CSMA 2013
11e Colloque National en Calcul des Structures
13-17 Mai 2013

Modélisation par éléments discrets de matériaux élastiques fragiles. Application à l'essai d'indentation sur verre de silice.

D. André[1], M. Jebahi[2], I. Iordanoff[3], J. L. Charles[4], J. Néauport[5]

[1] I2M-MPI, UMR 5295 CNRS, Arts et Métiers ParisTech, Talence, France, damien.andre@etu.u-bordeaux1.fr
[2] Univ. Bordeaux 1, I2M-DuMAS, UMR 5295 CNRS F-33405, Talence, France, mohamed.jebahi@u-bordeaux1.fr
[3] I2M-MPI, UMR 5295 CNRS, Arts et Métiers ParisTech, Talence, France, ivan.iordanoff@ensam.eu
[4] I2M-DuMAS, UMR 5295 CNRS, Arts et Métiers ParisTech, Talence, France, j.charles@i2m.u-bordeaux1.fr
[5] CEA, CESTA, F-33114, Le Barp, France, JEROME.NEAUPORT@projet-lmj.org

Résumé — Il est proposé de simuler le comportement de matériaux élastiques fragiles par une approche numérique discrète. Les méthodes numériques généralement employées, basées sur la mécanique des milieux continus, ont des difficultés pour traiter des milieux multifissurés mais aussi des phénomènes de refermetures de fissures. Ces limitations, dans le cadre des approches discrètes (DEM), sont naturellement traitées, car celles-ci prennent en compte les discontinuités générées par les interfaces. Un enjeu est alors de proposer une modélisation discrète permettant de retrouver le comportement mécanique, au sens de la mécanique des milieux continus, du matériau à simuler. Cet article propose un modèle DEM quantitatif de matériau élastique fragile. Dans ce modèle, les propriétés élastiques du matériau sont simulées au travers de liaisons cohésives poutres et les propriétés d'endommagement sont obtenues via le calcul d'une contrainte moyenne hydrostatique calculée pour chacun des éléments discrets. Ce modèle est ensuite mis en oeuvre pour la simulation d'essais d'indentations fracturant sur verre de silice.
Mots clés — DEM, élément discret, élastique, fragile, calibration, indentation, cône de Hertz.

1 Introduction

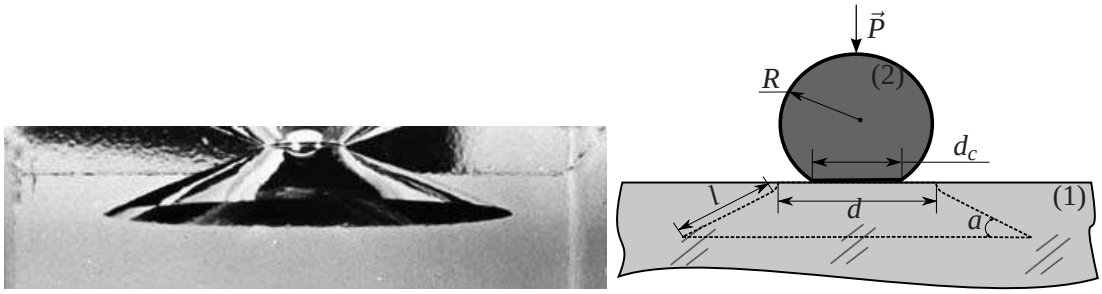
Le modèle élément discret permet de décrire assez naturellement un milieu granulaire. C'est ainsi qu'il fût pour la première fois employé en 1979 [1]. Plus récemment, des auteurs ont mis à profit cette méthode pour l'étude de l'endommagement de solides hétérogènes comme les bétons [2], les roches [3], ou de matériaux homogènes comme les céramiques [4].

