



HAL
open science

Modélisation et simulation multi-échelle des matériaux composites à fort contraste : théorie du gradient du second ordre.

Alioune Nacro, Philippe Karamian, Sophie Lemaitre

► To cite this version:

Alioune Nacro, Philippe Karamian, Sophie Lemaitre. Modélisation et simulation multi-échelle des matériaux composites à fort contraste : théorie du gradient du second ordre.. 16ème Colloque National en Calcul de Structures (CSMA 2024), CNRS; CSMA; ENS Paris-Saclay; CentraleSupélec, May 2024, Hyères, France. hal-04610992

HAL Id: hal-04610992

<https://hal.science/hal-04610992v1>

Submitted on 3 Dec 2024

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Modélisation et simulation multi-échelle des matériaux composites à fort contraste : théorie du gradient du second ordre.

A. NACRO¹, P. KARAMIAN¹, S. LEMAITRE¹,

¹ Normandie Univ, UNICAEN, CNRS, LMNO, 14000 Caen, France, {alioune.nacro, philippe.karamian, sophie.lemaitre}@unicaen.fr

Résumé — Dans cette communication, nous donnons les expressions des tenseurs $A^{0,0}$, $B^{0,1}$, $C^{0,0}$ et $D^{0,0}$ pour les matériaux composites dans le cadre de la théorie du gradient du second ordre. Les simulations numériques sont effectuées avec l'algorithme du schéma accéléré et noyau de Green modifié, le tout couplé avec la librairie MPI/OpenMP pour l'optimisation des temps de calcul. Les simulations numériques en 3D concernent 3 géométries différentes pour lesquelles nous donnons les valeurs numériques des tenseurs, les temps de calcul et leurs classifications.

Mots clés — Modélisation, simulation, matériaux composites, fort contraste, gradient du second ordre.

1 Introduction

Un matériau composite est défini comme un matériau résultant de la combinaison d'au moins deux constituants distincts. Les matériaux composites ont acquis une place de choix dans divers secteurs industriels tels que l'automobile, l'aérospatiale, la construction, le domaine sportif, et de nombreux autres. Pour déterminer numériquement les caractéristiques de ces matériaux composites, deux approches existent, à savoir les approches à champ moyen et celles à champ complet [1]. Ces méthodologies visent à évaluer avec précision les propriétés effectives de ces matériaux dans le cadre de la théorie du premier gradient.

L'objet de cette communication s'intéresse particulièrement aux matériaux composites et périodiques dans la détermination des tenseurs issus de la théorie du second gradient [2]. Ces tenseurs s'obtiennent en résolvant numériquement l'équation de Lippmann-Schwinger. La résolution (de ce problème) utilise la transformée de Fourier rapide avec l'algorithme du schéma accéléré et le noyau de Green modifié [3]. L'objectif est de calculer numériquement ces tenseurs nommés $A^{0,0}$, $B^{0,1}$, $C^{0,0}$ et $D^{0,0}$ [4].

Dans cette communication, nous débuterons en exposant les concepts théoriques liés à la modélisation multi-échelles des matériaux composites, en mettant en évidence la détermination des tenseurs dans le cadre de la théorie du second gradient. Ensuite, nous présenterons les simulations numériques portant sur trois différentes géométries : une avec une inclusion sphérique, une avec une inclusion cylindrique, et une dernière avec une combinaison d'inclusion sphérique et cylindrique. Enfin, nous concluons notre présentation.

2 Approche théorique

Soit Ω un domaine tridimensionnel périodique de période P d'un matériau contenant des hétérogénéités diverses comme illustré dans la Figure 1 avec $\varepsilon = \frac{dl}{L}$ où dl représente le diamètre de l'inclusion et L est une longueur caractéristique du matériau. Dans ce domaine, $x = (x_1, x_2, x_3)$ désigne les coordonnées d'un point, il s'agit de l'échelle macroscopique. Les coordonnées dans le VER (Volume Élémentaire Représentatif) sont notées par $y = \frac{x}{\varepsilon}$ qui représente la mise à l'échelle microscopique [5].

