

Couplage de modèles atomique et continu, propagation dynamique de fissures.

Pascal AUBERTIN

Résumé

La simulation numérique de propagation dynamique de fissures a fait l'objet de nombreux travaux depuis une trentaine d'années, en parallèle avec des essais expérimentaux, afin de mieux caractériser les critères de rupture dynamique. Cependant, les problèmes liés à la simulation ainsi que les difficultés rencontrées dans la mise en oeuvre des expériences rendent encore aujourd'hui ce sujet d'actualité. D'un point de vue numérique, le principal obstacle à surmonter reste le suivi de la fissure au cours du temps. Des méthodes basées sur la partition de l'unité ont été développées depuis quelques années et permettent de capter l'évolution de discontinuités grâce à une formulation enrichie. En particulier, la méthode des éléments finis étendue (X-FEM) a été largement adaptée aux problèmes de propagation dynamique de fissures.

En parallèle de ces méthodes utilisées "classiquement" en mécanique, d'autres types de modélisations, issues de la physique du solide et de la chimie moléculaire, ont été développées pour simuler des comportements à l'échelle atomique. Que ce soient des modèles basés sur la description quantique de la matière ou d'autres se plaçant à l'échelle moléculaire, comme la dynamique moléculaire (MD), ces méthodes sont différentes par nature des techniques usuelles de la mécanique des milieux continus, puisque la matière à leur échelle est discrète. La dynamique moléculaire a déjà été appliquée avec succès à la propagation de fissures mais la principale difficulté rencontrée reste d'ordre numérique puisque les échelles spatiales et temporelles sont très petites.

Notre objectif durant cette thèse a été de relier deux approches, l'une venant de la mécanique des milieux continus, utilisant la technique X-FEM, l'autre se plaçant à l'échelle atomique, la dynamique moléculaire, dans le but de décrire au mieux la propagation dynamique de fissures dans un contexte multi-échelles et multi-modèles. L'utilisation de la méthode X-FEM permet de s'affranchir des problèmes numériques liés à un éventuel remaillage, tandis que la dynamique moléculaire, en pointe de fissure, capte intrinsèquement la propagation. Dans un premier temps, il a donc fallu s'intéresser aux propriétés matériau : la partie continue est supposée élastique linéaire tandis que la description atomique fait intervenir des potentiels non linéaires et non convexes. En utilisant la règle de Cauchy-Born, il est possible d'établir un lien entre les quantités classiques, telles que la déformation et l'opérateur tangent, et le type de potentiel utilisé. Ainsi, dans l'hypothèse des petits déplacements, les deux modèles deviennent cohérents. Ensuite, afin de pouvoir utiliser ces deux approches au sein d'une même structure, nous avons développé une méthode de couplage, basée sur une partition de l'énergie mécanique. L'étude a porté sur un couplage cinématique réalisé grâce à des multiplicateurs de Lagrange et nous avons détaillé le bilan énergétique associé à un tel schéma, dans le cadre de la dynamique explicite. Ce travail a permis d'élaborer une méthode de couplage robuste et conservative, y compris d'un point de vue multi-échelles. Enfin, nous avons étudié la propagation dynamique de fissures dans des cas bidimensionnels. L'implémentation numérique et les techniques utilisées pour gérer la propagation et le suivi de fissures sont détaillés en dernière partie de cette thèse. Des cas de fissuration dynamique sont étudiés et les capacités de la méthode sont confirmées, en particulier pour la gestion de branchements.