Ces modèles font intervenir deux échelles : l'échelle microscopique, représentative de l'élément discret et de ses interactions directes avec ses voisins et l'échelle macroscopique, représentative de l'ensemble de la structure discrète. Les lois de passage entre ces deux échelles sont à priori inconnues et, plus particulièrement, pour des domaines discrets géométriquement aléatoires [5].

Ces travaux s'inscrivent dans la continuité d'une précédente étude [6]. Il a été montré que l'emploi de liaisons cohésives poutres associées à une méthodologie de calibration adaptée permet de retrouver à l'échelle macroscopique le comportement d'un matériau purement élastique caractérisé par un module de Young et un coefficient de Poisson. L'objectif final est de proposer un modèle discret élastique fragile des verres de silice permettant de simuler l'abrasion de ceux-ci. Ces procédés d'obtention mettent en œuvre des particules abrasives qui, par sollicitations cycliques, érodent la surface de l'échantillon. Des micro-fissures résiduelles subsistent alors dans la matière et se révèlent néfastes quant à l'utilisation ultérieure du composant optique [7].

Les opérations de surfaçage peuvent être comparées à de multiples indentations des particules abrasives sur la surface de l'optique [7]. Dans ce cadre, l'essai de validation retenu du modèle discret élastique fragile de verre de silice est l'essai d'indentation avec indenteur sphérique.

Les sollicitations provoquées par l'indenteur sur la surface de l'échantillon engendrent une géométrie de fissuration caractéristique de formes coniques (voir figure 1). Ce phénomène a été observé en premier par Hertz [8, 9] à la fin du 19e siècle. C'est, aujourd'hui, un phénomène extrêmement bien décrit dans la littérature, mais dont la modélisation reste en discussion [10, 11, 12, 13]. La méthode des éléments discrets peut alors s'avérer être une alternative intéressante pour étudier des phénomènes de fissurations



(a) Cône de Hertz. Image extraite de [14].

(b) Vue symbolique et paramétrage du problème.

Fig. 1 – Le cône de Hertz.

complexes tels que la génération du cône de Hertz.

Le modèle discret élastique fragile de verre de silice développé est décrit en trois étapes :

1. Dans un premier temps, la méthode des éléments discrets ainsi que les différents schémas numériques de résolution seront brièvement présentés.
2. Dans une deuxième partie, le critère de rupture ainsi que la méthode de calibration associée seront décrits. Pour valider cette approche, une gamme d'essais standards à rupture seront simulés et discutés en regard d'approches théoriques et analytiques.
3. La dernière partie sera consacrée à l'essai d'indentation. Les résultats numériques seront comparés aux observations expérimentales.

2 Modèle DEM élastique et schémas numériques associés

Le modèle DEM utilisé dans le cadre dans cette étude met en œuvre des éléments discrets de formes sphériques. Le schéma de résolution est de type dynamique explicite. Pour assurer la cohésion et l'élasticité des domaines discrets, les éléments discrets sont liés entre eux par des liaisons cohésives poutres. Cette section propose une vue synthétique, pour plus de détail, le lecteur peut se référer à [6].

2.1 Schéma d'intégration explicite

Ce type de schéma numérique a été choisi pour sa rapidité de résolution dans le cas de problèmes dynamiques dont les temps caractéristiques sont extrêmement courts : impacts, fracturations, etc. Dans ce cadre, un panel d'algorithme de résolution peut être employé. Le schéma numérique « Verlet vitesse » a été choisi pour sa stabilité et son implémentation aisée [15].

Les rotations des éléments discrets sont décrites par l'intermédiaire de quaternions. Les quaternions sont aujourd'hui largement utilisés dans le domaine du calcul numérique et sont privilégiés pour leur efficacités [16, §2.5]. Toutefois, pour prévenir des dérives des résultats numériques ceux-ci sont normalisés à chaque itération de calcul.

