

Adaptation variationnelle de maillages pour la simulation nette de la fracture fragile

Gatien Dony¹, Nicolas Moës¹, Jean-François Remacle¹

¹ *IMMC (Institut de la Mécanique, des Matériaux et de la Construction), UCLouvain, Louvain-La-Neuve*
gatien.dony@uclouvain.be, nicolas.moës@uclouvain.be, jean-françois.remacle@uclouvain.be

Résumé —

La formulation variationnelle de la mécanique de la rupture a connu un essor important au cours des dernières années grâce à son implication dans les modèles de représentation diffuse de la fracture. La capacité de ces modèles à s'affranchir de la dépendance au maillage s'obtient au prix d'une incapacité à capturer certains comportements physiques. Nous proposons une méthode reposant sur la formulation variationnelle du problème, ne nécessitant aucun champs d'endommagement en capturant de manière nette la propagation de fissures dans les matériaux fragiles.

Mots clés — fracture, r -adaptation

1 Introduction

Concernant la simulation numérique de problèmes mécaniques reposant sur un formalisme variationnel, il a rapidement été envisagé de recourir à l'adaptation variationnelle de maillages. Cette approche consiste à considérer la géométrie discrète comme une variable du problème. Ainsi, ce dernier est modifié afin d'atteindre la stationarité de la fonctionnelle décrivant le système [1, 2, 3, 4]. Sur le papier, ce schéma permet de construire un maillage optimal (du moins en terme de norme énergétique) et cela, sans recourir à un estimateur d'erreur.

Jusqu'à présent, ce type d'approche a été, à notre connaissance, perçu uniquement sous l'angle d'une adaptation de maillage visant à réduire l'erreur de discrétisation pour différents problèmes mécaniques (par exemple, l'hyperélastostatique, [4, 5, 6, 7, 8]). Nous proposons ici d'observer les liens entre l'adaptation variationnelle et la mécanique configurationnelle dans le cadre de la fracture fragile. Premièrement, nous observons l'impact de l'adaptation de maillage sur le calcul des forces configurationnelles dictant la propagation de la fissure. Ensuite, nous proposons d'utiliser ces dernières pour guider la modification de la géométrie discrète décrivant la fissure. Rappelons que la mécanique de la rupture peut être formulée comme un problème variationnel [9]. C'est en utilisant la fonctionnelle en découlant dans un cadre d'adaptation variationnelle de maillage qu'émerge notre méthodologie.

Le formalisme variationnel de la fracture présente les avantages théoriques de gérer l'initiation et les discontinuités de la fissure. Aussi, il pose peu d'hypothèse sur la géométrie de la fissure. Ce paradigme a surtout été popularisé par les modèles à champ diffus [10, 11]. La méthode présentée ici propose de l'employer dans un cadre de représentation nette.

2 Formulation du problème

Le corps que nous considérons occupe initialement un domaine Ω dans sa configuration matérielle décrite par les coordonnées \underline{X} . Il est soumis à un déplacement \underline{u} et une traction \underline{T} sur ses frontières Γ_D et Γ_N respectivement. Par conséquent, il se déforme pour occuper la configuration spatiale décrite par les coordonnées \underline{x} . La transformation de la configuration matérielle à la configuration spatiale est donnée par le champ de déplacement spatial $\underline{u} = \underline{x} - \underline{X}$.

Une pré-fissure est représentée par un sous-ensemble fermé de Ω de dimension inférieure, noté C_0 . Sous l'hypothèse quasi-statique, seul le chargement et la fissure impliquent une dépendance en temps. Le long de la fissure, la surface du corps est libre. La formulation variationnelle de la fracture mène au

problème suivant pour chaque instant t .

$$\forall t > 0, \quad \{\underline{u}(\cdot, t), C(t)\} = \arg \min_{\mathcal{V}(t)} \mathcal{E}(\underline{v}, t) + \mathcal{D}(\hat{C})$$

$$\text{avec } \mathcal{V}(t) = \{\underline{u}, C | \underline{u} \in H^1(\Omega \setminus C; \mathbb{R}^d), C \in \mathcal{H}^{d-1} \\ \text{tel que } \underline{u}|_{\Gamma_D} = \bar{\underline{u}}(t), \forall s \leq t : C(s) \subseteq C(t)\}$$

