

Titre en français : Modélisation de l'endommagement fragile de microstructures par une approche micromécanique

Titre en anglais : Modeling of brittle damage to microstructures using a micromechanical approach

Nom du directeur de thèse : Mihail GARAJEU, Maître des Conférences (HDR), LMA

Tel :

E-Mail : mihai.garajeu@univ-amu.fr

Co-directeurs de thèse :

Noël LAHELLEC, Professeur des Universités, LMA, noel.lahellec@univ-amu.fr

Renaud MASSON, Ingénieur-Chercheur, CEA, renaud.masson@cea.fr

Laboratoire : Laboratoire de Mécanique et d'Acoustique (LMA)

Financement : demandé

Type de financement : contrat doctoral (ED353)

Résumé en français :

Ce projet d'étude s'inscrit dans le cadre de la modélisation du comportement non linéaire des composites, constitués de phases élastiques susceptibles de s'endommager, lorsqu'ils sont soumis à une charge. L'endommagement fragile est la conséquence de l'apparition et/ou de la croissance de microfissures, induisant une dégradation des propriétés mécaniques du matériau et éventuellement une réponse macroscopique adoucissante.

Dans un matériau fragile homogène ou faiblement hétérogène le chargement mécanique conduit généralement à l'apparition d'un nombre réduit de fissures qui se propagent rapidement jusqu'aux bords du volume étudié. Dans cette situation, l'endommagement étant très localisé, la modélisation de la réponse macroscopique par une démarche d'homogénéisation ne semble pas être adaptée. Dans le cas des matériaux hétérogènes, les hétérogénéités peuvent favoriser l'apparition de nouvelles fissures et, dans le même temps, constituer des obstacles pour la propagation des fissures. L'endommagement se présente alors sous la forme de multiples microfissures qui sont localisées dans tout le volume. L'évolution de l'endommagement dans cette situation semble être plus stable et s'apparente au développement de la déformation plastique. En partant de ce constat, la thèse propose d'étendre les méthodes d'homogénéisation qui ont déjà fait leurs preuves pour la modélisation du comportement macroscopique élasto-plastique, au cas du comportement élastique dégradable.

Bien que des progrès significatifs ont été réalisés depuis plusieurs années dans le domaine de la modélisation de l'endommagement de matériaux, la prise en compte de l'endommagement dans les approches d'homogénéisation reste encore une question largement ouverte. Les travaux dans ce domaine (voir par exemple [GMG23], [Ben23]) ne sont qu'à leur début, mais les résultats attendus sont susceptibles d'intéresser une large collectivité scientifique et industrielle.

Un des objectifs de la thèse vise à développer de nouvelles approches d'homogénéisation en champ moyen pour estimer la réponse effective et les statistiques de champs dans les composites avec des phases élastiques dégradables. Dans le contexte thermodynamique de modèles standard généralisés, l'endommagement local des phases est décrit par un champ (variable interne). Cette

formulation permet l'utilisation des méthodes d'homogénéisation récentes [LS07], basées sur les propriétés variationnelles de potentiels incrémentaux. Toutefois, plusieurs difficultés sont à prévoir :

- Le développement de l'endommagement à l'intérieur des phases est potentiellement localisé et peut induire une hétérogénéité de comportement. Il serait alors nécessaire de revoir la manière de définir le milieu linéaire de comparaison (LCC) pour un tel comportement. Cela pourrait être fait en tirant parti des méthodes d'homogénéisation récentes [Pon16] qui permettent de définir plusieurs valeurs de référence des champs élastiques (contrainte ou déformation) et d'endommagement par phase, comme récemment proposé par [GMG23]. Une hétérogénéité de comportement peut apparaître aussi dans le cas de trajets de chargement non monotones, où le caractère irréversible de l'endommagement conduit à des réponses locales de nature différentes, qui nécessitent l'adaptation des méthodes d'homogénéisation utilisées. Cette difficulté doit également être traitée afin d'obtenir un modèle applicable à des cas réalistes.
- La deuxième difficulté est liée à la perte de convexité du potentiel incrémental associée au problème d'endommagement. Le fait que les méthodes basées sur l'utilisation d'un LCC exploitent des conditions stationnaires (par exemple [Pon16]) peut aider à contourner ce problème, ne serait-ce que pratiquement.
- La formulation de la loi de comportement local dans le cadre thermodynamique des modèles standard généralisés peut avoir des conséquences sur la modélisation du comportement macroscopique. Il est bien connu qu'en général les potentiels thermodynamiques (l'énergie libre et le potentiel de dissipation) ne sont pas définis de manière unique et cela conduit à différentes définitions du potentiel incrémental et donc, potentiellement, à des comportements macroscopiques différents. Ces aspects doivent également être pris en considération dans la validation des méthodes d'homogénéisation.

Un deuxième objectif de la thèse concerne la modélisation de la réponse effective de microstructures en présence de l'endommagement via des simulations en champ complet. Afin d'évaluer la validité des modèles développés et d'étudier les mécanismes d'endommagement dans les matériaux hétérogènes, des simulations numériques basées sur la méthode FFT ou par éléments finis seront effectuées sur des microstructures particulières 3D (comme celles considérées dans la thèse de doctorat de V. Gauthier [Gau21]). Dans la thèse, il est envisagé d'adapter le code de calcul CRAFT développé au LMA pour prendre en compte des comportements de type « champs de phase » [BFM00]. Plusieurs types de chargements mécaniques pertinents pour les matériaux quasi fragiles seront appliqués, y compris des trajectoires cycliques. Dans les modèles proposés, le comportement des phases tient compte de l'endommagement local, mais pour les simulations numériques, pour des raisons de robustesse numérique, des modèles appropriés basés sur le gradient d'endommagement pourraient être considérés. Dans ce contexte la relation entre la résolution de la grille FFT et la longueur caractéristique présente dans les modèles d'endommagement à gradient est une question qui commence à être étudiée (à notre connaissance).

