine dans le cas de fissures complexes.

Dans ce cas, qu'est-ce qu'une définition « correcte » des level sets ? Quel est l'impact sur les résultats de la mécanique de la rupture ? Les erreurs sont-elles significatives ? Les articles sont souvent centrés sur les méthodes de définitions des level sets, mais évoquent rarement ces sujets. Le présent résumé étendu propose des éléments de réponse avec une analyse de sensibilité des résultats de G vis-à-vis des level sets.

Une première partie présentera rapidement les X-FEM, et comment les enrichissements permettent de s'abstenir du maillage. Dans un second temps, la méthode des level sets sera décrite, pour une meilleure compréhension des phénomènes en jeu. Enfin, une analyse des résultats de G en fonction de plusieurs définitions possibles de level sets sera faite, mettant en lumière des écarts de résultats significatifs en cas de « mauvaise » description des level sets.

Interaction théorique entre level sets et résultats X-FEM

Basés sur le concept de la partition de l'unité, les X-FEM enrichissent l'approximation de déplacements des éléments finis classiques avec des fonctions issues des résultats de la mécanique de la rupture linéaire élastique. Finalement, l'approximation de déplacement en X-FEM est :

$$u^h = \sum_{i \in I} u_i N_i + \sum_{j \in J} b_j N_j H(x) + \sum_{k \in K_f} N_k \left(\sum_{l=1}^4 c_k^l F_l(x) \right) \quad (1)$$

La première somme est l'approximation de déplacements classique des éléments finis (FEM), où u_i sont les degrés de liberté classique, et N_i les fonctions de forme classiques. I est l'ensemble des nœuds du modèle. Le second terme, dit enrichissement Heaviside, représente le plan de la fissure en ajoutant des degrés de liberté associés à la fonction Heaviside modifiée. Le troisième terme ajoute pour chaque nœud 4 degrés de liberté par dimension c_k^l associés à des fonctions asymptotiques $F_l(x)$ qui reproduisent le comportement de la mécanique de la rupture en élasticité linéaire :

$$\{F_l(r, \theta)\} = \left\{ \sqrt{r} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right), \sqrt{r} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right), \sqrt{r} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \sin(\theta), \sqrt{r} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \sin(\theta) \right\} \quad (2)$$

r et θ sont les coordonnées polaires, avec θ l'angle et r la distance au front de fissure. r et θ sont obtenus directement depuis les level sets $\psi(x)$ et $\phi(x)$:

$$r = \sqrt{\psi^2(x) + \phi^2(x)} \quad (3)$$

$$\theta = \arctan\left(\frac{\psi(x)}{\phi(x)}\right) \quad (4)$$

Ici $\psi(x)$ représente le plan de fissure et $\phi(x)$ le front de fissure. Il apparaît alors évident qu'une définition erronée des level sets peut avoir un fort impact sur les résultats X-FEM.

Dans l'équation (1), le set de nœud J comprend au minimum les nœuds appartenant aux éléments entièrement traversés par le front de fissure. Le set de nœud K_f correspondant à l'enrichissement asymptotique inclut au minimum les nœuds appartenant aux éléments entourant le front de fissure. Comme illustré en figure 1, certains logiciels comme Systus permettent [9] de définir une distance d pour laquelle tous les nœuds situés à une distance inférieure à d du front de fissure appartiendront à K_f .

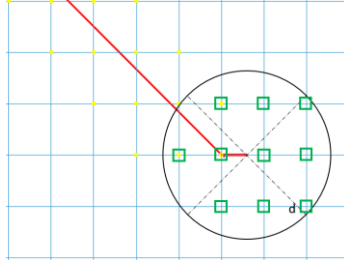


Figure 1 – Une fissure sur un maillage uniforme montrant les ensembles J (en jaune) et K_f (carré vert)

d peut impacter la manière dont les erreurs de level sets vont influencer sur les résultats. En effet, il apparaît ici évident que la « correcte » définition des level sets n'est nécessaire que pour les nœuds appartenant à J et K_f . Ce résumé étendu se propose d'étudier l'impact des erreurs de level sets sur les résultats du taux de restitution d'énergie G qui est une grandeur cruciale et très utilisée dans la plupart des critères de propagation de fissure.