Un espace conjoint des déplacements admissibles et des fissures $\mathcal{V}(t)$ est défini comme l'ensemble des champs de déplacement dépendant de la fissure courante. Dans le cas de l'élasticité linéaire, la fonctionnelle s'écrit de la manière suivante.

$$\mathcal{E}(\underline{u}, t) = \int_{\Omega} \frac{1}{2} \sigma_{ij} \varepsilon_{ij} d\Omega - \int_{\Gamma_N} \bar{t}_i(t) u_i d\Gamma \quad \text{et} \quad \mathcal{D}(C) = \int_C G_c dC$$

2.1 Equilibres spatial et matériel

Pour écrire la stationarité de la fonctionnelle, nous exprimons les variations par rapport aux deux configurations.

$$\delta_{\underline{x}} \mathcal{E}(\underline{u}, t; \underline{v}) = \int_{\Omega} \sigma_{ij} v_{i,j} d\Omega - \int_{\Gamma_N} \bar{t}_i(t) v_i d\Gamma \\ \delta_{\underline{x}} \mathcal{E}(\underline{u}, t; \underline{p}) = \int_{\Omega} \underbrace{\left(\frac{1}{2} \sigma_{kl} \varepsilon_{kl} \delta_{ij} - \sigma_{ik} u_{k,j} \right)}_{S_{ij}} p_{j,i} d\Omega - \int_{\Gamma_N} \bar{t}_k u_k p_{j,i} \gamma_i \gamma_j d\Gamma \\ \delta_{\underline{x}} \mathcal{D}(C; \underline{p}) = \int_C G_c p_{j,i} c_i c_j dC$$

Les vecteurs \underline{c} et $\underline{\gamma}$ représentent les vecteurs tangents à C et Γ_N respectivement. Les perturbations sont admises dans les espaces suivants.

$$\underline{v} \in \mathcal{U} = \{ \underline{v} | \underline{v} \in H^1(\Omega \setminus C; \mathbb{R}^d), \underline{v} \cdot \underline{n}|_{\Gamma_D} = 0 \} \\ \underline{p} \in \mathcal{P} = \{ \underline{p} | \underline{p} \in H^1(\Omega; \mathbb{R}^d), \underline{p} \cdot \underline{n}|_{\partial\Omega \cup \text{int}(C)} = 0 \}$$

Dans le cas continu, l'équilibre configurationnel mène à l'équilibre spatial et à la condition de Griffith. Autrement dit, en supposant *a priori* que la fissure ne se propage pas, les équilibres matériel et spatial sont équivalents. Cela ne se vérifiera plus dans le cas discret.

2.2 Equilibres discrets

Les deux types d'équilibres n'étant plus équivalents dans le cas discret, l'adaptation de maillage permet de restaurer l'équilibre matériel. Une fois la géométrie représentée sous forme de maillage, nous pouvons décrire les perturbations spatiales et matérielles à l'aide des fonctions de base associées $\{\phi_a\}_{a=1}^N$. Les variations sur la configuration spatiale conduisent à la formulation usuelle du problème d'élasticité linéaire discrétisé. Pour les perturbations sur la configuration matérielle, nous obtenons les gradients de l'énergie potentielle élastique par rapport aux positions des nœuds ainsi que le taux de libération d'énergie de la fissure. En écrivant le champs de déplacement $\underline{u}^h = \sum_{a=1}^N \underline{U}^a \phi_a$ et les positions des nœuds \underline{X}^a .

$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial U_i^a} = \delta_{\underline{x}} \mathcal{E}(\underline{u}, t; \phi_a \underline{e}_i) = \int_{\Omega} \sigma_{ij} \phi_{j,i}^a d\Omega - \int_{\Gamma_N} \bar{t}_i \phi_i^a d\Gamma \\ \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial X_i^a} = \delta_{\underline{x}} \mathcal{E}(\underline{u}, t; \phi_a \underline{e}_i) = \int_{\Omega} \frac{1}{2} \sigma_{kl} \varepsilon_{kl} \phi_{i,i}^a - \sigma_{kl} u_{l,i} \phi_{k,k}^a d\Omega - \int_{\Gamma_N} \bar{t}_k u_k \phi_{j,i}^a \gamma_i \gamma_j d\Gamma \\ \frac{\partial \mathcal{D}}{\partial X_i^a} = \delta_{\underline{x}} \mathcal{D}(C; \phi_a \underline{e}_i) = G_c c_i$$