Étant donné des forces extérieures s'exerçant sur le VER l'équilibre mécanique s'écrit :

$$\begin{cases} \operatorname{div}(\boldsymbol{\sigma}^\varepsilon) + f = 0 & \text{dans } \Omega \\ \boldsymbol{\sigma}^\varepsilon = \mathbf{C}^\varepsilon \operatorname{grad}(u^\varepsilon) & \text{dans } \Omega \\ u_{\Gamma_D}^\varepsilon = 0 \end{cases} \quad (1)$$

σ^ε : la contrainte.
 f : la force volumique.
 C^ε : le tenseur de raideur du milieu hétérogène.
 $grad(u^\varepsilon)$: le tenseur de déformation.
 Avec $\varepsilon = \frac{dl}{L}$

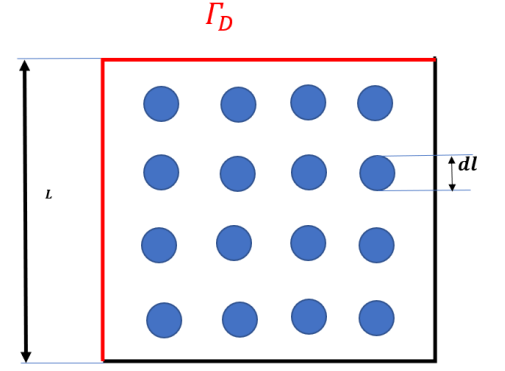


Figure 1 - Matériau hétérogène dans un milieu périodique Ω avec $\varepsilon = \frac{dl}{L}$

On cherche le développement asymptotique de u^ε sous la forme suivante :

$$u^\varepsilon = u^0(x, y) + \varepsilon u^1(x, y) + \varepsilon^2 u^2(x, y) + \varepsilon^3 u^3(x, y) + \dots + O(\varepsilon)$$

Par l'introduction de la nouvelle variable $y = \frac{x}{\varepsilon}$

Les opérations "divergence" et "gradient", notées respectivement div et $grad$, s'écrivent de la façon suivante en prenant en compte les deux échelles :

$$\begin{cases} grad(\cdot) = grad_x(\cdot) + \frac{1}{\varepsilon} grad_y(\cdot) \\ div(\cdot) = div_x(\cdot) + \frac{1}{\varepsilon} div_y(\cdot) \end{cases}$$

où les indices x et y correspondent aux dérivées par rapport aux variables x et y .

$$\dots + O(\varepsilon)$$

Ainsi $grad(u^\varepsilon) = \varepsilon^{-1}(grad_y u^0) + \varepsilon^0(grad_x u^0 + grad_y u^1) + \varepsilon^1(grad_x u^1 + grad_y u^2) + \varepsilon^2(grad_x u^2 + grad_y u^3) + \dots + O(\varepsilon)$

Le problème (1) dans le cadre de l'élasticité se réécrit alors :

$$\begin{cases} div_x(\sigma^\varepsilon) + \frac{1}{\varepsilon} div_y(\sigma^\varepsilon) + f = 0 & \text{dans } \Omega \\ \sigma^\varepsilon = C^\varepsilon grad(u^\varepsilon) & \text{dans } \Omega \\ u_{\Gamma_D}^\varepsilon = 0 \end{cases} \quad (2)$$

En substituant $grad(u^\varepsilon)$ dans l'équation (2), le problème devient :

$$\begin{cases} div_x(\sigma^\varepsilon) + \frac{1}{\varepsilon} div_y(\sigma^\varepsilon) + f = 0 & \text{dans } \Omega \\ \sigma^\varepsilon = C^\varepsilon [\varepsilon^{-1}(grad_y u^0) + \varepsilon^0(grad_x u^0 + grad_y u^1) + \varepsilon^1(grad_x u^1 + grad_y u^2) + \varepsilon^2(grad_x u^2 + grad_y u^3) + \dots + O(\varepsilon)] \\ u_{\Gamma_D}^\varepsilon = 0 \end{cases} \quad (3)$$

σ^ε s'exprime alors sous la forme suivante :

$$\sigma^\varepsilon = \varepsilon^{-1}[C(grad_y u^0)] + \varepsilon^0[C(grad_x u^0 + grad_y u^1)] + \varepsilon^1[C(grad_x u^1 + grad_y u^2)] + \varepsilon^2[C(grad_x u^2 + grad_y u^3)] + \dots + O(\varepsilon)$$