Définitions des level sets

Introduite par Osher et Sethian [5], une fonction level sets associée à une surface Γ est mathématiquement définie par :

$$\phi(x, t) = \text{sign} \left((x - x_p) \cdot n \right) \cdot |x - x_p| \quad (4)$$

$$\Gamma(t) = \{x, \phi(x, t) = 0\} \quad (5)$$

x indique ici les coordonnées euclidiennes du point courant $x=[x,y,z]$ et x_p , le point de Γ le plus proche de x . n est le vecteur unitaire normal à Γ . La fissure est définie en utilisant une paire de level sets $\psi(x)$ et $\phi(x)$:

$$\begin{aligned} \psi(x) = 0 \quad \phi(x) < 0 &\rightarrow \text{fissure} \\ \psi(x) = 0 \quad \phi(x) = 0 &\rightarrow \text{front de fissure} \\ \psi(x) = 0 \quad \phi(x) > 0 &\rightarrow \text{extension virtuelle de la fissure} \end{aligned} \quad (6)$$

Dans le logiciel Systus, Castem [7] et à notre connaissance tous les logiciels utilisant les X-FEM, les valeurs des level sets sont stockées uniquement aux nœuds, puis interpolées sur tout le domaine utilisant les fonctions de forme classiques des éléments finis :

$$\phi_d^h(x) = \sum_{d \in D} N_1(x) \phi_d(x_d) \quad ; \quad d = 1,2,3 \quad (7)$$

Les deux level sets doivent respecter des propriétés de distance signée. Afin de définir correctement r et θ , la condition d'orthogonalité doit aussi être respectée :

$$|\nabla\phi| = 1 \quad (8)$$

$$|\nabla\psi| = 1 \quad (9)$$

$$\nabla\psi(x) \cdot \nabla\phi(x) = 0 \quad (10)$$

Ces conditions facilement atteignables pour des fissures simples sont contradictoires pour des fissures complexes. Il sera alors impossible de vérifier ces trois conditions simultanément sur l'ensemble du domaine. De nombreuses méthodes ont été développées pour définir et faire évoluer les level sets.

Certaines méthodes feront le choix d'optimiser l'orthogonalité au détriment des propriétés de distances signées, ou inversement. Voici un exemple d'une fissure avec un angle de 45° pour laquelle il est impossible de respecter les 3 conditions simultanément :

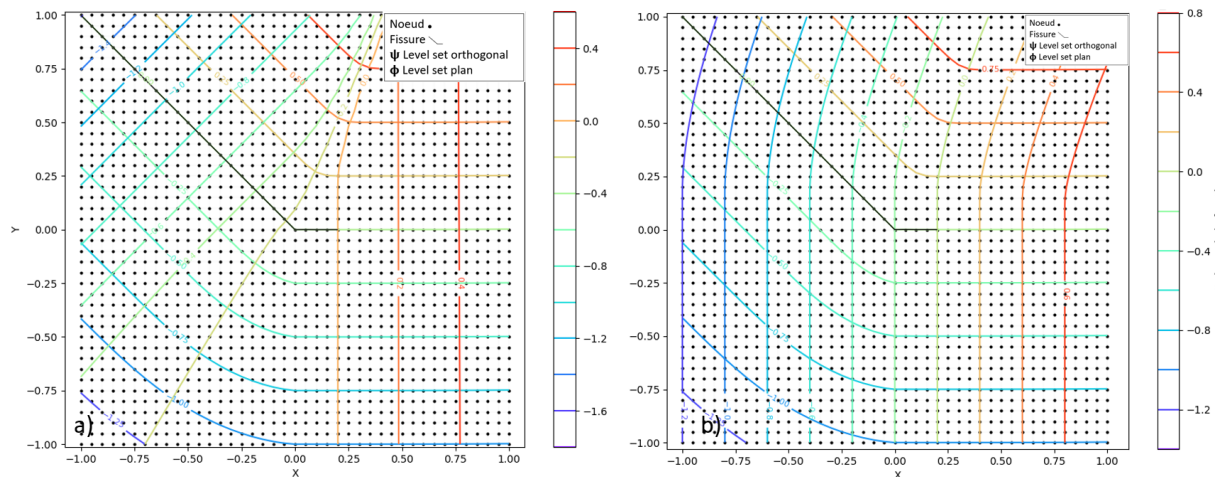


Figure 2 – iso valeurs des level sets $\psi(\mathbf{x})$ et $\phi(\mathbf{x})$ pour une fissure inclinée à 45° pour deux méthodes de définition différentes