2.2 Propriété élastique du domaine discret

Les éléments discrets sont liés entre eux par des liaisons cohésives de type poutre d'Euler-Bernouilli. Celles-ci sont connectées au centre des éléments discrets par un encastrement. Les actions mécaniques, en terme de force et de moment, des poutres sur les éléments discrets sont déterminées à partir des positions et des orientations des éléments discrets suivant les lois de la résistance des matériaux pour des poutres de forme cylindrique. Ces poutres sont alors caractérisées par des propriétés mécaniques et géométriques : module de Young, coefficient de Poisson, rayon ainsi que longueur. La longueur des poutres n'est pas un paramètre libre, car contrainte par la position des deux éléments discrets connectés.

Les valeurs de ces paramètres sont déterminées grâce à des essais numériques de calibration (essais de traction). Suivant les propriétés mécaniques élastiques du matériau à simuler, caractérisées par un module de Young et un coefficient de Poisson, il est alors possible de déterminer un jeu unique de valeurs des paramètres des poutres cohésives à l'échelle microscopique du domaine discret.

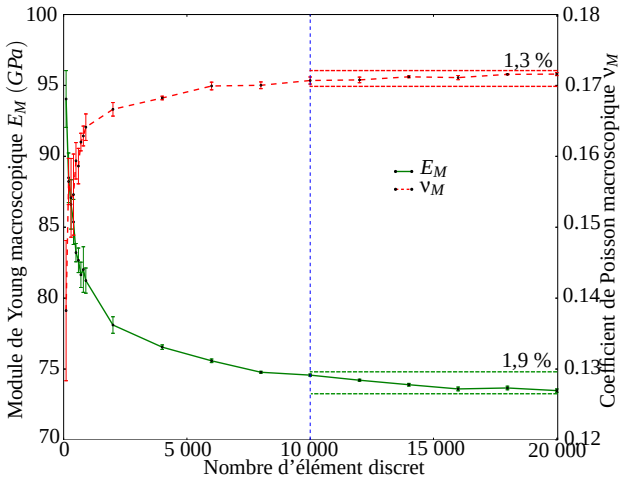


Fig. 2 – Évolution des propriétés mécaniques macroscopique, module de Young E_M et coefficient de Poisson ν_M en fonction du nombre d'éléments discrets du domaine.



(a) 200 ED (b) 2 000 ED (c) 20 000 ED

Fig. 3 – Aperçu des différents domaines discrets avec un taux croissant discrétisation.

Le principal intérêt de ce modèle est l'indépendance du jeu de paramètres microscopiques vis-à-vis des paramètres macroscopiques à condition que le domaine discret respecte certains critères géométriques : isotropie géométrique, compacité, cardinalité et taux de discrétisation [6]. Cette propriété est illustrée par la figure 2 qui montre l'évolution des propriétés mécaniques macroscopiques en fonction du nombre d'éléments discrets du domaine. Pour un nombre d'éléments discrets supérieur à 10 000, les résultats montrent une dispersion des propriétés macroscopiques inférieure à 2%. Un aperçu des différents domaines discrets utilisés est visible sur la figure 3.

3 Modèle de rupture

La fissuration est généralement simulée par la rupture des liaisons cohésives. Il est alors nécessaire d'introduire un critère de rupture microscopique permettant de rompre ces liaisons cohésives et de simuler les propagations de fissures par ruptures consécutives de ces liaisons. Les différentes méthodes proposées dans la littérature sont généralement basées sur des critères de déformation ou de contrainte maximale des liaisons cohésives [17, 18, 5, 19, 20].

L'approche retenue ici est différente. Il est proposé de calculer un tenseur des contraintes pour chaque élément discret en fonction des forces de réaction générées par les liaisons cohésives. La méthode de calcul du tenseur de contrainte équivalent est basée sur les travaux de [21] :

$$\bar{\sigma_i} = \frac{1}{2\Omega_i}\left(\frac{1}{2}\sum_j \vec{r}_{ij} \otimes \vec{f}_{ij} + \vec{f}_{ij} \otimes \vec{r}_{ij}\right) \tag{1}$$

Où :

- $\otimes$ est le produit tensoriel entre deux vecteurs,
- $\bar{\sigma_i}$ est le tenseur équivalent des contraintes de l'élément discret i,
- Ω_i est le volume de l'élément discret i,
- $\vec{f}_{ij}$ est la force de réaction de la liaison cohésive reliant deux éléments discrets i et j,
- $\vec{r}_{ij}$ est le vecteur position relatif entre deux éléments discrets i et j.