En reportant l'expression de σ^ε dans l'équation d'équilibre (2) nous obtenons :

$$\begin{aligned} & \varepsilon^{-2}(div_y C grad_y u^0) + \varepsilon^{-1}[div_x C grad_y u^0 + div_y C(grad_x u^0 + grad_y u^1)] + \\ & \varepsilon^0[div_x C(grad_x u^0 + grad_y u^1) + div_y C(grad_x u^1 + grad_y u^2)] + \\ & \varepsilon^1[div_x C(grad_x u^1 + grad_y u^2) + div_y C(grad_x u^2 + grad_y u^3)] + \dots + O(\varepsilon) + f = 0 \end{aligned}$$

• **Problème à l'ordre ε^{-2}**

$$\varepsilon^{-2} : \operatorname{div}_y[\mathbf{C} \operatorname{grad}_y u^0] = 0$$

La formulation variationnelle de ce problème pour tout $u^* \in H_{per}^1(P)$ s'écrit encore :

$$\int_P \mathbf{C}(\operatorname{grad}_y u^0) \operatorname{grad}_y u^* dP = 0 \quad \forall u^* \in H_{per}^1(P)$$

On conclut alors que u^0 ne dépend que de x .

• **Problème à l'ordre ε^{-1}**

$$\operatorname{div}_y \mathbf{C}(\operatorname{grad}_x u^0 + \operatorname{grad}_y u^1) = 0$$

La formulation variationnelle de ce problème pour tout $u^* \in H_{per}^1(P)$ conduit à :

$$\int_P \mathbf{C}(\operatorname{grad}_x u^0 + \operatorname{grad}_y u^1) \operatorname{grad}_y u^* dP = 0 \quad \forall u^* \in H_{per}^1(P)$$

On recherche alors une solution $u^1(x, \frac{x}{\varepsilon})$ sous la forme :

$$u^1(x, \frac{x}{\varepsilon}) = U^1(x) + \chi^0(y) : \operatorname{grad}_x(u^0(x))$$

où $U^1(x)$: est la constante d'intégration.

$\chi^0(y)$: est un correcteur.

$\operatorname{grad}_x(u^0(x))$: est la déformation macroscopique .

• **Problème à l'ordre ε^0**

$$\varepsilon^0 : \operatorname{div}_x \mathbf{C}(\operatorname{grad}_x u^0 + \operatorname{grad}_y u^1) + \operatorname{div}_y \mathbf{C}(\operatorname{grad}_x u^1 + \operatorname{grad}_y u^2) + f = 0$$

Par la suite on néglige les forces volumiques.

En effectuant la formulation variationnelle de ce problème pour tout $u^* \in H_{per}^1(P)$ celui-ci s'écrit encore :

$$\int_P \mathbf{C}(\operatorname{grad}_x u^0 + \operatorname{grad}_y u^1) \operatorname{grad}_x u^* dP + \mathbf{C}(\operatorname{grad}_x u^1 + \operatorname{grad}_y u^2) \operatorname{grad}_y u^* dP = 0 \quad \forall u^* \in H_{per}^1(P)$$

Par périodicité l'équation se réduit à :

$$\int_P \mathbf{C}(\operatorname{grad}_x u^0 + \operatorname{grad}_y u^1) \operatorname{grad}_x u^* dP = 0 \quad \forall u^* \in H_{per}^1(P)$$

Pour la suite on notera :

$$e_x = \operatorname{grad}_x \quad \text{et} \quad e_y = \operatorname{grad}_y$$

Dans le cadre de la théorie du gradient du premier ordre, le problème à l'ordre ε^0 conduit à la détermination du tenseur $A^{0,0}$ ou C^{hom} dont l'expression est :

$$A^{0,0} = C^{hom} = \int_P (II + e_y(\chi^0(y))) : \mathbf{C} : (II + e_y(\chi^0(y))) dP$$

• **Problème à l'ordre ε^1**

$$\varepsilon^1 : [\operatorname{div}_x \mathbf{C}(\operatorname{grad}_x u^1 + \operatorname{grad}_y u^2) + \operatorname{div}_y \mathbf{C}(\operatorname{grad}_x u^2 + \operatorname{grad}_y u^3)]$$

