

Simulation par champ de phase de la rupture transverse d'un CMC à l'échelle microscopique

J. Rannou¹, C. Przybyla², C. Bovet¹

¹ ONERA-MAS, Université Paris Saclay, France

² Air Force Research Laboratory, Wright Patterson Air Force Base, OH, USA

Résumé — Ce travail porte sur la modélisation à l'échelle microscopique de la rupture transverse de composites à matrice céramique (CMC). On cherche en particulier à mettre en évidence par la simulation l'influence de la répartition des fibres sur la dissipation d'énergie lors du processus de fissuration. Le modèle numérique s'appuie sur l'approche variationnelle de la mécanique de la rupture (aussi appelée "champ de phase") qui a été mise en œuvre dans le code éléments finis Z-set [1]. La nature instable des propagations de fissures nécessite de régulariser le problème, ce qui est fait ici en se plaçant dans un cadre dynamique implicite et en s'autorisant d'importants changements d'échelles temporelles. Cela engendre des contraintes sur la résolution parallèle par décomposition de domaine qui seront détaillées.

Mots clés — CMC, phase field, décomposition de domaine

1 Introduction

Les matériaux composites à matrice céramique présentent d'excellentes propriétés de tenue à haute température qui en font des candidats très intéressants pour des applications aux parties chaudes des moteurs (arrière-corps, aubes de turbines, ...). Ces composites se différencient des céramiques massives par leur meilleure tolérance aux dommages rendue possible par la préservation de l'intégrité des fibres via un affaiblissement volontaire de leur interface avec la matrice ou de la matrice elle-même [2, 3].

Augmenter l'énergie dissipée par fissuration dans la matrice et les interfaces peut donc être bénéfique, mais la conception de tels matériaux optimisés reste difficile du fait des compétitions qui existent entre les différents phénomènes. On s'intéresse ici plus particulièrement à la rupture transverse (plis à 90°) et à la manière dont la répartition plus ou moins compacte des fibres joue sur la dissipation d'énergie (Figure 1). La question de l'amorçage a été traitée dans [4], on cherche ici à simuler également la propagation des fissures.

La section 2 détaille quelques éléments de modélisation. On considère que le matériau est quasi-fragile et que l'énergie est dissipée uniquement par la propagation des fissures à l'échelle microscopique.

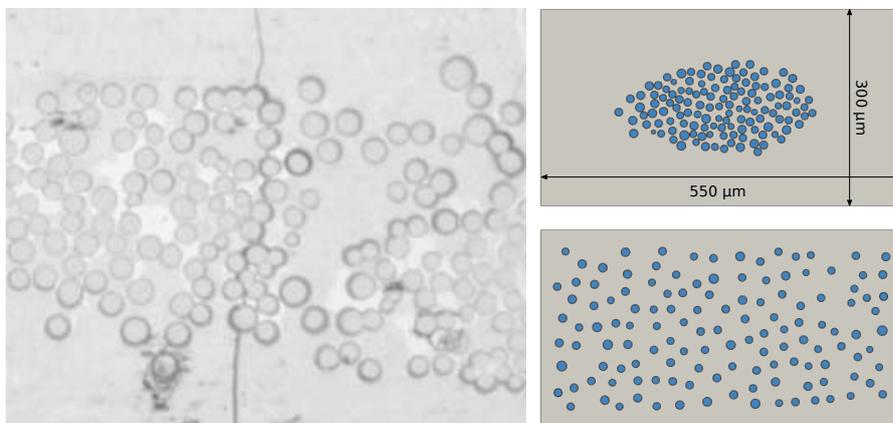


FIGURE 1 – Image d'une fissure transverse dans un CMC et deux configurations de répartition de fibres extrêmes (répartition aléatoire [4]).