Il est alors supposé qu'une fracture s'initie lorsque la pression hydrostatique en traction exercée sur un élément discret dépasse un certain seuil de contrainte σ^{lim}, soit :

$$\frac{1}{3} tr\,(\bar{\sigma_i}) > \sigma^{lim} \tag{2}$$

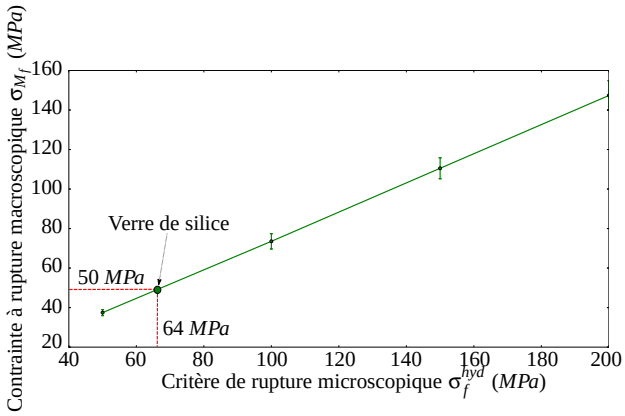


Fig. 4 – Évolution de la contrainte à rupture macroscopique σ_{M_f} en fonction du seuil de rupture microscopique σ_f^{hyd}.

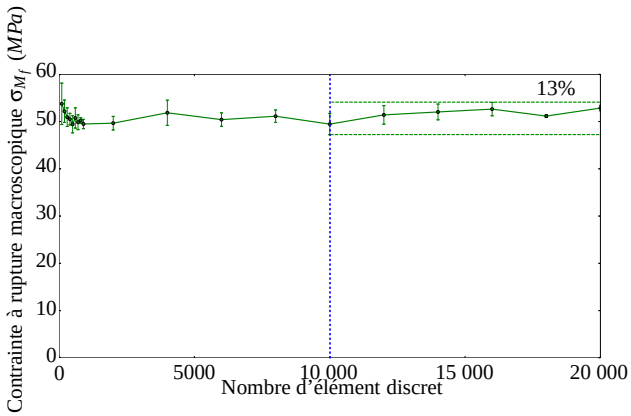


Fig. 5 – Évolution des contraintes à rupture macroscopique en fonction du nombre d'éléments discrets du domaine.

Afin de déterminer le seuil σ^{lim}, dans le cas des verres de silice, il est proposé de mener une campagne d'essais numériques de calibration.

3.1 Calibration du seuil de rupture microscopique

La calibration du critère de rupture est basée sur la même procédure que pour la calibration des paramètres élastiques décrite dans [6]. Quatre domaines discrets différents sont alors soumis à des essais de traction à rupture. Chacun de ces domaines est formé d'environ 10 000 éléments discrets. La figure 4 montre l'évolution de la contrainte à rupture macroscopique en fonction du seuil de rupture microscopique. Dans le cas du verre de silice, la contrainte à rupture est connue et vaut 50 *MPa*. La courbe obtenue permet alors de déterminer un seuil de rupture microscopique équivalent à 64 *MPa*.

