

## Modèles macroscopiques sans maillage à motifs microscopiques

Djamel Missoum Benziane, David Ryckelynck, Francisco Chinesta

École Nationale Supérieure des Arts et Métiers  
Laboratoire de Mécanique des Systèmes et des Procédés  
151. BOULEVARD DE L'HOPITAL 75013 PARIS  
djamel.missoum@paris.ensam.fr

### Résumé :

*Nous proposons une nouvelle modélisation des structures macroscopiques exploitant une description microscopique du matériau, dont l'idée clé est l'utilisation d'une méthode sans maillage. Le domaine est découpé en zones microscopiques et en un milieu complémentaire. L'ensemble des zones microscopiques ne recouvre pas tout le domaine. Le comportement est défini par un modèle matériau à l'échelle microscopique uniquement dans les zones microscopiques. Dans le milieu complémentaire le comportement est déduit numériquement à l'aide d'une interpolation de la réponse macroscopique des zones microscopiques. Cette approche peut être qualifiée de numériquement autocohérente. Une méthode itérative du type gradient conjugué permet de construire le champ de déplacement sur tout le domaine et l'extension du comportement dans le milieu complémentaire.*

### Abstract :

*We propose a new approach for macroscopic structures modelling using a microscopic description of the material, the key idea being the use of a mesh free method. The geometrical domain is divided into microscopic zones and a complementary medium. The union of the microscopic zones does not cover the whole domain. The behavior is defined only at the microscopic scale in each microscopic zone. In the complementary medium the behavior is deduced numerically using an interpolation from the macroscopic response of the microscopic zones. This approach can be qualified as numerically self-consistent. An iterative conjugate gradient method allows building the field of displacement in the whole domain and behavior extension in the complementary medium.*

### Mots-clefs :

**multi-échelle ; effets de bord ; comportement interpolé ; méthodes sans maillage ; réduction de modèles ; approche autocohérente**

## 1 Introduction

Actuellement les méthodes expérimentales permettent de mesurer l'évolution de la microstructure de matériaux transformés par des procédés de fabrication. Des comparaisons entre ces mesures et des prévisions issues d'une modélisation permettent d'identifier des paramètres mécaniques des modèles utilisés. Un exemple d'identification de coefficients de frottement en exploitant des micrographies peut être trouvé dans [1]. D'une façon générale pour les procédés de fabrication, il est souhaitable de pouvoir modéliser les effets de bord. Notamment pour comprendre et prévoir l'usure des outils, phénomène activé thermiquement avec la dissipation mécanique comme source de chaleur.

Une façon d'obtenir une réponse macroscopique d'un système à partir d'une description microscopique du comportement du matériau est d'exploiter une méthode d'homogénéisation. Dans [2] on peut trouver une étude bibliographique des ces méthodes. Les approches exploitant une discrétisation de la microstructure (généralement de type éléments finis) sont particulièrement intéressantes. Elles facilitent la modélisation de comportements non linéaires à

l'échelle microscopique, la prise en compte des interactions entre les différentes phases et l'introduction de l'endommagement. Mais ce type d'approche ne permet pas de tenir compte des couplages entre effets de bord et évolution de la microstructure du matériau car les domaines microscopiques considérés sont toujours noyés dans la matière.

Intégrée au calcul de structures, ces méthodes d'homogénéisation permettent de tenir compte de transformations non-linéaires à l'échelle microscopique à l'aide de méthodes multi-niveaux [3] [4]. Le problème des effets de bord inhérent aux méthodes d'homogénéisation reste entier pour ce type de calcul de structures. Pour modéliser l'interaction entre effets de bord et les transformations microscopiques on peut envisager d'utiliser un modèle défini à l'échelle microscopique sur l'ensemble du domaine isolé. Ceci conduit évidemment au traitement d'un très grand nombre d'inconnues. Si l'on dispose d'un ordinateur à architecture parallèle la méthode LATIN [5] exploitant une méthode de décomposition de domaine associée à une discrétisation multi-échelle rend envisageable ce type de simulation. Une autre approche de modélisation consiste en l'utilisation d'un modèle fin uniquement dans certaines régions de la structure. Ce principe a été développé dans le cadre de la méthode ARLEQUIN [6] en superposant deux types de modèles, l'un défini sur l'ensemble de la structure et l'autre restreint uniquement à certaines zones de la structure. Des modèles analytiques et/ou numérique peuvent être superposés. Les champs de déplacement et de contrainte sont dédoublés sur la zone de recouvrement des deux modèles. La compatibilité des déplacements est assurée au sens faible. L'avantage de cette méthode est permettre une modélisation des effets de bord avec un modèle dont la description cinématique peut être beaucoup plus riche que celle utilisée pour le reste de la structure. Nous proposons de développer ce principe de restriction de la modélisation fine à quelques régions, mais avec une approche très différente. En effet nous exploitons un seul type de description cinématique sur l'ensemble du domaine assurant une compatibilité naturelle des déplacements.