Pour traiter ce type de problème, nous adoptons la méthode variationnelle de la mécanique de la rupture [5, 6, 7] qui a déjà fait ses preuves dans des situations similaires [8, 9]. On utilise les modèles AT1 ou AT2 qui permettent d'intégrer à la simulation une ténacité et une contrainte maximale (voire un seuil pour AT1), ce qui autorise dans une certaine mesure à faire de l'amorçage et de la propagation [10].

La section 3 traite certains aspects numériques du solveur. Du fait de la nature du problème, la fissuration est très instable. Le choix qui est fait est de procéder à une résolution en dynamique implicite. Ceci nécessite, au moment des phases de propagation brutale, de descendre à une échelle de temps suffisamment fine pour que l'inertie puisse régulariser le problème. Ceci est relativement coûteux en terme de temps de calcul. À cela, il faut ajouter le sur-coût de la finesse de maillage requise par l'approche variationnelle de la rupture et piloté par la longueur interne du modèle. Ceci nous a conduit à utiliser des solveurs parallèles par décomposition de domaine déjà présents dans Z-set [11] et à l'adapter au solveur champ de phase.

Nous présentons en section 4 quelques résultats sur deux configurations extrêmes de répartition des fibres.

2 Modèle de fissuration du CMC

Les deux modèles géométriques représentés sur la Figure 1 sont constitués de 130 fibres de $5\mu\text{m}$ de diamètre en moyenne. Ils possèdent le même taux volumique de fibres mais se caractérisent par des espacements inter-fibre très différents. Le mécanisme de protection des fibres évoqué dans la section 1 consiste à affaiblir l'interface entre les fibres et la matrice par un revêtement dont l'épaisseur est d'environ $0.5\mu\text{m}$ (voir Figure 2). On considère que la fibre et le revêtement sont élastiques non endommageables, en revanche, l'affaiblissement de l'interface est modélisé par deux zones cohésives entre la fibre et le revêtement d'une part, et entre le revêtement et la matrice d'autre part. La matrice est quant à elle représentée par un modèle de champ de phase de type AT1 ou AT2 [12]. Par soucis de concision, seule la forme forte du modèle AT2 est rappelée ici :

$$\underline{\nabla} \underline{\underline{\sigma}} = \rho \underline{\underline{\ddot{u}}} \quad (1)$$

$$\frac{G_c}{2} \left(\frac{1}{l} \phi - l \Delta \phi \right) = (1 - \phi) \Psi_0 \quad (2)$$

avec les conditions aux limites suivantes :

$$\underline{\underline{\sigma}} n = t \quad \text{sur } \partial\Omega_t \quad (3)$$

$$\underline{\underline{u}} = \underline{\underline{u}}_d \quad \text{sur } \partial\Omega_d \quad (4)$$

$$\underline{\nabla} \phi \cdot \underline{\underline{n}} = 0 \quad \text{sur } \partial\Omega \quad (5)$$

L'expression (1) exprime l'équilibre dynamique et (2) est l'équation non locale que doit vérifier le champ de phase ϕ qui est une inconnue du problème au même titre que le déplacement $\underline{\underline{u}}$ et qui est discrétisée sur la même base éléments finis. G_c est le taux de restitution de l'énergie critique. Les expressions (3)-(5) expriment les conditions aux limites naturelles et essentielles classiques pour les deux problèmes. Les expressions (1) et (2) sont couplées puisque dans le modèle AT2 (mais aussi AT1), on a :

$$\Psi_0 = \frac{1}{2} \underline{\underline{\varepsilon}} : \underline{\underline{C}}_0 : \underline{\underline{\varepsilon}} \quad (6)$$

$$\underline{\underline{\sigma}} = (1 - \phi)^2 \underline{\underline{C}}_0 : \underline{\underline{\varepsilon}} \quad (7)$$