La figure 2 montre des définitions de level sets obtenues avec deux méthodes différentes :

- Figure 2a : méthode minimisant l'erreur d'orthogonalité et de norme de gradient de ψ , au détriment de ϕ .
- Figure 2b : méthode minimisant l'erreur de norme de gradient de ψ et ϕ , au détriment de l'orthogonalité.

Seuls deux exemples de définitions de level sets sont indiqués ici mais il y a en réalité autant de définitions de level sets possibles que de méthodes. Chaque méthode va optimiser certaines erreurs ou des couplages d'erreurs. Les études de sensibilité sur ces paramètres sont quasi inexistantes dans la littérature, quand bien même leur impact peut être non négligeable. La partie suivante présentera une étude de l'impact de ces différentes configurations sur les résultats de taux de restitution d'énergie.

Interaction entre level sets et résultats X-FEM

Différents cas tests vont être étudiés. Le premier cas test reprend en 3D un cas test très utilisé notamment dans [6] et [3] en 2D. Lors des précédents travaux, l'attention s'est principalement portée sur les méthodes de propagation des level sets mais moins aux résultats de G et à l'impact de ces level sets sur le G.

Nos choix de modélisation sont les suivants : pavé de dimension $2 \times 2 \times 1$ mm, modélisé par un pavé de $2 \times 2 \times 0.5$ mm utilisant la symétrie suivant l'axe \vec{z} . La fissure initialement plane, venant du coin supérieur gauche du pavé se termine au centre du pavé. Une propagation de fissure $da=0.1$ mm avec un angle $\alpha=45^\circ$ est appliquée et sont représentées figure 3. Un comportement élastique est considéré, avec un module de Young $E=72.5$ GPa, et un coefficient de poisson $\nu=0.3$. Les conditions de Dirichlet suivantes sont imposées :

- Un déplacement de 0.1 mm suivant \vec{y} est imposé aux nœuds de la face supérieure.
- Les nœuds de la face inférieure sont encastés.
- Un déplacement nul dans la direction \vec{z} est imposé à tous les nœuds d'une face latérale pour la symétrie.