2.3 Intégrale J discrète

Dans le cas analytique, et pour une fissure rectiligne, le taux de libération d'énergie $G(\theta)$ peut être récupéré via l'intégrale J . Dû à l'équivalence entre les équilibres matériel et spatial, celle-ci est invariante et égale à G pour tout contour englobant la pointe. Cependant, pour la version discrète du problème, cette invariance n'est plus assurée. En effet, celle-ci peut être polluée par la présence de forces configurationnelles résiduelles à l'intérieur du contour.

$$J(\underline{u}^h; \Upsilon) = \int_{\Upsilon} \left(\sigma_{ij} u_{i,j}^h \delta_{1j} - \sigma_{ij} u_{i,1}^h \right) d\Upsilon = \sum_{a \in \bar{\Upsilon}} - \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial X_1^a} \quad (1)$$

Lorsque l'équilibre configurationnel est atteint, les contributions résiduelles sont nulles et l'intégrale J discrète redevient invariante. Ainsi, le taux de libération d'énergie peut être évalué directement à partir des forces configurationnelles nodales situées sur la fissure.

3 Méthode

Le maillage est décrit par les positions des nœuds \underline{X}^a et la topologie \underline{T} du maillage. L'objectif de notre méthode est d'ajuster ces deux variables en plus des variables physiques (le champs de déplacement \underline{u}^h et la fissure C) afin de minimiser la fonctionnelle variationnelle décrite à l'équation 2. Afin de préserver une qualité minimale du maillage et contrôler la discrétisation du profil de la fissure, des pénalités sont ajoutées à la fonction objectif. Ainsi, le problème d'optimisation s'écrit de la manière suivante.

$$\min_{\underline{U}, \underline{X}, \underline{T}, C} \mathcal{E}(\underline{U}, \underline{X}, \underline{T}, t) + \mathcal{D}(C) + B(\underline{X}, \underline{T}) \quad (2)$$

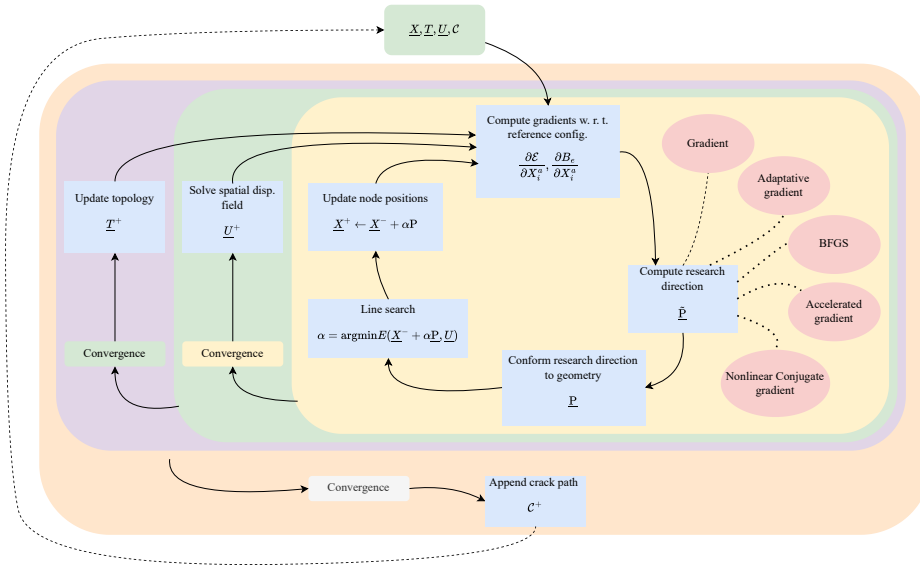


FIGURE 1 – Schéma de la procédure globale d'optimisation

L'idée principale de la méthode repose sur une minimisation étagée de la fonctionnelle. À tour de rôle, les positions matérielles des nœuds, les positions spatiales et la topologie sont optimisées afin d'obtenir le champs de déformation et le profil de la fissure.

Positions matérielles des nœuds Nous utilisons des schémas d'optimisation du premier ordre. Suivant le type de méthode choisi, une direction de recherche est calculée (par exemple, le gradient de la fonctionnelle dans le cas le plus simple). Cette dernière est adaptée sur les frontières du domaine afin de ne pas en modifier la forme globale. Ensuite, le pas optimal est obtenu via une méthode de bisection. Les pas des descente sont effectués jusqu'à convergence.