Pour de plus amples détails le lecteur peut se référer à la revue de Wu *et al.* [13]. La différence fondamentale entre ces deux modèles est qu'avec AT2, l'endommagement se produit dès le début du chargement alors qu'avec AT1 il y a un seuil précédé d'un régime élastique linéaire. Une analyse unidimensionnelle sur une configuration homogène permet classiquement d'établir les relations suivantes entre module de Young (E_0), taux de restitution de l'énergie critique (G_c), longueur interne (l_0) et la contrainte maximale σ_c [12] :

$$\sigma_c = \frac{9}{16} \sqrt{\frac{E_0 G_c}{3l_0}} \quad \text{pour le modèle AT2} \quad \text{et} \quad \sigma_c = \sqrt{\frac{3E_0 G_c}{8l_0}} \quad \text{pour le modèle AT1} \quad (8)$$

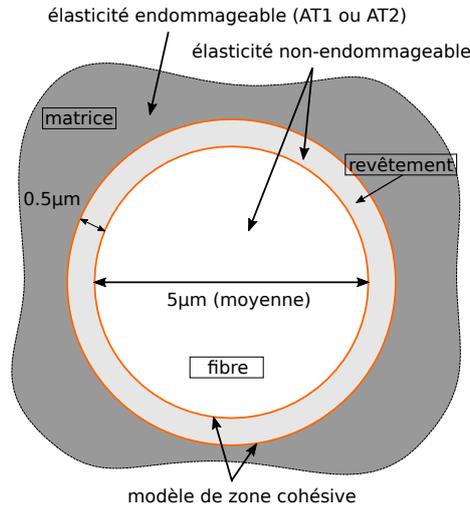


FIGURE 2 – Modélisation à l'échelle microscopique

Notons que pour le modèle AT1, la contrainte maximale correspond au seuil d'élasticité.

Les propriétés de références utilisées (elles sont parfois mal connues et pourraient faire l'objet d'une étude paramétrique) sont détaillées dans les tableaux 1 et 2. Ce tableau indique notamment les longueurs internes choisies pour les modèles AT2 et AT1 à partir des relations (8) pour contrôler la contrainte maximale. On constate que par rapport aux dimensions caractéristiques de la fibre, la longueur l_0 pour AT1 est relativement importante. Des valeurs de G_c , σ_c et l_0 sont indiquées entre parenthèse pour le revêtement. Il s'agit de valeurs indicatives (le champ de phase n'y est pas appliqué) montrant qu'avec des propriétés similaires à celles de l'interface fibre/revêtement (table 2), la longueur interne l_0 , pour AT1 ou AT2, serait largement supérieure à l'épaisseur du revêtement, ce qui n'aurait pas beaucoup de sens. De manière similaire, une estimation de la taille de la *process zone* du modèle cohésif devrait être faite, mais une relation de type (8) n'est pas établie pour ce type de configuration. On se contentera de vérifier lors des applications numériques que cette taille est compatible avec la géométrie.

	E [GPa]	μ	G_c [$J.m^{-2}$]	σ_c [MPa]	AT2 l_0 [μm]	AT1 l_0 [μm]
matrice	150	0.3	36	800	0.89	3.17
fibre	380	0.185	–	–	–	–
revêtement	25	0.21	(5)	(20)	(32)	(110)

TABLE 1 – Propriétés des matériaux (inspiré de [14]).

	K [$N.mm^{-3}$]	Z_t [MPa]	S_c [MPa]	G_{Ic} [$J.m^{-2}$]	G_{IIc} [$J.m^{-2}$]
revêtement/matrice	1×10^6	80	120	36	360
fibre/revêtement	1×10^6	5	20	5	50

TABLE 2 – Propriétés des interfaces : raideur initiale du modèle, contraintes critiques normale et tangentielle et G_c dans les deux modes. Inspiré de [14].