3.2 Étude de convergence

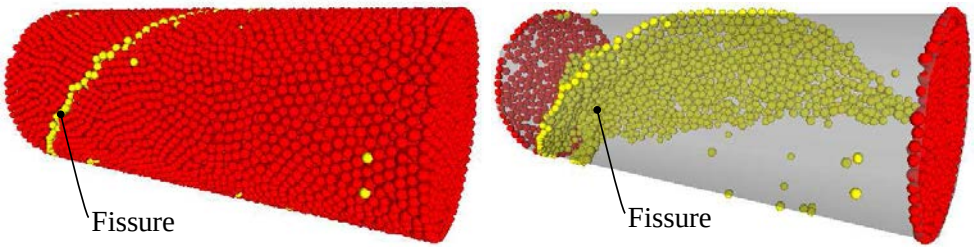
De la même façon que pour les propriétés élastiques, cette étude consiste à vérifier la convergence des valeurs de contrainte à rupture macroscopique en regard du nombre d'éléments discrets composant le domaine discret. La figure 5 montre cette évolution. Les résultats montrent que pour des domaines discrets composés d'un nombre d'éléments discrets supérieur à 10 000 éléments, les valeurs de contraintes à rupture sont stables et comprises dans une gamme de valeur dont la dispersion est inférieure à 13%.

3.3 Essais de validation

Il est proposé dans cette section de soumettre plusieurs échantillons numériques de verre de silice à des essais de traction, de flexion pure et de torsion. Le tableau 1 présente les différentes valeurs de contrainte à rupture macroscopique obtenues. Les résultats montrent que pour différentes sollicitations, les valeurs des contraintes à ruptures macroscopiques associées sont quasi-identiques.

Sample	Traction	Flexion	Torsion
n° 1	53,3 MPa	47,0 MPa	51,5 MPa
n° 2	48,0 MPa	47,0 MPa	47,6 MPa
n° 3	48,3 MPa	46,2 MPa	50,9 MPa
n° 4	48,2 MPa	55,5 MPa	47,7 MPa
Moyenne	49,5 MPa	48,9 MPa	49,4 MPa
Écart type	2,2 MPa	3,8 MPa	1,8 MPa

Tableau 1 – Résumé des valeurs de contrainte à rupture macroscopique obtenues pour des essais de traction, de flexion pure et de torsion pour quatre échantillons numériques différents contenant environ 10 000 éléments discrets.



(a) Vue avec l'intégralité des éléments discrets.

(b) Vue représentant seulement les éléments discrets rompus.

Fig. 6 – Géométrie de fissuration dans le cas de l'essai de torsion. *Les éléments discrets rompus sont colorés en jaune clair.*

De plus, la figure 6 montre la géométrie de fissuration obtenue dans le cas des essais de torsion. Celle-ci est hélicoïdale et orientée à 45° par rapport à l'axe de l'échantillon cylindrique. Ce type de fissuration est caractéristique d'une rupture fragile d'un échantillon sollicité en torsion.

Ces essais montrent que le critère de rupture développé permet de reproduire qualitativement et quantitativement des phénomènes de fissuration fragile pour des sollicitations standards. La prochaine section propose l'étude d'une sollicitation plus complexe au travers de la mise en oeuvre d'essais d'indentation avec indenteur sphérique.

4 Application aux essais d'indentation

Il est proposé d'appliquer ce modèle aux essais d'indentation avec indenteur sphérique sur un matériau supposé élastique fragile : le verre de silice. Dans la perspective ultérieure de simuler les opérations de surfaçage des verres de silice, le rayon de l'indenteur est de dimension micrométrique de façon à correspondre aux échelles dimensionnelles des particules abrasives soit $R = 10\ \mu m$.

4.1 Essai expérimental de référence

Des essais de micro-indentation ont été réalisés. La procédure expérimentale est semblable à celle utilisée dans [22]. Le tableau 2 résume les propriétés mécaniques et géométriques de l'indenteur et de l'échantillon de verre de silice utilisé. L'échantillon endommagé a été ensuite observé par microscopie confoncale. En utilisant la technique de photoluminescence, telle que décrite dans [23], il est possible d'observer la fissuration provoquée par l'essai d'indentation. La figure 7 montre un échantillon d'images obtenues. Il est alors possible grâce à ce type d'observation de mesurer les caractéristiques du cône de Hertz. Celles-ci sont résumées dans le tableau 2.