## 2 Modélisation et calcul

Afin de simplifier la présentation de la méthode proposée nous considérons le cas de problèmes d'élasticité linéaire pour des transformations quasi-statiques. Soit  $\bar{\Omega}$  le domaine étudié. Le modèle fin restreint est obtenu simplement en augmentant la densité des noeuds dans des zones microscopiques  $\Omega_i$  afin de permettre une description cinématique et une description du matériau cohérentes. Ces zones microscopiques ne recouvrent pas l'ensemble du domaine (Fig. 1). Le reste du domaine  $\Xi$  est appelé milieu complémentaire. Seuls quelques noeuds sont placés dans ce milieu. La répartition des noeuds est donc très hétérogène. La méthode des éléments naturels (NEM) est une méthode sans maillage particulièrement bien adaptée à ce type de répartition. L'utilisation de la méthode des éléments finis est quant à elle exclue du fait de la présence d'éléments très fortement aplatis. Le milieu complémentaire étant un domaine non-convexe, nous utilisons la méthode C-NEM [7] d'une façon classique pour construire la description cinématique. Une des particularités importante de la méthode sans maillage utilisée est de permettre de modéliser les conditions aux limites de la même façon qu'avec des éléments finis linéaires.

Les fonctions de forme de la C-NEM sont calculées à l'aide d'un diagramme de voronoi contraint pour tenir compte de la concavité de la géométrie (Fig. 2). Un rapport d'aire entre des surfaces issues de la superposition de deux diagrammes de voronoi permettent d'obtenir la valeur des fonctions de forme en tout point  $x$  du domaine (Fig. 2).

Le comportement est décrit par un modèle matériau à l'échelle microscopique uniquement dans les zones microscopiques. Dans le milieu complémentaire le comportement est déterminé