3 Quelques éléments de résolution numérique

3.1 Modélisation dynamique

Les échantillons numériques représentés sur la Figure 1 sont sollicités en traction (déplacement imposé) dans le sens longitudinal jusqu'à rupture complète. Dans cette configuration, la propagation des fissures créées est la plupart du temps instable. Différentes méthodes existent pour mener ce genre de simulation en quasi-statique, les plus classiques étant d'utiliser un solveur à longueur d'arc ou alors d'introduire de la viscosité. Si on veut rester compatible avec d'autres applications traitées à l'Onera et qui

nécessitent d'introduire des modèles visco-élastiques bien identifiés, la première méthode n'est pas adaptée. Cependant, le CMC étudié ici ne présente pas non plus de caractère visqueux et la seconde méthode n'est pas non plus adaptée. Nous avons choisi de rester dans un cadre dynamique avec une résolution implicite et un schéma de type HHT [15]. Il faut accepter de laisser le solveur descendre à des échelles de temps relativement faible où l'inertie du système permet de régulariser le problème. Dans les calculs qui seront présentés plus loin, la plage de pas de temps varie typiquement de 10^{-2} s (quasi-statique) à 10^{-9} s (dynamique rapide) ce qui est relativement coûteux.

Par ailleurs la longueur interne du modèle AT2 ($l_0 = 0.89\mu\text{m}$) nécessite de discrétiser la matrice de manière homogène (car nous ne connaissons pas *a priori* les lieux d'amorçage ni les chemins de propagation). Ceci conduit, pour un modèle 2D en déformations planes, à des problèmes de l'ordre de 9×10^6 degrés de liberté qu'il est indispensable de manipuler avec des techniques de décomposition de domaine.

3.2 Résolution parallèle par décomposition de domaine

Dans Z-set les équations couplées (1) et (2) sont résolues par un schéma alterné tel que proposé dans [6]. Deux instances de Z-set, l'une qui résout le problème mécanique et l'autre qui résout l'équation non-locale, travaillent alternativement jusqu'à ce qu'un critère de stagnation soit atteint (point fixe). Le tout est synchronisé via l'interface Python de Z-set.

Chacun des problèmes est résolu avec un solveur parallèle par décomposition de domaine implémentés dans Z-set. Dans ce travail, nous considérons à la fois les solveurs duaux de type FETI (Finite Element Tearing and Interconnect) [16, 11] et les solveurs primaux de type BDD (Balancing Domain Decomposition) [17]. L'atout de l'approche FETI est de proposer une variété de préconditionneurs (Dirichlet, lumpé). Elle requiert par contre un certain soin dans le traitement des sous-domaines dits "flottants" qui ne sont pas soumis à suffisamment de conditions aux limites de type Dirichlet pour bloquer leurs mouvements de corps rigides. En régime quasi-statique, la matrice de rigidité d'un sous-domaine flottant est singulière, ce qui impose de calculer précisément son noyau et d'utiliser une inverse généralisée. La présence de ces sous-domaines flottants est essentiel pour l'extensibilité de la méthode car elle équipe la méthode FETI d'un problème "grille grossière" permettant de faire transiter rapidement l'information du chargement entre les différents sous-domaines. En pratique, ce problème grille grossière est pris en compte par initialisation—projection et le solveur de Krylov sous-jacent résout le système projeté. Dans la méthode primale BDD, ces sous-domaines flottants mènent également à un problème grossier mais ce dernier est au niveau du préconditionneur. Il est pris en compte ici par un solveur de Krylov augmenté.

La difficulté principale pour simuler ces problèmes de rupture avec des solveurs en décomposition de domaine réside dans la transition statique/dynamique et dans la large gamme de variation du pas de temps automatique. L'opérateur global pour les schémas de Newmark ou HHT s'écrit :

$$\mathbf{K}_{\text{eff}} = \frac{1}{\beta \Delta t^2} \mathbf{M} + \mathbf{K} \quad (9)$$