4.2 Simulation

La figure 8a illustre le modèle numérique d'indentation. L'indenteur est représenté par un élément discret unique. Les actions de contact entre l'indenteur et les éléments discret formant la surface de

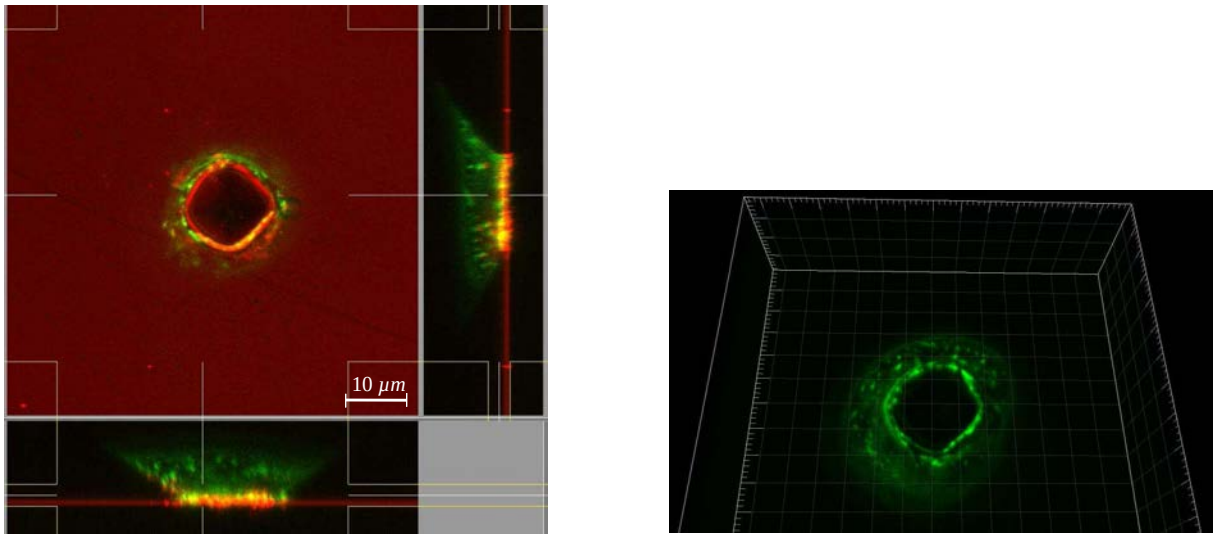
Matériau	Diamant	
Module de Young	1054	*GPa*
Coefficient de Poisson	0,1	
Rayon de l'indenteur	10	μm

(a) Propriétés de l'indenteur.

Matériau	Verre de silice	
Module de Young	72,5	*GPa*
Coefficient de Poisson	0,17	
Rayon de l'échantillon	50	*mm*
Épaisseur de l'échantillon	5	*mm*

(b) Propriétés de l'échantillon de verre de silice.

Tableau 2 – Propriétés de l'indenteur et de l'échantillon de verre de silice.



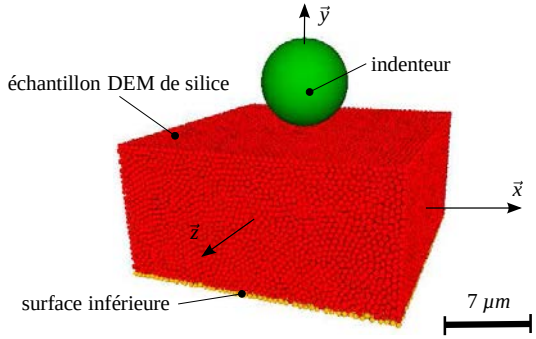
(a) Vues 2D : vue de dessus et de coté

(b) Vue 3D

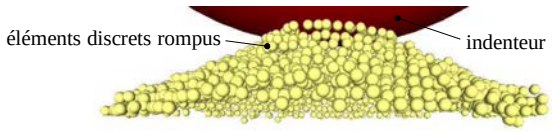
Fig. 7 – Image d'un cône de Hertz réalisée par microscopie confocale associée à une technique de photoluminescence.