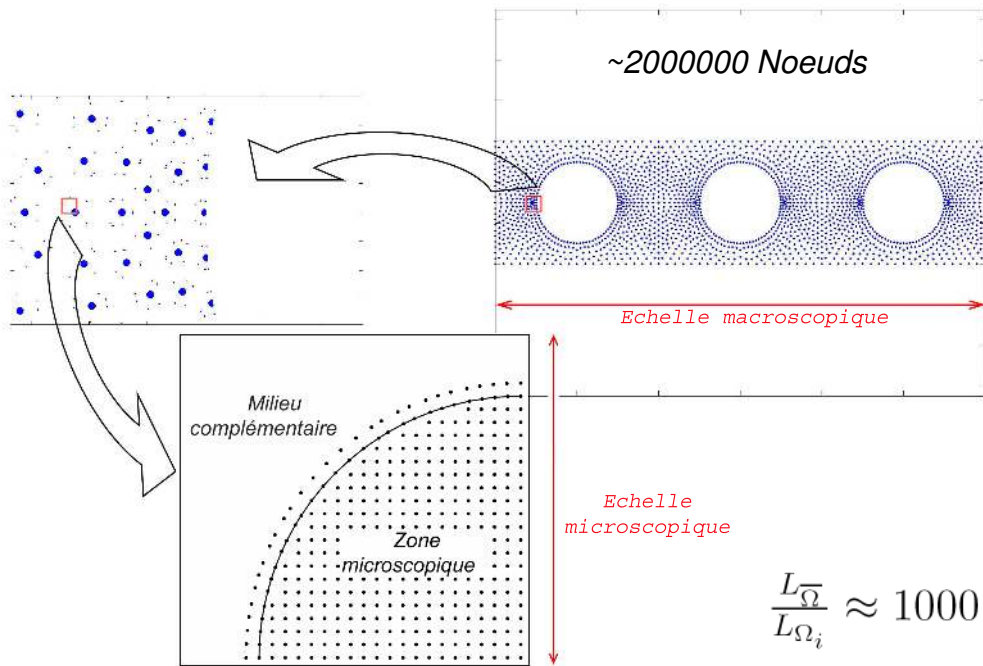


FIG. 1 – Exemple d’une configuration de discrétisation proposée

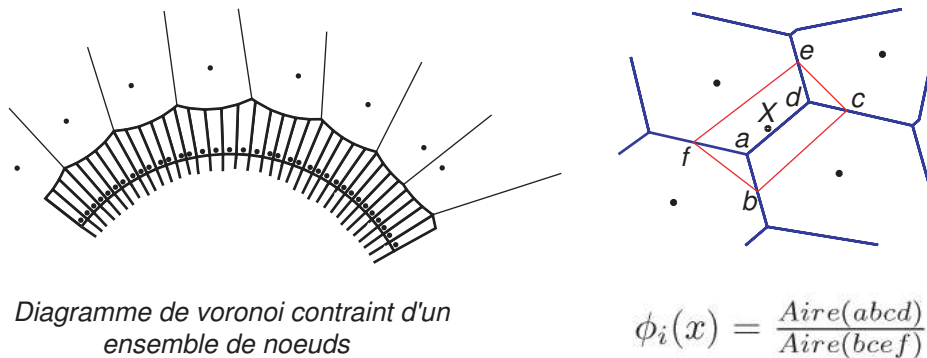


FIG. 2 – Exemple de configuration non convexe, fonctions de forme C-NEM

par une approche numérique. Pour cela nous supposons que la réponse macroscopique est suffisamment régulière entre les zones microscopiques pour mettre en place une technique d’interpolation. La méthode de résolution est itérative. Supposons connu un champ de déplacement  $\vec{u}^{(n)}$  défini sur l’ensemble du domaine. L’indice  $n$  correspond à la version de la prévision des déplacements. L’intégration des relations de comportement dans les domaines microscopiques permet de déterminer l’état de contrainte à l’échelle microscopique. Nous déduisons donc du champ  $\vec{u}^{(n)}$ , pour chaque zone microscopique  $\Omega_i$ , un tenseur de déformation moyen  $\langle \varepsilon^{(n)} \rangle_i$  et un tenseur de contrainte moyen  $\langle \sigma^{(n)} \rangle_i$ . A l’aide de méthode d’homogénéisation classique et de conditions de déformations homogènes sur le contour, nous obtenons une estimation de Voight du tenseur de comportement homogénéisé  $\hat{C}_i$  [8]. Au voisinage de la zone microscopique la relation de comportement reliant la contrainte macroscopique  $\hat{\sigma}$  à la déformation macroscopique  $\hat{\varepsilon}$  peut être estimée par la relation suivante :

$$\hat{\sigma} = \langle \sigma^{(n)} \rangle_i + \hat{C}_i (\hat{\varepsilon} - \langle \varepsilon^{(n)} \rangle_i)$$

Nous en déduisons une formule d'interpolation de la réponse macroscopique des zones microscopique en exploitant des fonctions de forme macroscopiques. Ces fonctions de forme sont construites à l'aide d'un diagramme de voronoi associé exclusivement aux centres des zones microscopiques. Soit  $\widehat{\phi}_i$  la fonction de forme associée au centre de la zone  $\Omega_i$ . En tout point de  $\Xi$ , nous choisissons la relation de comportement macroscopique suivante :

$$\widehat{\sigma}^{(n)} = \sum_i \widehat{\phi}_i \left( \langle \sigma^{(n)} \rangle_i + \widehat{C}_i \left( \widehat{\varepsilon}^{(n)} - \langle \varepsilon^{(n)} \rangle_i \right) \right)$$

Les équations à résoudre étant linéaires, nous construisons la correction du champ de déplacement  $\overline{u}^{(n+1)} - \overline{u}^{(n)}$  par une itération de la méthode du gradient conjugué. Comme pour la méthode du gradient conjugué classique, la qualité de la prévision des déplacements est satisfaisante lorsque les résidus des équations d'équilibre sont suffisamment faibles.

### 3 Étude de convergence

L'objet de l'étude de convergence est de faire une première validation la description cinématique associée à de forte hétérogénéité de densité de noeuds, mais aussi de valider la méthode de déduction du comportement macroscopique dans le milieu intermédiaire. Pour cela nous traitons un problème d'élasticité isotrope et uniforme dont on connaît la solution exacte. Les noeuds du modèle C-NEM sont représentés sur la figure 4.