La matrice de masse régularise l'opérateur et ce dernier n'a donc, en arithmétique exacte, pas de noyau. Les choses se compliquent en précision finie, où suivant la valeur du pas de temps, les méthodologies de calcul des noyaux peuvent être mises en défaut. En pratique, ces noyaux et les inverses généralisées qui en découlent sont évalués à l'aide d'une factorisation incomplète de l'opérateur et d'une analyse du complément de Schur induit [18, 19]. Les valeurs singulières de ce complément de Schur permettent, pour la plupart des cas, d'identifier clairement les valeurs singulières nulles et donc la taille du noyau. Cette identification fait intervenir un seuil utilisateur. Pour les régimes limites, l'analyse est claire. En dynamique rapide, le pas de temps est très petit et le noyau est vide. En régime quasi-statique, la régularisation de la matrice de masse est négligeable et le noyau de l'opérateur est celui de la matrice de rigidité. Pour les régimes intermédiaires, l'identification est plus ardue car les valeurs singulières du complément de Schur diminuent directement avec le pas de temps. Il existe toujours un pas de temps pour lequel le statut d'une valeur singulière analytiquement non nulle devient numériquement nulle. L'évolution automatique du pas de temps rend sensible cette identification, en particulier pour la méthode FETI où une erreur sur cette détection fausse le système à résoudre. Pour BDD, une erreur de détection dégrade la qualité du préconditionneur.

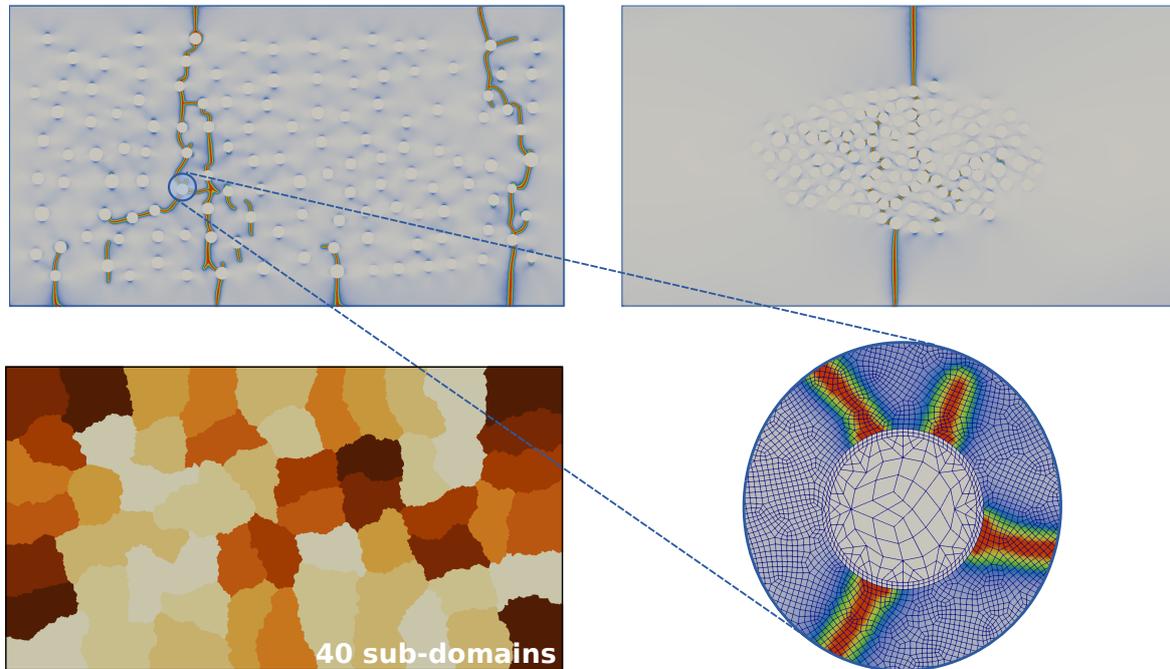


FIGURE 3 – Motifs de fissuration pour deux configurations d’espacement (en haut) et décomposition de domaines et zoom pour illustrer le maillage (en bas)

La méthode la plus robuste est de résoudre le problème mécanique avec la méthode BDD. Le problème non-local est lui résolu avec un solveur FETI pour tirer parti des préconditionneurs faibles coûts (lumpé, superlumpé).