Force critique de l'indenteur	P_f	200	*mN*
Angle du cône	a	25-35	°
Longueur du cône	l	8,0-9,2	μm
Diamètre du cône en surface	d	15,0	μm

Tableau 3 – Caractéristiques du cône de Hertz observé expérimentalement.



(a) Modèle DEM d'indentation sphérique.



(b) Image du cône de Hertz simulé.

Fig. 8 – Modèle DEM d'indentation et profil de rupture associé..

		Expérimental	Numérique	
Force critique de l'indenteur	P_f	200	300	mN
Angle du cône	a	25-35	27-28	$^\circ$
Longueur du cône	l	8,0-9,2	7,8-8,3	μm
Diamètre du cône en surface	d	15,0	13,5	μm

Tableau 4 – Caractéristiques du cône de Hertz observé expérimentalement et du cône simulé.

l'échantillon sont calculées suivant la méthode des pénalités. L'échantillon est formée de 80 000 éléments discrets et de 1 040 000 poutres cohésives. Les dimensions de l'échantillon sont de $20 \times 20 \times 10$ μm. Le pas de temps est d'environ $1,5\ 10^{-11}$ s. L'indenteur se déplace à une vitesse imposée suivant $-\vec{y}$ de $0,3\ m.s^{-1}$. Un schéma numérique amortissant est utilisé afin de limiter les effets dynamiques [24]. Enfin, les déplacements suivant $\vec{y}$ des éléments discrets appartenant à la surface inférieure de l'échantillon sont bloqués.

Suivant ces paramètres, la rupture débute pour une force de l'indenteur de 90 mN et l'échantillon numérique est ruiné par une force supérieure à 320 mN. La figure 8b montre la fissuration obtenue pour une force de l'indenteur de 300 mN. Le tableau 4 résume les propriétés du cône de Hertz obtenu en regard des valeurs expérimentales. Les différentes valeurs montrent une bonne adéquation des résultats numériques comparativement aux observations expérimentales.

5 Conclusion

Un critère de rupture appliqué à la méthode des éléments discrets a été développé au cours de cet article. L'étude de convergence montre que ce critère peut être considéré comme indépendant de l'échantillon numérique si celui-ci respecte certains critères d'organisation : isotropie géométrique, cardinalité, compacité et raffinement. Des essais de validation ont également été menés. Les résultats montrent une bonne adéquation de ceux-ci vis-à-vis de la théorie de la résistance des matériaux. Enfin, l'application aux essais d'indentation et les résultats associés montrent que ce modèle peut permettre d'étudier quantitativement des phénomènes de fissurations complexes tels que la génération de cônes de Hertz. Ces résultats encouragent à investiguer et à améliorer le modèle proposé.

Références

[1] P. A. Cundall and O. D. L. Strack. A discrete numerical model for granular assemblies. *Geotechnique*, 29 :47–65, 1979.

[2] S. Hentz, F. V. Donzé, and L. Daudeville. Discrete element modelling of concrete submitted to dynamic loading at high strain rates. *Computers & Structures*, 82(29-30) :2509–2524, 2004.

[3] A. Bobet, A. Fakhimi, S. Johnson, J. Morris, F. Tonon, and M. R. Yeung. Numerical models in discontinuous media : Review of advances for rock mechanics applications. *Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering*, 135(11) :1547–1561, 2009.

[4] Y. Tan, D. Yang, and Y. Sheng. Discrete element method (dem) modeling of fracture and damage in the machining process of polycrystalline sic. *Journal of the European Ceramic Society*, 29(6) :1029–1037, 2009.