En effectuant la formulation variationnelle de ce problème pour tout $u^* \in H_{per}^1(P)$ celui-ci s'écrit encore :

$$\int_P \mathbf{C}(\operatorname{grad}_x u^1 + \operatorname{grad}_y u^2) \operatorname{grad}_x u^* dP + \mathbf{C}(\operatorname{grad}_x u^2 + \operatorname{grad}_y u^3) \operatorname{grad}_y u^* dP = 0 \quad \forall u^* \in H_{per}^1(P)$$

Par périodicité l'équation se réduit à :

$$\int_P \mathbf{C}(\operatorname{grad}_x u^1 + \operatorname{grad}_y u^2) \operatorname{grad}_x u^* dP = 0 \quad \forall u^* \in H_{per}^1(P)$$

Nous déduisons l'expression de u^2 à partir de l'expression de u^1 qui s'écrit :

$$u^2(x, \frac{x}{\varepsilon}) = U^2(x) + \chi^0(y) : E^1(x) + \chi^1(y) : e_x(e_x u^0(x))$$

ou $U^2(x)$: est la constante d'intégration.

$E^1(x) = grad_x(U^1(x))$: désigne le gradient de la constante d'intégration.

$\chi^0(y)$ et $\chi^1(y)$ sont des correcteurs.

$grad_x(grad_x u^0(x))$: désigne le gradient du tenseur des déformations macroscopiques.

En remplaçant l'expression de $(grad_x u^1 + grad_y u^2)$ et $(grad_x u^0 + grad_y u^1)$ dans l'équation alors l'équation devient :

$$\int_P e_x(u^0)(II + e_y(\chi^0(y))) : \mathbf{C} : ((II + e_y(\chi^0(y))) : E^1(x)) dP + \int_P e_x(u^0)(II + e_y(\chi^0(y))) : \mathbf{C} : \chi^0(y) : e_x(e_x(u^0)) dP + \int_P e_x(u^0)(II + e_y(\chi^0(y))) : \mathbf{C} : e_y(\chi^1(y)) : e_x(e_x(u^0)) dP = 0$$

Dans le cadre de la théorie du gradient du second ordre, le problème à l'ordre ε^1 conduit à la détermination de trois tenseurs $B^{0,1}$, $C^{0,0}$ et $D^{0,0}$ dont les expressions sont :

$$B^{0,1} = \int_P (II + e_y(\chi^0(y))) : \mathbf{C} : (II + e_y(\chi^0(y))) dP$$

$$C^{0,0} = \int_P (II + e_y(\chi^0(y))) : \mathbf{C} : \chi^0(y) dP$$

$$D^{0,0} = \int_P (II + e_y(\chi^0(y))) : \mathbf{C} : e_y(\chi^1(y)) dP$$

• Algorithme du schéma accéléré avec le noyau de Green modifié pour élasticité

L'algorithme utilisé pour le calcul du tenseur homogénéisé $A^{0,0}$ est basé sur le schéma accéléré et noyau de Green modifié. Les tenseurs $B^{0,1}$ et $C^{0,0}$ sont obtenus en évaluant à la fois le gradient du déplacement et le déplacement. L'expression de l'opérateur de Green modifié est donné par :

$$\widehat{\Gamma}_{ijkl}^0(r) = \frac{(\lambda^0 + 2\mu^0)(r_i r_l^* \delta_{jk})_{sym} + \lambda^0 [(r_i r_l^* s_{jk})_{sym} - Re(r_i r_j^*) Re(r_k r_l^*)] - \mu^0 r_i r_j r_k^* r_l^*}{\mu^0 [2(\lambda^0 + \mu^0) - \lambda^0 |r_1^2 + r_2^2 + r_3^2|^2]}$$

où $r_i = \frac{k_i}{|k|}$, $r_i^* = \frac{k_i^*}{|k^*|}$ où k et k^* représentent respectivement les opérateurs de gradient et de divergence "discrets" et s est le tenseur symétrique du second ordre :

$s_{jj} = 4Im(r_i r_k^*)^2$, $s_{jk} = -4Im(r_k r_j^*) Im(r_k r_i^*)$, $i \neq j \neq k \neq i$ avec $Im(\cdot)$ la partie imaginaire de la quantité complexe.

Algorithme du schéma accéléré en élasticité :

Initialiser : $\varepsilon^0(\mathbf{x}) \equiv \mathbf{E}$

Fixer le critère de convergence $acc = 10^{-4}$.