Chargement :

$$\begin{aligned} x = 0 : F_x &= \frac{2y}{L-1} \\ F_y &= \frac{y}{L(1-y/L)} \\ x = L : F_y &= \frac{y}{L(1-y/L)} \end{aligned}$$

Solution :

$$\begin{aligned} \sigma_{11} &= (2y/L - 1)(x/L - 1) \\ \sigma_{22} &= 0 \\ \sigma_{12} &= y/L (1 - y/L) \end{aligned}$$

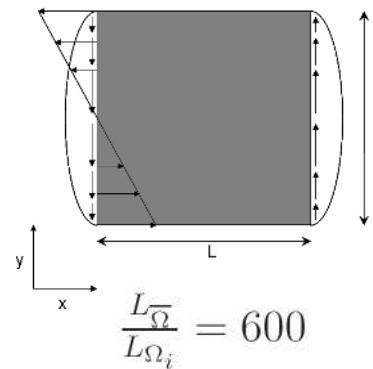


FIG. 3 – Problème test

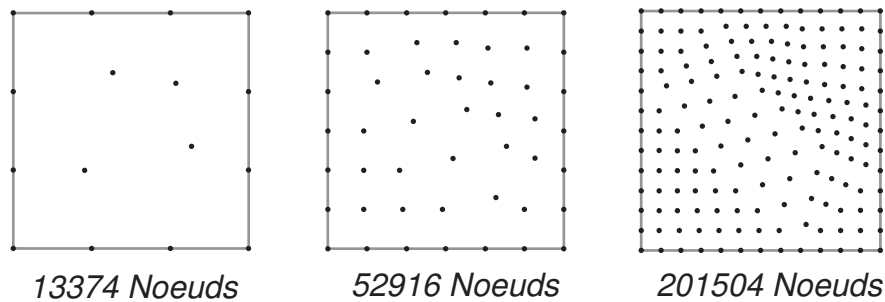


FIG. 4 – Les discrétisations ( seuls les zones microscopiques sont visibles )

Pour quantifier l'erreur de convergence nous utilisons comme critère :

$$\eta^2 = \frac{\int_{\Omega} (\sigma - \sigma_{ex}) C^{-1} (\sigma - \sigma_{ex}) d\Omega}{\int_{\Omega} (\sigma_{ex}) C^{-1} (\sigma_{ex}) d\Omega}$$

où  $C$  est le tenseur de Hooke et  $\sigma_{ex}$  le champ de contrainte exacte.

Le matériau étant à comportement linéaire et uniforme la validation de la méthode de déduction du comportement est triviale. En effet, quel que soit le champ de déplacement  $\vec{u}^{(n)}$  on a :

$$\hat{C}_i^{(n)} = C \quad \langle \sigma^{(n)} \rangle_i = \hat{C}_i \langle \varepsilon^{(n)} \rangle_i$$

De plus, les fonctions de forme C-NEM réalisent la partition de l'unité donc :  $\sum_i \hat{\phi}_i = 1$ . On en déduit donc que le comportement est estimé correctement :

$$\hat{\sigma}^{(n+1)} = C \hat{\varepsilon}^{(n+1)}$$

Il reste donc à montrer que la C-NEM est une méthode performante, même pour le type de nuage de points utilisés. Le graphique montre la valeur de l'indicateur  $\eta_{\Omega}$  pour un domaine  $\Omega$  correspondant à l'union des zones microscopique, mais aussi pour un domaine  $\Omega$  correspondant à tout le domaine étudié  $\bar{\Omega}$ . En remplaçant les noeuds des zones microscopiques par un seul noeud au centre de chaque zone on obtient une courbe de convergence macroscopique  $\hat{\eta}$ .