[5] M. Ostoja-Starzewski. Lattice models in micromechanics. *Applied Mechanics Reviews*, 55 :35–60, 2002.

[6] Damien André, Ivan Iordanoff, Jean luc Charles, and Jerome Néauport. Discrete element method to simulate continuous material by using the cohesive beam model. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 213–216(0) :113 – 125, 2012.

[7] T. Suratwala, P. Davis, L. Wong, P. Miller, M. Feit, J. Menapace, R. Steele, and D. Walmer. Sub-surface mechanical damage distributions during grinding of fused silica. *Journal of Non-Crystalline Solids*, 352 :5601–5617, 2006.

[8] Heinrich Hertz. *Hertz's Miscellaneous Papers*, volume 55, chapter On hardness, 1882. Macmillan, 1896.

[9] Heinrich Hertz. *Hertz's Miscellaneous Papers*, volume 55, chapter On the contact of elastic solid, 1881. Macmillan, 1896.

[10] P.D. Warren. Determining the fracture toughness of brittle materials by hertzian indentation. *Journal of the European Ceramic Society*, 15(3) :201 – 207, 1995.

[11] Cenk Kocer and Richard E. Collins. Angle of hertzian cone cracks. *Journal of the American Ceramic Society*, 81(7) :1736–1742, 1998.

[12] A. P. S. Selvadurai. Fracture evolution during indentation of a brittle elastic solid. *Mechanics of Cohesive-frictional Materials*, 5(4) :325–339, 2000.

[13] G Geandier, S Denis, and A Mocellin. Float glass fracture toughness determination by hertzian contact : experiments and analysis. *Journal of Non-Crystalline Solids*, 318(3) :284 – 295, 2003.

[14] F. C. Roesler. Brittle fractures near equilibrium. *Proceedings of the Physical Society. Section B*, 69(10) :981, 1956.

[15] E. Rougier, A. Munjiza, and N. W. M. John. Numerical comparison of some explicit time integration schemes used in dem, fem/dem and molecular dynamics. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 61(6) :856–879, 2004.

[16] T. Pöschel and T. Schwager. *Computational granular dynamics*. Springer, 2005.

[17] Hans J. Herrmann. *Random Fluctuations and Pattern Growth : Experiments and Models*, chapter Introduction to modern ideas on fracture patterns. NATO Advanced Study Institutes series. Series E, Applied sciences. Springer, 1988.

[18] E. Schlangen and J. G. M. van Mier. Experimental and numerical analysis of micromechanisms of fracture of cement-based composites. *Cement and Concrete Composites*, 14(2) :105–118, 1992. Special Issue on Micromechanics of Failure in Cementitious Composites.

[19] F. A. Tavarez and M. E. Plesha. Discrete element method for modelling solid and particulate materials. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 70 :379–404, 2007.

[20] Wenjie Shiu, Frederic Victor Donze, and Laurent Daudeville. Discrete element modelling of missile impacts on a reinforced concrete target. *International Journal of Computer Applications in Technology*, 34(1) :33–41, 2009.

[21] Min Zhou. A new look at the atomic level virial stress : on continuum-molecular system equivalence. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 459(2037) :2347–2392, September 2003.

[22] J. Fournier, J. Néauport, P. Grua, V. Jubera, E. Fargin, D. Talaga, and S. Jouannigot. Luminescence study of defects in silica glasses under near-uv excitation. *Physics Procedia*, 8(0) :39 – 43, 2010.

[23] J. Neauport, P. Cormont, P. Legros, C. Ambard, and J. Destribats. Imaging subsurface damage of grinded fused silica optics by confocal fluorescence microscopy. *Opt. Express*, 17(5) :3543–3554, Mar 2009.

[24] Laurent Mahéo, Vincent Grolleau, and Gérard Rio. Damping efficiency of the tchamwa-wielgosz explicit dissipative scheme under instantaneous loading conditions. *Comptes Rendus Mécanique*, 337(11-12) :722–732, 2009.