Résumé en anglais :

The aim of this project is to model the non-linear behavior of composites, made up of elastic phases that are susceptible to be damaged when subjected to load. Brittle damage is the consequence of the appearance and/or the growth of microcracks, inducing a degradation of the material's mechanical properties and possibly a macroscopic softening response.

In a homogeneous or slightly heterogeneous brittle material, mechanical loading generally leads to the appearance of a small number of cracks that propagate rapidly to the boundaries of the volume

under study. In this situation, as the damage is highly localized, modeling the response of an elementary volume using a homogenization approach does not appear to be appropriate. In the case of heterogeneous materials, heterogeneities can encourage the appearance of new cracks and, at the same time, act as obstacles to crack propagation. Damage then takes the form of multiple microcracks that are localized throughout the volume. The evolution of damage in this situation appears to be more stable and similar to the development of plastic deformation. Based on this observation, this thesis proposes to extend the homogenization methods already proven for modeling macroscopic elasto-plastic behavior, to the case of damageable elastic behavior.

Although significant progress has been made over the last few years in the field of materials damage modeling, the integration of damage behavior in homogenization approaches is still an open question. Work in this area (see for example [GMG23], [Ben23]) is still in its preliminary stages, but the expected results are likely to be of interest to a wide scientific and industrial community.

One of the aims of the thesis is to develop new mean-field homogenization (MFH) approaches for estimating the effective response and field statistics in composites with damageable elastic phases. In the thermodynamic context of generalized standard models, local phase damage is described by a field (internal variable). This formulation allows the use of recent homogenization methods [LS07], based on the variational properties of incremental potentials. However, several difficulties could arise:

- The development of damage within phases is potentially localized and can induce behavioral heterogeneity. It would then be necessary to reconsider the way in which the linear comparison medium (LCC) is defined for such behavior. This could be done by taking advantage of recent homogenization methods [Pon16] that allow several reference values of elastic (stress or strain) and damage fields to be defined per phase, as recently proposed by [GMG23]. Behavioral heterogeneity can also arise in the case of non-monotonic loading paths, where the irreversible nature of the damage leads to local responses of different natures, requiring adaptation of the homogenization methods used. This difficulty also needs to be addressed in order to obtain a model applicable to realistic cases.
- The second difficulty relates to the loss of convexity of the incremental potential associated with the damage problem. The fact that LCC-based methods exploit stationary conditions (e.g. [Pon16]) may help to circumvent this problem.
- The formulation of the local behavior law in the thermodynamic framework of generalized standard models can have consequences for the modeling of macroscopic behavior. It is well known that, in general, the thermodynamic potentials (free energy and dissipation potential) are not uniquely defined, and this leads to different definitions of the incremental potential and therefore, potentially, to different macroscopic behavior. These aspects also need to be taken into account when validating homogenization methods.

A second aim of the thesis is to model the effective response of microstructures in the presence of damage, using full-field simulations. In order to assess the validity of the models developed and to study damage mechanisms in heterogeneous materials, numerical simulations based on the FFT or finite element method will be carried out on 3D particulate microstructures (such as those considered in V. Gauthier's PhD thesis [Gau21]). In the thesis, it is planned to adapt the CRAFT computational code developed at LMA to take into account "phase field" type behavior [BFM00]. Several types of mechanical loading relevant to quasi-brittle materials will be applied, including cyclic trajectories. In the proposed models, phase behavior takes local damage into account, but for numerical simulations, for reasons of numerical robustness, appropriate models based on the damage gradient could be considered. In this context, the relationship between FFT grid resolution and the characteristic

length present in gradient damage models is an issue that is beginning to be investigated (to our knowledge).

Profil du candidat recherché :

Le candidat doit avoir une formation de niveau master 2 en France ou à l'étranger dans le domaine de la mécanique théorique. Il est souhaitable que le candidat possède des bases solides en disciplines fondamentales comme la Mécanique des milieux continus et dans des cours comme la Mécanique non linéaire des solides (plasticité, viscoplasticité), l'Homogénéisation, la Mécanique de la rupture ou la Modélisation de l'endommagement. Des compétences en programmation (Python, C, Matlab) sont aussi appréciées.

Le doctorant est le moteur de ses recherches. Il doit travailler en autonomie, avoir un esprit analytique et de l'initiative. De bonnes aptitudes de rédaction et de présentation orale sont aussi nécessaires.

Publications sur le sujet :

- [Ben23] An incremental variational approach and computational homogenization for composites with evolving damage, Thèse de doctorat, (2023)
- [BFM00] B. Bourdin, G. A. Francfort, J. Marigo, Numerical experiments in revisited brittle fracture, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 48, 797-826, (2000)
- [Gau21] V. Gauthier, Modélisation de l'endommagement dans les milieux hétérogènes élastiques fragiles, Thèse de doctorat, (2021)
- [GMG23] Gauthier V., Masson R., Garajeu M., Helfer T., A mean-field micromechanical incremental approach for brittle damage in particulate microstructures under monotonic loading, using a piecewise uniform damage field, *Journal of Solids and Structures*, 282, (2023): 112443,
- [LS07] Lahellec, N., Suquet, P. (2007). Effective behavior of linear viscoelastic composites: a time-integration approach. *International Journal of Solids and Structures*, 44(2), 507-529.
- [Pon16] P. Ponte Castañeda, Stationary variational estimates for the effective response and field fluctuations in nonlinear composites, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 96, 660-682, (2016)

Insertion professionnelle après thèse : recherche publique, enseignement supérieur et R&D privée