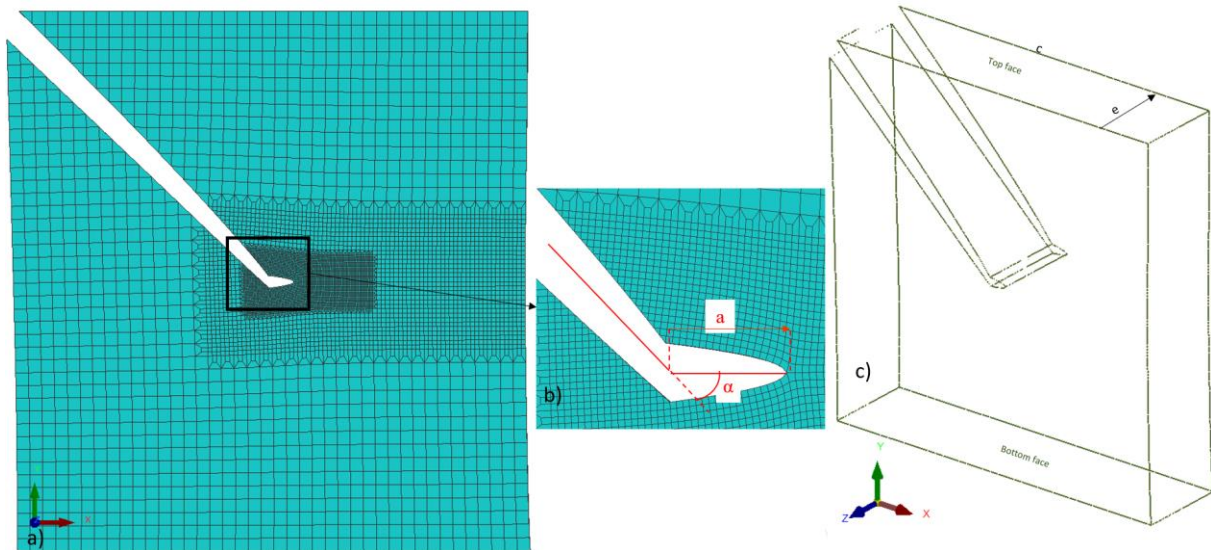


Figure 3 – a) Maillage, b) Zoom sur le maillage, c) Schéma de la géométrie

Une première incidence des erreurs de level sets sur les erreurs X-FEM intervient avec les nœuds enrichis par la fonction Heaviside. Les level sets sont souvent obtenus sur une grille auxiliaire, plus raffinée que le maillage, puis projetés sur le maillage. Les valeurs des level sets étant uniquement stockées aux nœuds du maillage puis interpolées par les fonctions de formes, une erreur de distanciation trop importante sur les nœuds enrichis en Heaviside pourra artificiellement modifier l'iso-zéro des level sets, et ainsi modifier la géométrie de la fissure modélisée. Cette erreur est également possible même si l'iso zéro passe par les nœuds du maillage. Les nœuds autour de l'iso zéro peuvent modifier l'iso zéro via l'interpolation.

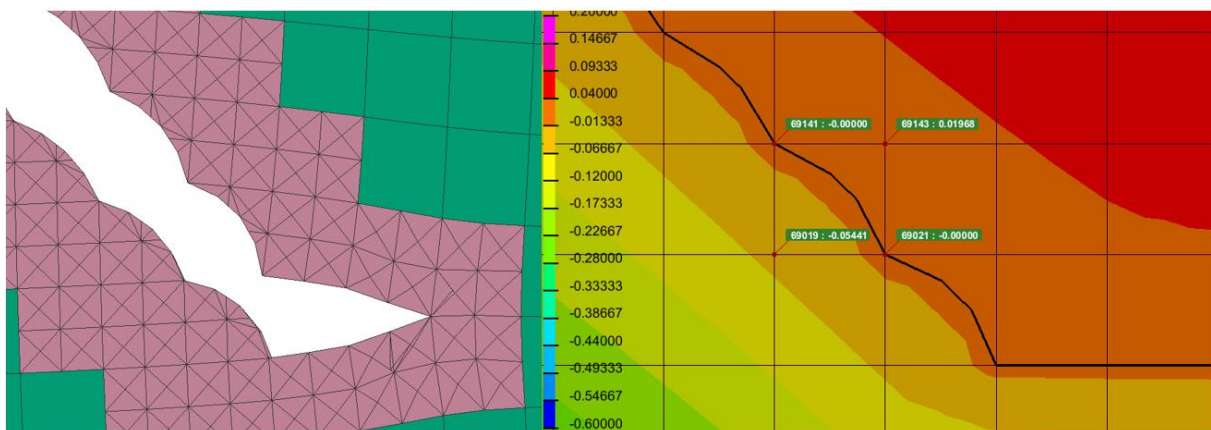


Figure 4 – iso zéro de la fissure modifiée à cause d'une erreur de distanciation sur les nœuds J

Dans le cas figure 4, la fissure passe par des nœuds qui ont $\psi = 0$. Les nœuds 69019 et 69143 autour de l'iso zéros sont censés être à la même distance de la fissure, donc doivent avoir la même valeur absolue de ψ . Une erreur de distanciation $|\nabla\psi| \neq 1$ fait que ces nœuds n'ont pas les mêmes valeurs absolues de distanciation : -0.05441 et 0.01968. L'iso zéro de la fissure obtenue par interpolation est ainsi modifiée. Pour éviter cette modification de l'iso zéro une règle simple de vérification peut être mise en place : $|\nabla\psi| = 1$ doit être strictement respectée pour les nœuds enrichis en Heaviside. La condition doit être respectée non pas sur la grille auxiliaire mais sur le maillage final. Cette erreur est moins

problématique car facilement vérifiable. Sur l'exemple, l'erreur de norme de distance est volontairement élevée, avec un maillage grossier qui amplifie le phénomène.