4 Résultats sur deux configurations extrêmes

Les deux configurations extrêmes de la Figure 1 sont traitées. La Figure 3 montre les trajets de fissuration obtenus avec un modèle AT2 ainsi qu’une décomposition de domaine typique (ici 40 sous-domaines). Le maillage (dont la figure donne un aperçu) comporte 9.3×10^6 degrés de liberté. La Figure 4 montre un bilan d’énergie typique pour une configuration dense. L’énergie n’est dissipée que par le processus de fissuration et par dissipation numérique du schéma HHT. L’exécution d’environ 10 simulations pour chaque configuration, dense et espacées, permet d’évaluer la dissipation d’énergie par fissuration à $7.5 \times 10^{-6} \pm 1.5$ mJ et $2.5 \times 10^{-6} \pm 0.5$ mJ respectivement (moyenne et écart-type). Effectivement, pour une même longueur d’échantillon, la longueur des fissures générées paraît bien plus importante sur les configurations espacées que sur les configurations denses (Figure 3).

5 Conclusion

L’intérêt de ce travail est d’illustrer qu’il est possible de mener à bien, à l’échelle microscopique, des simulations de rupture transverse d’un composite CMC en tenant compte des propriétés du revêtement et de la matrice. La formulation variationnelle de la mécanique de la rupture permet ici de simuler l’amorçage et la fissuration. Les maillages extrêmement fins requis ainsi que la stratégie de simulation (schéma alterné avec transition statique/dynamique) engendrent des coûts de calcul importants. C’est ce qui a nécessité de mettre au point une stratégie de parallélisation par décomposition de domaine adaptée. En terme de résultats, d’interprétation et d’exploitation, il semble que la configuration géométrique des fibres ait une influence non négligeable sur la dissipation d’énergie. Il conviendrait par la suite de compléter les conclusions en menant des simulations sur des configurations plus réalistes de stratifiés dont on dispose d’essais instrumentés [20]. Les propriétés matériaux de la matrice, du revêtement et de leur interface sont également des sources d’incertitudes et une analyse de sensibilité pourrait aider à conforter ces premiers résultats qualitatifs.

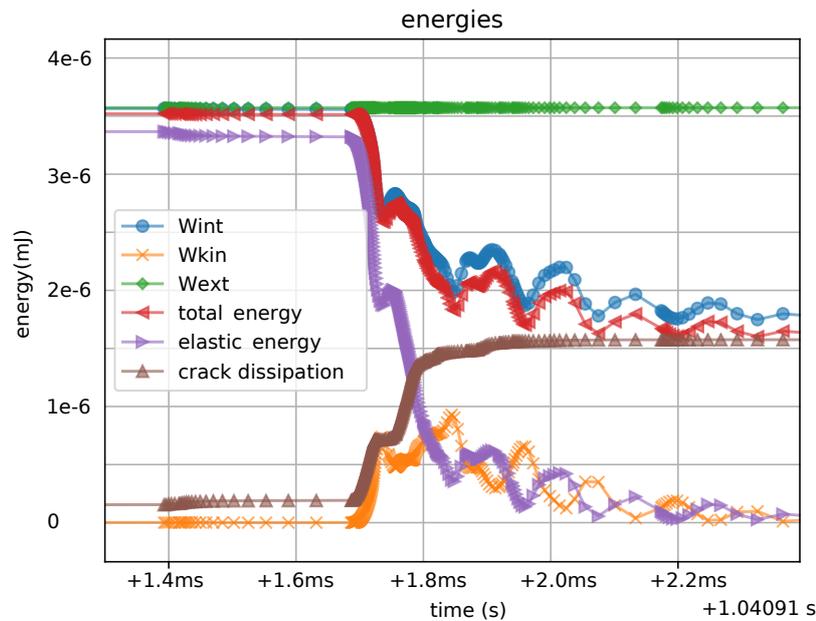


FIGURE 4 – Bilan d'énergie au moment de la rupture brutale (zoom temporel) pour une configuration dense.