Tant que (non convergence)

1. Test de convergence :
 - Si ($\varepsilon_{comp} < acc$)
 - Alors calculer $\sigma(\mathbf{x}) = \mathbb{C}(\mathbf{x})\varepsilon^n(\mathbf{x})$, $\widehat{\sigma}(\xi) = FFT(\sigma)$,
 - $\varepsilon_{eq} = \sqrt{\langle \|\widehat{\xi}\widehat{\sigma}(\xi)^n\| \rangle / \|\widehat{\sigma}(\mathbf{0})\|}$
 - Si ($\varepsilon_{eq} < acc$)
 - Alors arrêt (il y a convergence)
2. $\tau^n(\mathbf{x}) = (\mathbb{C}(\mathbf{x}) + \mathbb{C}^0)\varepsilon^n(\mathbf{x})$
3. $\widehat{\tau}^n(\xi) = FFT(\tau^n)$
4. $\widehat{\varepsilon}_{comp}^n(\xi) = \widehat{\Gamma}^0(\xi)\widehat{\tau}^n(\xi)$, $\xi \neq \mathbf{0}$
 $\widehat{\varepsilon}_{comp}^n(\mathbf{0}) = \mathbf{E}$
5. $\varepsilon_{comp}^n(\mathbf{x}) = FFT^{-1}(\widehat{\varepsilon}_{comp}^n)$
6. $\varepsilon_{comp} = \sqrt{\langle \|\varepsilon^n - \varepsilon_{comp}^n\|^2 \rangle} / \|\mathbf{E}\|$
7. $\varepsilon^{n+1}(\mathbf{x}) = \varepsilon^n(\mathbf{x}) - 2(\mathbb{C}(\mathbf{x}) - \mathbb{C}^0)^{-1}\mathbb{C}^0(\varepsilon_{comp}^n(\mathbf{x}) - \varepsilon^n(\mathbf{x}))$

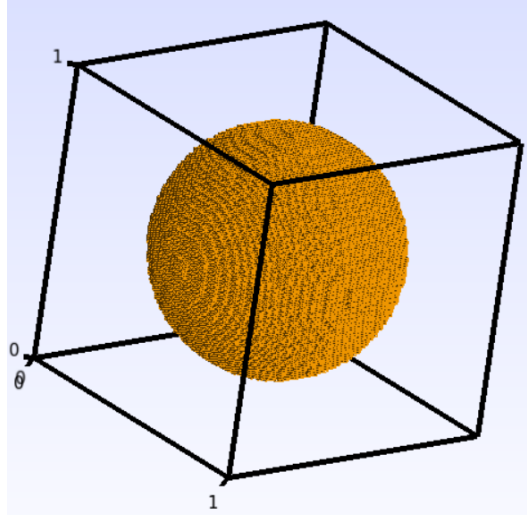
A convergence, nous calculons $\langle \sigma(\mathbf{x}) \rangle$ et nous obtenons \mathbb{C}^{hom} à l'aide de l'égalité : $\langle \sigma(\mathbf{x}) \rangle = \mathbb{C}^{hom} : \langle \varepsilon(\mathbf{x}) \rangle = \mathbb{C}^{hom} : \mathbf{E}$.

3 Simulation numérique

Nous avons réalisé trois simulations numériques distinctes. Tout d'abord, nous avons généré un VER avec une inclusion sphérique. Ensuite, nous avons créé un VER comportant une inclusion cylindrique. Enfin, la troisième simulation combine à la fois une inclusion sphérique et un cylindre.

3.1 Cas d'une inclusion Sphérique

Nous avons effectué une simulation numérique d'un VER composé d'une inclusion sphérique dont la fraction volumique est de 25 % avec un contraste de 1000 et une résolution de 256^3 .