Une autre étude va désormais montrer les écarts de résultats entre différentes configurations de level sets. Cette fois-ci toutes les configurations sont des configurations tout à fait plausibles. Les différentes configurations ont été obtenues utilisant un algorithme de type Hamilton Jacobi. L'algorithme Hamilton Jacobi utilisé est conçu avec un schéma upwind de Godunov, un Runge Kutta d'ordre 2, et une fonction signe de Peng. Le problème résolu est ainsi la mise à jour des fonctions de niveaux. Plus d'informations sur cette méthode de résolution sont disponibles [6]. Les erreurs d'orthogonalité et de norme de gradient décrite ci-dessous sont obtenues avec une approximation de gradient utilisant un schéma de Godunov (les résultats peuvent légèrement varier avec d'autres schémas). La méthode Hamilton Jacobi peut mener à des instabilités, mais a été choisie car elle a la particularité de faire passer les level sets dans plusieurs configurations différentes lorsque la fissure ne permet pas le respect de toutes les conditions. Il est ainsi possible d'obtenir et de tester plusieurs configurations de level sets plausibles qui pourraient être obtenus par différentes méthodes. Différentes configurations ont été testées, faisant varier uniquement ϕ et non ψ :

- Phase 1- au début $|\nabla\phi| = 1$, $|\nabla\psi| = 1$ au détriment de $\nabla\psi(x) \cdot \nabla\phi(x) = 0$.
- Phase 2- orthogonalisation : Puis au fur à mesure on optimise $|\nabla\psi| = 1$ et $\nabla\psi(x) \cdot \nabla\phi(x) = 0$ au détriment de $|\nabla\phi| = 1$
- Phase 3- distanciation : Au fur à mesure on optimise $|\nabla\psi| = 1$, $|\nabla\phi| = 1$, la condition d'orthogonalité $\nabla\psi(x) \cdot \nabla\phi(x) = 0$ est conservé uniquement au point du front de fissure. Les nœuds autour ont ensuite une erreur d'orthogonalité non négligeable. Cet état est visible sur la figure 2.b

Voici les résultats de G dans l'épaisseur pour plusieurs configurations lors des phases 1 et 2, qui permettent d'observer les écarts de résultats de G en fonction de différentes configurations :

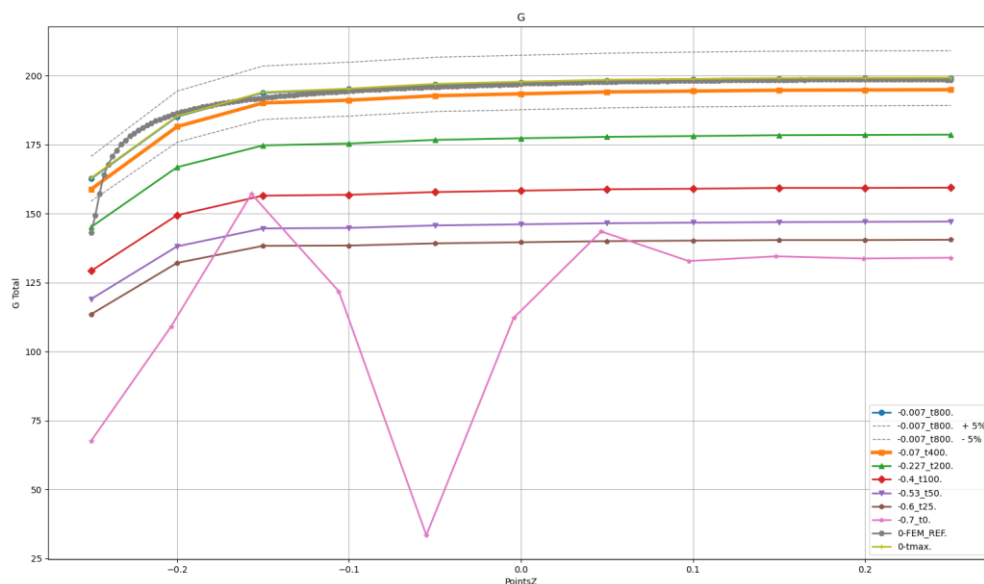


Figure 5 – résultats de G en fonction des erreurs d'orthogonalité des level sets.