Propagation de la fissure Pour construire une extension de la fissure, nous effectuons un dédoublement du nœud en tête de fissure. L'arête dont l'alignement est le plus proche de la direction de G est sélectionnée pour être ouverte. Ensuite, la nouvelle pointe de fissure est libre de bouger dans un cercle de rayon fixe afin de ne pas modifier la longueur totale de la fissure.

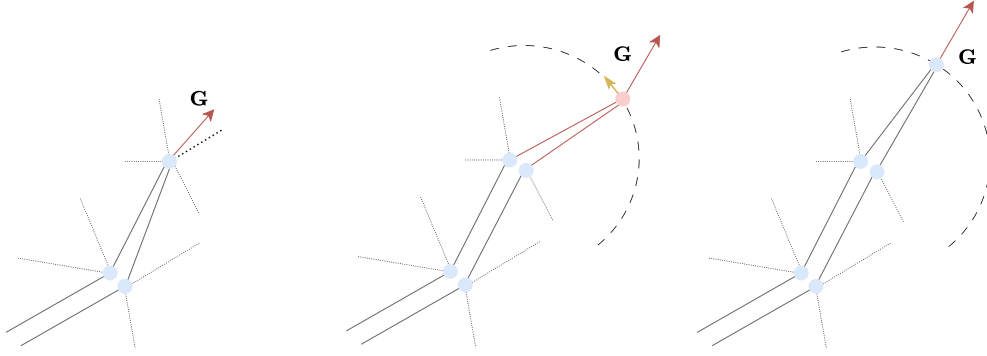


FIGURE 2 – Ouverture et ajustement de l'incrément de fissure

Positions spatiales Le calcul des positions nodales dans la configuration déformée ou spatiale est similaire à une résolution usuelle du problème mécanique. En effet, pour des positions matérielles et une topologie fixées, la fonctionnelle est stationnaire lorsque le champs de déformation satisfait les équations d'équilibre.

Topologie L'optimisation de la topologie du maillage mène à un problème discret. Celui-ci est résolu via des pivots d'arêtes. Chaque arête du maillage est inspectée et si elle peut géométriquement être pivotée, la variation finie de la fonctionnelle entraînée par son pivot est calculé. Si elle est suffisamment négative, le pivot est effectué. Bien que cette boucle d'optimisation ne peut garantir que des minima locaux, il est assuré qu'elle termine.

Contraintes sur le maillage Nous ajoutons deux fonctions de pénalités afin de contrôler l'aspect du maillage. La première pénalise la distortion des éléments afin d'éviter de potentiels retournements durant le processus d'optimisation. La distortion d'un élément e est mesurée par la norme de la déformation isochore. Nous cherchons à maintenir cette valeur proche d'une référence Δ_{ref} .

$$B_1(\underline{X}, \mathbf{T}) = \lambda_1 \sum_{e=1}^{N_{el}} \left(\frac{\Delta_e}{\Delta_{\text{ref}}} - 1 \right)^2 \quad \text{avec} \quad \Delta_e = \frac{\underline{F}_e : \underline{F}_e}{J_e} \quad (3)$$

Le tenseur \underline{F}_e correspond à la jacobienne de la transformation d'un triangle équilatéral vers le triangle actuel. Son déterminant est noté J_e . La seconde fonction a pour objectif de contrôler le niveau de discrétisation de la fissure. Etant donné que celle-ci est créée par une succession d'ouvertures d'arêtes adjacentes à la pointe, nous pénalisons les écarts de longueurs entre ces arêtes et une taille de référence l_{ref} .

$$B_2(\underline{X}, \mathbf{T}) = \lambda_2 \sum_{a \in \tilde{\Upsilon}_1} \left(\frac{l_a}{l_{\text{ref}}} - 1 \right)^2 \quad \text{avec} \quad l_a = \|\underline{X}^a - \underline{X}^{\text{tip}}\| \quad (4)$$

4 Résultats

Nous présentons ici quelques résultats préliminaires obtenus avec la méthode proposée. Sur la figure 3, le maillage est adapté sans propagation de la fissure. On observe une forte modification du maillage autour de la pointe de fissure. L'adaptation est obtenue après 10 itérations d'optimisation de la topologie (cf. figure 1), ce qui implique 100 résolutions du problème mécanique et, en tout, 10 000 pas de méthode des gradients conjugués non-linéaire (Polak-Ribière).