Références

- [1] Z-set, material and structure analysis suite. <http://www.zset-software.com>.
- [2] Wen-Chiang Tu, Fred F Lange, and Anthony G Evans. Concept for a damage-tolerant ceramic composite with “strong” interfaces. *Journal of the American Ceramic Society*, 79(2) :417–424, 1996.
- [3] J.H. Weaver, J. Rannou, M.A. Mattoni, and F.W. Zok. Interface properties in a porous-matrix oxide composite. *Journal of the American Ceramic Society*, 89(9) :2869–2873, 2006.
- [4] Dipen K Patel, Triplicane Parthasarathy, and Craig Przybyla. Predicting the effects of microstructure on matrix crack initiation in fiber reinforced ceramic matrix composites via machine learning. *Composite Structures*, 236 :111702, 2020.
- [5] Gilles 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, 1998.
- [6] 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, 2000.
- [7] 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, 2010.
- [8] Yajie Feng, Jun Wang, Nianwei Shang, Gang Zhao, Chao Zhang, Jianbo Tang, Shiqing Xin, Andreas Hornig, Maik Gude, Qing Huang, et al. Multiscale modelling of sicf/sic nuclear fuel cladding based on fe-simulation of braiding process. *Frontiers in Materials*, 7 :473, 2021.
- [9] T. Guillén-Hernández, A. Quintanas-Corominas, I.G. García, J. Reinoso, M. Paggi, and A. Turón. In-situ strength effects in long fibre reinforced composites : A micro-mechanical analysis using the phase field approach of fracture. *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*, 108 :102621, 2020.
- [10] E. Tanné, T. Li, B. Bourdin, J.-J. Marigo, and C. Maurini. Crack nucleation in variational phase-field models of brittle fracture. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 110 :80 – 99, 2018.
- [11] Christophe Bovet, Augustin Parret-Fréaud, Nicole Spillane, and Pierre Gosselet. Adaptive multipreconditioned feti : scalability results and robustness assessment. *Computers & Structures*, 193 :1–20, 2017.
- [12] Kim Pham, Hanen Amor, Jean-Jacques Marigo, and Corrado Maurini. Gradient damage models and their use to approximate brittle fracture. *International Journal of Damage Mechanics*, 20(4) :618–652, 2011.
- [13] Jian-Ying Wu, Vinh Phu Nguyen, Chi Thanh Nguyen, Danas Sutula, Stephane Bordas, and Sina Sinaie. Phase field modeling of fracture. *Advances in Applied Mechancis : Multi-scale Theory and Computation*, 52, 2019.

- [14] M Braginsky and CP Przybyla. Simulation of crack propagation/deflection in ceramic matrix continuous fiber reinforced composites with weak interphase via the extended finite element method. *Composite Structures*, 136 :538–545, 2016.
- [15] T.J.R. Hughes. *The finite element method : linear static and dynamic finite element analysis*. Prentice-hall, 1987.
- [16] C. Farhat and F.X. Roux. A method of finite element tearing and interconnecting and its parallel solution algorithm. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 32(6) :1205–1227, 1991.
- [17] Jan Mandel. Balancing domain decomposition. *Communications in numerical methods in engineering*, 9(3) :233–241, 1993.
- [18] Charbel Farhat and Michel Géradin. On the general solution by a direct method of a large-scale singular system of linear equations : application to the analysis of floating structures. *International journal for numerical methods in engineering*, 41(4) :675–696, 1998.
- [19] Tomáš Brzobohatý, Zdenek Dostál, Tomáš Kozubek, Petr Kovář, and Alexandros Markopoulos. Cholesky decomposition with fixing nodes to stable computation of a generalized inverse of the stiffness matrix of a floating structure. *International journal for numerical methods in engineering*, 88(5) :493–509, 2011.
- [20] Travis Whitlow, Eric Jones, and Craig Przybyla. In-situ damage monitoring of a sic/sic ceramic matrix composite using acoustic emission and digital image correlation. *Composite Structures*, 158 :245–251, 2016.