Après avoir mené la simulation numérique, nous avons obtenu les tenseurs $A^{0,0}$ ou C^{hom} , $B^{0,1}$ et $C^{0,0}$ suivants :

$$A^{0,0} \text{ ou } C^{hom} = \begin{bmatrix} +2.53659 & +0.99693 & +0.99693 & +0.00000 & +0.00000 & -0.00000 \\ +0.99693 & +2.53659 & +0.99693 & +0.00000 & +0.00000 & -0.00000 \\ +0.99693 & +0.99693 & +2.53651 & -0.00000 & -0.00000 & +0.00000 \\ -0.00000 & -0.00000 & -0.00000 & +0.60464 & -0.00000 & +0.00000 \\ -0.00000 & -0.00000 & -0.00000 & -0.00000 & +0.60464 & +0.00000 \\ -0.00000 & -0.00000 & -0.00000 & +0.00000 & +0.00000 & +0.60466 \end{bmatrix}$$

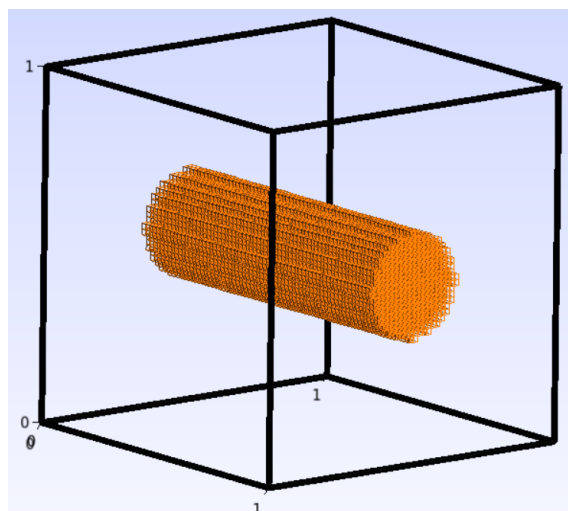
$$B^{0,1} = \begin{bmatrix} +2.53659 & +0.99693 & +0.99693 & +0.00000 & +0.00000 & -0.00000 \\ +0.99693 & +2.53659 & +0.99693 & +0.00000 & +0.00000 & -0.00000 \\ +0.99693 & +0.99693 & +2.53651 & -0.00000 & -0.00000 & +0.00000 \\ -0.00000 & -0.00000 & -0.00000 & +0.60464 & -0.00000 & +0.00000 \\ -0.00000 & -0.00000 & -0.00000 & -0.00000 & +0.60464 & +0.00000 \\ -0.00000 & -0.00000 & -0.00000 & +0.00000 & +0.00000 & +0.60466 \end{bmatrix}$$

$$C^{0,0} = \begin{bmatrix} +0.69244 & +0.22240 & +0.22238 \\ +0.22240 & +0.69244 & +0.22238 \\ +0.22239 & +0.22239 & +0.69238 \\ -0.00000 & -0.00000 & -0.00000 \\ -0.00000 & -0.00000 & -0.00000 \\ -0.00000 & -0.00000 & -0.00000 \end{bmatrix}$$

À partir des résultats obtenus, nous observons que les tenseurs $A^{0,0}$ et $B^{0,1}$ sont identiques et symétriques, ce qui est conforme aux résultats théoriques. Avec ces tenseurs $A^{0,0}$ et $B^{0,1}$, nous sommes en mesure de déterminer le groupe de symétrie auquel appartient le VER. L'outil de classification du tenseur indique que le tenseur $A^{0,0}$ est isotrope, conforme à la théorie. Par ailleurs, nous notons que le tenseur $C^{0,0}$ présente des valeurs non nulles et de l'ordre de l'unité. En l'absence des forces volumiques le tenseur $D^{0,0}$ est nul.

3.2 Cas d'une inclusion cylindrique

Nous avons effectué une simulation numérique d'un VER composé d'une inclusion cylindrique dont la fraction volumique est de 10 % avec un contraste de 1000 et une résolution de 256^3 .



Après avoir mené la simulation, nous avons obtenu les tenseurs $A^{0,0}$ ou C^{hom} , $B^{0,1}$ et $C^{0,0}$ suivants :

$$A^{0,0} \text{ ou } C^{hom} = \begin{bmatrix} +50.74293 & +0.79944 & +0.79944 & -0.00000 & +0.00000 & +0.00000 \\ +0.80522 & +1.60760 & +0.79072 & -0.00000 & +0.00000 & +0.00000 \\ +0.80522 & +0.79072 & +1.60760 & -0.00000 & +0.00000 & +0.00000 \\ -0.00000 & +0.00000 & +0.00000 & +0.40712 & +0.00000 & +0.00000 \\ +0.00000 & +0.00000 & +0.00000 & +0.00000 & +0.41664 & -0.00000 \\ +0.00000 & +0.00000 & +0.00000 & +0.00000 & -0.00000 & +0.41664 \end{bmatrix}$$