Comme visible figure 5, des écarts de résultats conséquents sont observés. Les erreurs d'orthogonalité sont indiquées en légende. Les résultats du taux de restitutions d'énergie G sont obtenus avec la méthode G thêta [2] et les erreurs d'orthogonalité sont obtenues utilisant (10). Les résultats X-FEM les plus proches des résultats FEM (courbe grise), sont obtenus avec des erreurs d'orthogonalité inférieures, même si l'erreur de norme de gradient $|\nabla\phi| = 1$ est supérieure pour les configurations ayant une erreur

d'orthogonalité plus faible. Ainsi, les résultats configuration de la figure 2a sont nettement plus précis que ceux de la configuration de la figure 2b. Pour plus de clarté, le graphique est modifié pour afficher en x et y les erreurs d'orthogonalité et de norme de gradient. En z, est affiché l'écart en pourcentage des résultats de G au plan de symétrie de la configuration ($z=0.25$) par rapport au calcul FEM :

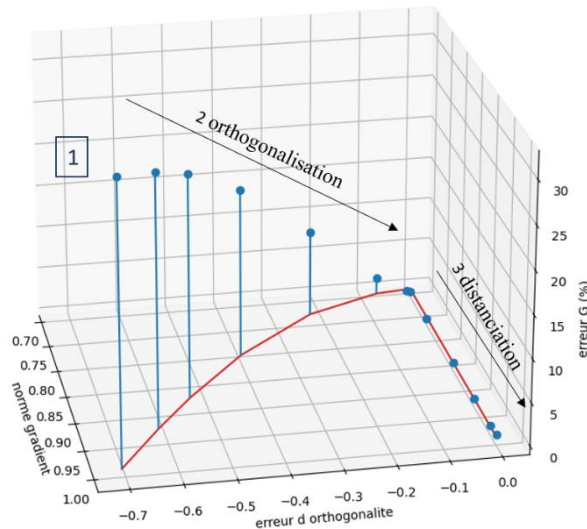


Figure 6 – Ecart de résultats G en fonctions de plusieurs configurations de level sets

Le graphique figure 6 représente 13 calculs X-FEM obtenus avec 13 configurations de level sets différentes. La norme de gradient $|\nabla\phi|$ et l'erreur d'orthogonalité sont ceux des nœuds enrichis asymptotiquement par lequel le front passe (le front de fissure est sur un nœud), mais pas l'ensemble K_f . On voit ainsi que l'erreur nulle est atteinte à la fin de la distanciation, cependant l'erreur d'orthogonalité est non nulle pour d'autres points enrichis asymptotiquement K_f , ce qui peut aussi avoir un impact sur les résultats. Il est observable que :

- La phase 1, optimisant $|\nabla\phi| = 1$ et $|\nabla\psi| = 1$ au détriment de l'orthogonalité engendre des écarts de résultats très importants.
- Les configurations de la phase 2 modifient ϕ afin d'améliorer l'orthogonalité au dépend de la propriété $|\nabla\phi| = 1$: plus l'orthogonalité est respectée, plus les résultats sont précis.
- Les configurations de la phase 3 ne semblent pas modifier les résultats de manière significative.

Les résultats X-FEM sont obtenus avec une taille de maille de $0.025 \times 0.025 \times 0.025$ mm. Une analyse de convergence a montré des résultats similaires avec une taille de maille deux fois supérieure.