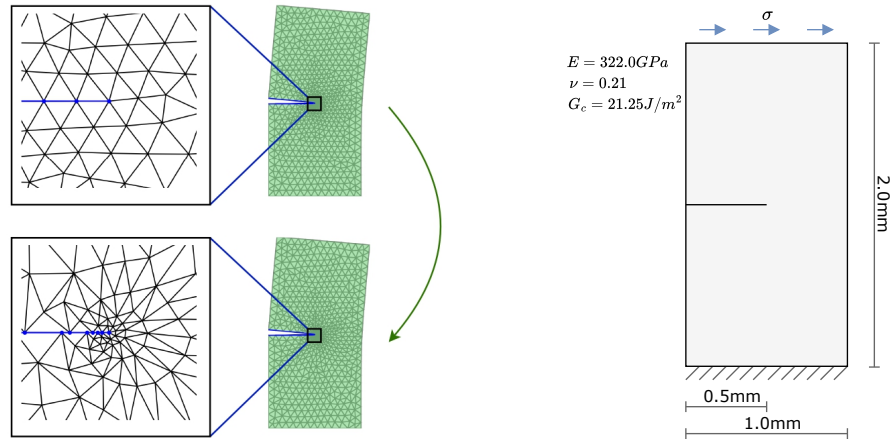


FIGURE 3 – Adaptation variationnelle du maillage autour de la pointe de fissure

Comme expliqué plus haut, l'équilibre configurationnel permet de restaurer l'invariance de l'intégrale J numérique. La figure 4 illustre l'évolution de celle-ci au cours de la procédure d'optimisation. Avant optimisation, J varie significativement en fonction du contour choisi. Après optimisation, cette variation est clairement atténuée. De plus, la valeur de J se rapproche significativement de la valeur théorique de G .

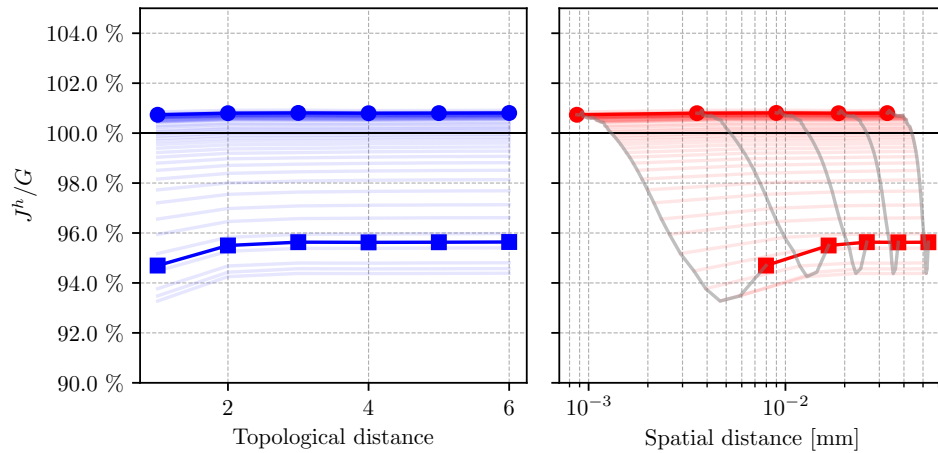


FIGURE 4 – Invariance de l'intégrale J discrète avant et après optimisation

Sur un second cas présenté sur la figure 5, nous laissons la fissure de propager. Le maillage s'adapte naturellement pour laisser apparaître une nouvelle géométrie de fissure. Nous validons notre méthode de propagation en comparant les angles de bifurcation pris par la fissure lors d'une sollicitation en mode mixte avec plusieurs modèles théoriques et expérimentaux simples. Les résultats sont montrés sur la figure 6. Nous observons une bonne correspondance.