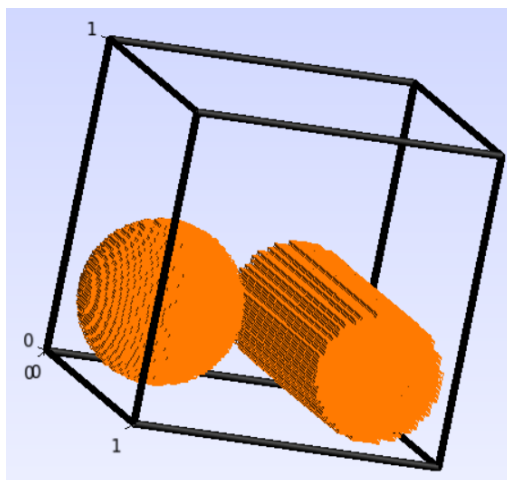
$$B^{0,1} = \begin{bmatrix} +50.74293 & +0.79944 & +0.79944 & -0.00000 & +0.00000 & +0.00000 \\ +0.80522 & +1.60760 & +0.79072 & -0.00000 & +0.00000 & +0.00000 \\ +0.80522 & +0.79072 & +1.60760 & -0.00000 & +0.00000 & +0.00000 \\ -0.00000 & +0.00000 & +0.00000 & +0.40712 & +0.00000 & +0.00000 \\ +0.00000 & +0.00000 & +0.00000 & +0.00000 & +0.41664 & -0.00000 \\ +0.00000 & +0.00000 & +0.00000 & +0.00000 & -0.00000 & +0.41664 \end{bmatrix}$$

$$C^{0,0} = \begin{bmatrix} +385.62904 & -121.70058 & -121.70058 \\ -115.55844 & +36.71955 & +36.54889 \\ -115.55844 & +36.54889 & +36.71955 \\ -0.00000 & +0.00000 & +0.00000 \\ +0.00000 & +0.00000 & +0.00000 \\ +0.00000 & +0.00000 & +0.00000 \end{bmatrix}$$

De ces résultats, nous observons que les tenseurs $A^{0,0}$ et $B^{0,1}$ sont identiques et symétriques, ce qui est conforme aux résultats théoriques. Les tenseurs $A^{0,0}$ et $B^{0,1}$ avec l'outil développé de classification en groupe de symétrie indique que le tenseur $A^{0,0}$ ou C_{hom} est tétragonal conforme à la théorie. Par ailleurs, les valeurs non nulles du tenseur $C^{0,0}$ sont élevées en cohérence avec le contraste choisi et la non-isotropie du tenseur homogénéisé. En l'absence des forces volumiques le tenseur $D^{0,0}$ est nul.

3.3 Cas d'une inclusion sphérique et cylindrique

Nous avons effectué une simulation numérique d'un VER composé d'une inclusion sphérique et cylindrique dont la fraction volumique totale est de 25 % avec un contraste de 1000 et une résolution de 256^3 .



Après avoir mené la simulation, nous avons obtenu les tenseurs $A^{0,0}$ ou C^{hom} , $B^{0,1}$ et $C^{0,0}$ suivants :

$$A^{0,0} \text{ ou } C^{hom} = \begin{bmatrix} +2.45111 & +0.90085 & +1.03860 & +0.00000 & -0.00000 & -0.00000 \\ +0.90085 & +2.01694 & +0.94702 & +0.00000 & -0.00000 & -0.00000 \\ +1.04510 & +0.95491 & +127.17035 & +0.00000 & +0.00000 & -0.00000 \\ -0.00000 & -0.00000 & +0.00000 & +0.52054 & -0.00000 & -0.00000 \\ -0.00000 & -0.00000 & +0.00000 & -0.00000 & +0.64457 & +0.00000 \\ +0.00000 & +0.00000 & -0.00000 & -0.00000 & +0.00000 & +0.50498 \end{bmatrix}$$