Voici un zoom sur les points lors de la phase 3 de distanciation, pour observer les différences minimales de résultats lors de cette phase :

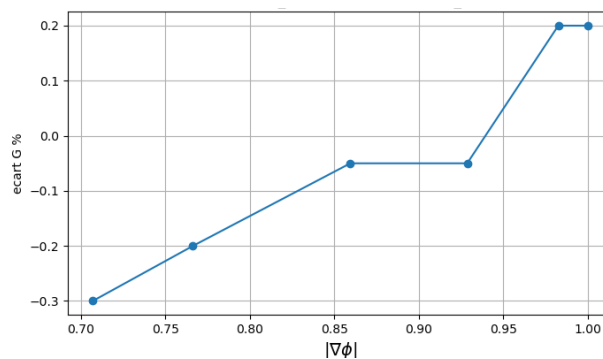


Figure 7 – Zoom (de la figure 6) sur les résultats de la phase 3.

Une erreur d'orthogonalité sur le front de fissure peut induire des erreurs de résultats significatives. Les résultats de G erronés peuvent sembler cohérents mais ont tendance à être inférieurs à ceux attendus. Une erreur de distanciation assez importante sur le level set du front de fissure ne semble pas modifier significativement les résultats sur le cas test. Il apparaît que plusieurs configurations de level sets permettent d'obtenir des résultats de G acceptables, mais que certaines configurations doivent vraiment être évitées.

Conclusion

Les résultats de cette étude montrent que la définition des level sets est une phase cruciale pour des résultats X-FEM cohérents. Lors de la mise en place d'une méthode d'actualisation des level sets, il est important de vérifier l'impact de cette méthode et de ses configurations de level sets sur les résultats de G . Les nœuds enrichis en Heaviside doivent avoir une distanciation de ϕ homogène, tandis que les nœuds enrichis en asymptotique doivent avoir une orthogonalité parfaite, quitte à avoir une distanciation de ϕ moins respectée. Dans ce cas test, la phase finale de la méthode Hamilton Jacobi permet d'obtenir des level sets ayant des erreurs de level sets non nulles, mais n'ayant pas d'impact sur les résultats de G . Cette vérification n'a pour le moment pas été faite pour d'autres méthodes d'actualisation de level sets de la littérature. L'impact de la sélection des nœuds enrichis n'a pas été étudié.

Références

1. Belytschko T, Black T (1999) Elastic crack growth in finite elements with minimal remeshing. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 45:601–620. doi: [https://doi.org/10.1002/\(SICI\)1097-0207\(19990620\)45:5<601::AID-NME598>3.0.CO;2-S](https://doi.org/10.1002/(SICI)1097-0207(19990620)45:5<601::AID-NME598>3.0.CO;2-S)
2. Destuynder P, Djaoua M, Lescure S, Electricite de France 92 - Clamart (1981) Some remarks on elastic fracture mechanics
3. Dufloy M (2007) A study of the representation of cracks with level sets. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 70:1261–1302. doi: <https://doi.org/10.1002/nme.1915>
4. Moës N, Dolbow J, Belytschko T (1999) A finite element method for crack growth without remeshing. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 46:131–150. doi: [https://doi.org/10.1002/\(SICI\)1097-0207\(19990910\)46:1<131::AID-NME726>3.0.CO;2-J](https://doi.org/10.1002/(SICI)1097-0207(19990910)46:1<131::AID-NME726>3.0.CO;2-J)
5. Osher S, Sethian JA (1988) Fronts propagating with curvature-dependent speed: Algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations. *Journal of Computational Physics* 79:12–49. doi: [https://doi.org/10.1016/0021-9991\(88\)90002-2](https://doi.org/10.1016/0021-9991(88)90002-2)
6. Prabel B (2007) Modélisation avec la méthode X-FEM de la propagation dynamique et de l'arrêt de fissure de clivage dans un acier de cuve REP. PhD Thesis
7. Song J-H, Wang H, Belytschko T (2008) A comparative study on finite element methods for dynamic fracture. *Computational Mechanics* 42:239–250. doi: [10.1007/s00466-007-0210-x](https://doi.org/10.1007/s00466-007-0210-x)
8. Stolarska M, Chopp DL, Moës N, Belytschko T (2001) Modelling crack growth by level sets in the extended finite element method. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 51:943–960. doi: <https://doi.org/10.1002/nme.201>
9. Systus® (2019) V21.0 “Structural calculation software by Finite Elements”.