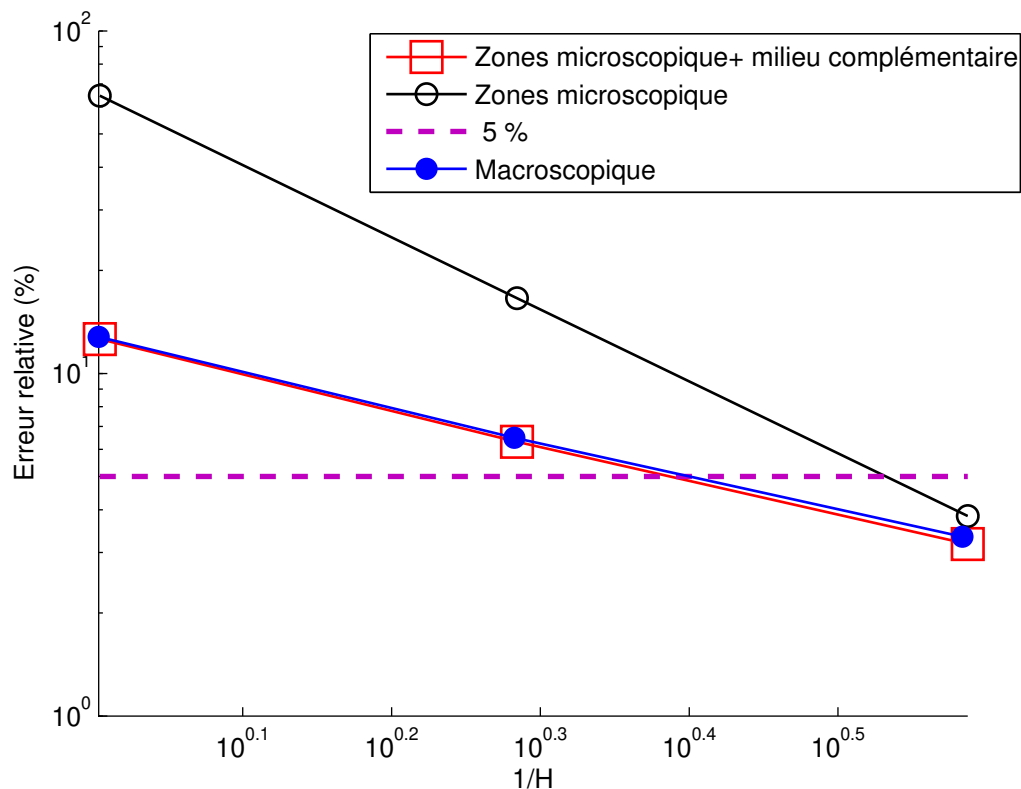


FIG. 5 – courbes de convergence

L'ordre de convergence de la méthode proposée est celui de la C-NEM ( en  $O(h)$  ). Le cas particulier de densités de noeuds très hétérogène ne nuit pas à la convergence de la méthode.

Bien qu'asymptotiquement l'ordre de convergence doit être le même à l'échelle microscopique qu'à l'échelle macroscopique nous observons une superconvergence des prévisions dans les zones microscopiques. La qualité des prévisions est cohérente sur les deux échelles pour un niveau d'erreur raisonnable de l'ordre de 4%, tout en étant très loin d'un recouvrement complet du domaine par les zones microscopiques. Les calculs pour des configurations avec des matériaux hétérogènes sont en cours.

#### 4 Conclusions

Nous utilisons une description cinématique C-NEM sans considération particulière sur les échelles pour le choix des fonctions de forme. Nous ajustons simplement de façon classique la densité des noeuds du modèle. Le matériau n'est décrit que sur une partie du domaine considéré. Nous exploitons un principe de régularité de la réponse macroscopique du matériau pour étendre la réponse des zones microscopiques au reste du domaine étudié. La modélisation de phénomènes localisés doit se faire dans les zones microscopiques. La qualité du modèle est donc fonction de la densité et de la position des zones microscopiques et de la densité des noeuds dans le milieu complémentaire. En plaçant des zones microscopiques sur le bord nous pouvons capter les effets de bord. La méthode de résolution de type gradient conjugué est une étape de développement préliminaire à la mise en place d'une méthode de réduction de modèle.

#### Références

- [1] D. Ryckelynck and M. Meiller. Modélisation du frottement outil-pièce pour la simulation de la coupe par la méthode des éléments finis. *Mécanique et Industries*, 3 :323–332, 2002.
- [2] H.J. Böhm. A short introduction to basic aspects of continuum micromechanics. Technical report, Institute of Lightweight Design and Structural Biomechanics Vienna University of Technology, 1998.
- [3] F. Feyel. A multilevel finite element method  $fe^2$  to describe the response of highly non linear structures using generalized continua. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, (192) :3233–3244, 2003.
- [4] W.A.M. Smit, R.J.M. Brekelmans and H.E.M. Meijer. Prediction of the mechanical behavior of non linear heterogenous systems by multi-level finite element modeling. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, (155) :181–192, 1998.
- [5] P. Ladevèze and D. Dureisseix. Une nouvelle stratégie de calcul micro/macro en mécanique des structures. *Comptes Rendus à l'Académie des Sciences - Mécanique des Solides et des Structures*, (327) :1237–1244, 1999.
- [6] H. Ben Dhia. problèmes mécaniques multi-échelles : la méthode arlequin. *Comptes Rendus à l'Académie des Sciences - Mécanique des Solides et des Structures*, (326) :899–904, 1998.
- [7] J. Yvonnet. A new extension of the natural element method for non-convex and discontinuous problems : the constrained natural element method (c-nem). *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 60 :1451 – 1474, 2003.
- [8] T. Bornert, M. Bretheau and P. Gilormini. *Homogénéisation en mécanique des matériaux 1*. HERMES Science Publication, 2001.