$$B^{0,1} = \begin{bmatrix} +2.45111 & +0.90085 & +1.03860 & +0.00000 & -0.00000 & -0.00000 \\ +0.90085 & +2.01694 & +0.94702 & +0.00000 & -0.00000 & -0.00000 \\ +1.04510 & +0.95491 & +127.17035 & +0.00000 & +0.00000 & -0.00000 \\ -0.00000 & -0.00000 & +0.00000 & +0.52054 & -0.00000 & -0.00000 \\ -0.00000 & -0.00000 & +0.00000 & -0.00000 & +0.64457 & +0.00000 \\ +0.00000 & +0.00000 & -0.00000 & -0.00000 & +0.00000 & +0.50498 \end{bmatrix}$$

$$C^{0,0} = \begin{bmatrix} +247.32160 & +249.30677 & -764.70193 \\ +249.37246 & +252.14876 & -772.49372 \\ -780.29953 & -788.15715 & +2417.92395 \\ -0.00000 & -0.00000 & +0.00001 \\ -0.00000 & -0.00000 & +0.00000 \\ +0.00000 & +0.00000 & -0.00000 \end{bmatrix}$$

De ces résultats, nous observons que les tenseurs $A^{0,0}$ et $B^{0,1}$ sont identiques et symétriques, ce qui est conforme aux résultats théoriques. Les tenseurs $A^{0,0}$ et $B^{0,1}$ avec l'outil développé de classification en groupe de symétrie indique que le tenseur $A^{0,0}$ ou C_{hom} est orthotrope conforme à la théorie. Par ailleurs, les valeurs non nulles du tenseur $C^{0,0}$ sont élevées en cohérence avec le contraste choisi et la non-isotropie du tenseur homogénéisé. En l'absence des forces volumiques le tenseur $D^{0,0}$ est nul.

3.4 Temps de simulation

VER	Temps avec MPI/OpenMP (s)	Temps sans MPI/OpenMP (s)	Gain
Inclusion sphérique	769.038	4228.67	5.49
Inclusion cylindrique	998.336	4857.35	5
Inclusion sphérique/cylindrique	349.886	1400.87	4

L'intégration de la librairie MPI/OpenMP dans la simulation numérique offre un avantage en réduisant efficacement les temps de calcul avec un gain de facteur 4 minimal. Cette optimisation du temps de traitement améliore considérablement l'efficacité globale de la simulation.

Nous précisons que la simulation numérique est réalisée sur le cluster Myria, spécialement conçu pour une utilisation en mode partagé. Les travaux sont soumis en batch au travers de l'environnement de soumission Slurm. Toutes les informations détaillées sont disponibles dans la section "Guide d'utilisation" à la référence [6].

4 Conclusion

Nous avons développé un code de calcul robuste et fiable pour déterminer les tenseurs issus de la théorie du second gradient pour des matériaux composites périodiques à contraste élevé. Ce code écrit en C++ parallélisé à la fois en MPI et OpenMP permet de lancer des grandes cohortes de calcul dans le cas des études paramétriques morphologiques, statistiques. Ces tenseurs jouent un rôle prépondérant pour étudier l'endommagement et la fatigue des matériaux composites. Nos perspectives sont l'adaptation du code de calcul pour un lancement sur des processeurs GPU afin de traiter des VER de grande taille, et la construction de bases de données.

Remerciements

Nous remercions le Centre Régional Informatique et d'Applications Numériques de Normandie (CRIANN) pour ses ressources informatiques. Ce travail est financé par la Région Normandie (100 % RIN).

Références

- [1] Sophie Lemaitre. *Modélisation des matériaux composites multiphasiques à microstructures complexes. Étude des propriétés effectives par des méthodes d'homogénéisation*. PhD thesis, Université de CAEN Normandie, 2017.
- [2] Raymond David Mindlin. Second gradient of strain and surface-tension in linear elasticity. *International Journal of Solids and Structures*, 1(4) :417–438, 1965.
- [3] François Willot. Fourier-based schemes for computing the mechanical response of composites with accurate local fields. *Comptes Rendus Mécanique*, 343(3) :232–245, 2015.
- [4] Sami Ben Elhaj Salah. *Modélisation non-locale et stochastique de matériaux à fort gradient de propriétés par développement asymptotique*. PhD thesis, ISAE-ENSMA Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique-Poitiers, 2019.
- [5] Jacqueline Sanchez-Hubert and Évariste Sanchez-Palencia. *Introduction aux méthodes asymptotiques et à l'homogénéisation : application à la mécanique des milieux continus*. Masson, 1992.
- [6] <https://services.criann.fr/services/hpc/cluster-myria/guide/>.