5 Perspectives

La méthode présentée a l'avantage de reposer sur le cadre très générique du formalisme variationnel. Ainsi, elle peut être adaptée à d'autres types de problèmes mécaniques (plasticité, dynamique, etc.) en adaptant la fonctionnelle. Aussi, nous avons la possibilité d'adapter la fonctionnelle et le formalisme afin de capturer les grandes déformations. De la même manière, rien ne s'oppose à une potentielle extension

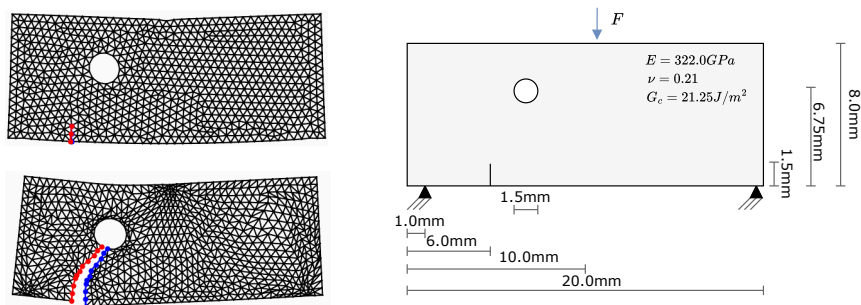


FIGURE 5 – Adaptation variationnelle du maillage autour de la pointe de fissure

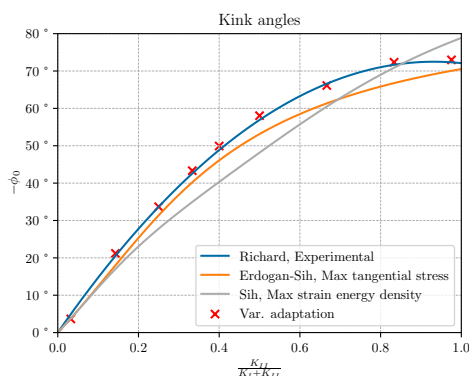


FIGURE 6 – Angle de bifurcation de la fissure en fonction du ratio K_{II}/K_I

en trois dimensions. Concernant la mécanique de la rupture en tant que telle, nous envisageons de simuler les phénomènes de nucléation, coalescence et saut de fissures, ces comportements étant naturellement gérés par le formalisme variationnel.

En plus de ces perspectives liées aux physiques simulées, il y a encore lieu de poursuivre le développement numérique de la méthode. En effet, l'optimisation des positions des nœuds pourrait être améliorée en employant des schémas de second ordre. Aussi, il est judicieux de s'intéresser à de potentiels raffinements ou déraffinements du maillage lors de l'optimisation de sa connectivité. La minimisation étagée de la fonctionnelle semble aussi être un point perfectible. Garder des valeurs nodales de déplacement fixes lors du mouvement de nœuds semble restreindre et ralentir celui-ci. Une tentative d'approche conjointe pourrait réduire le nombre d'itérations nécessaires à la convergence.

Références

- [1] G. M. McNeice and P. V. Marcal. Optimization of Finite Element Grids Based on Minimum Potential Energy. *Journal of Engineering for Industry*, 95(1) :186–190, February 1973.
- [2] Carlos A. Felippa. Optimization of finite element grids by direct energy search. *Applied Mathematical Modelling*, 1(2) :93–96, September 1976.
- [3] Carlos A. Felippa. Numerical experiments in finite element grid optimization by direct energy search. *Applied Mathematical Modelling*, 1(5) :239–244, June 1977.
- [4] P. Thoutireddy and M. Ortiz. A variational r -adaption and shape-optimization method for finite-deformation elasticity. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 61(1) :1–21, September 2004.
- [5] Michael Scherer, Ralf Denzer, and Paul Steinmann. Energy-based r -adaptivity : a solution strategy and applications to fracture mechanics. *International Journal of Fracture*, 147(1-4) :117–132, September 2007.
- [6] Michael Scherer, Ralf Denzer, and Paul Steinmann. On a solution strategy for energy-based mesh optimization in finite hyperelastostatics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 197(6-8) :609–622, January 2008.

- [7] Daniel Materna and Franz-Joseph Barthold. Goal-oriented r-adaptivity based on variational arguments in the physical and material spaces. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 198(41-44) :3335–3351, September 2009.
- [8] Stefan Riehl and Paul Steinmann. An integrated approach to shape optimization and mesh adaptivity based on material residual forces. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 278 :640–663, August 2014.
- [9] G.A. Francfort and J.-J. Marigo. Revisiting brittle fracture as an energy minimization problem. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 46(8) :1319–1342, August 1998.
- [10] B. Bourdin, G.A. Francfort, and J.-J. Marigo. Numerical experiments in revisited brittle fracture. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 48(4) :797–826, April 2000.
- [11] C. Miehe, F. Welschinger, and M. Hofacker. Thermodynamically consistent phase-field models of fracture : Variational principles and multi-field FE implementations. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 83(10) :1273–1311, September 2010.