



HAL
open science

Contributions aux méthodes numériques pour traiter les non linéarités et les discontinuités dans les matériaux hétérogènes

Eric Monteiro

► To cite this version:

Eric Monteiro. Contributions aux méthodes numériques pour traiter les non linéarités et les discontinuités dans les matériaux hétérogènes. Autre. Université Paris-Est, 2010. Français. <NNT : 2010PEST1079>. <tel-00601050>

HAL Id: tel-00601050

<https://hal.science/tel-00601050v1>

Submitted on 16 Jun 2011

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.



HAL Authorization

UNIVERSITE PARIS-EST

ANNÉE 2010

THÈSE

pour l'obtention du grade de

DOCTEUR de L'UNIVERSITE PARIS-EST

Spécialité : **Mécanique**

préparée au

Laboratoire Modélisation et Simulation Multi Echelle

rattaché à l'École Doctorale **SIE**

présentée par

Eric MONTEIRO

Titre:

Contributions aux méthodes numériques pour traiter les non linéarités et les discontinuités dans les matériaux hétérogènes

soutenue publiquement le 11 mars 2010

devant le jury composé de

Anthony GRAVOUIL	Rapporteur
Lalaonirina RAKOTOMANANA	Rapporteur
Pierre VILLON	Examineur
Xuguang WANG	Examineur
Julien YVONNET	Examineur
Qi-Chang HE	Directeur de thèse

Remerciements

Avant de tourner la page sur cette aventure, à la fois scientifique et humaine, qu'est une thèse, je souhaite exprimer mes plus vifs remerciements à mon directeur de thèse, Qi-Chang He, pour sa patience et sa confiance sans lesquelles cette thèse n'aurait jamais abouti... Sa passion et sa rigueur m'ont, sans nul doute, été précieuses durant ces trois années. Je tiens également à remercier Julien Yvonnet pour la disponibilité dont il a fait preuve à mon égard et l'aide scientifique qu'il m'a apportée tout au long de ce travail. Je remercie aussi Atef Asnacios pour ses discussions passionnées sur la biomécanique.

Mes remerciements vont également à Anthony Gravouil et Lalaonirina Rakotomanana pour avoir accepté la pénible tâche de rapporteur et pris part à mon jury. Je remercie aussi Pierre Villon, président de jury, et Xuguang Wang pour avoir consacré un peu de leur temps en assistant à ma soutenance et en jugeant ce travail.

Je suis reconnaissant envers Guy Bonnet et Christian Soize de m'avoir accueilli au sein du laboratoire Modélisation et Simulation Multi Echelle et offert de bonnes conditions de travail. Je pense également à Isabelle Bressan et Marine Daniel pour leur gestion au quotidien des aléas administratifs. Je n'oublie pas Christophe Desceliers pour la gestion et la maintenance des ressources informatiques nécessaires pour mener à bien ce travail.

Je remercie chaleureusement tous les membres, présents ou passés, du laboratoire MSME que j'ai, de près ou de loin, côtoyés. Un grand merci aux BIATOS, aux ATER, aux maîtres de conférence et aux professeurs. Je remercie également mes camarades de galère, à savoir les doctorants, pour leur bonne humeur et l'ambiance sympathique qu'ils assuraient jour après jour.

Je terminerai ces remerciements par ma famille qui m'a accompagné et supporté pendant cette aventure, notamment Carina et Rosa. J'adresse enfin une pensée vers Abel...

Résumé

Motivé par l'étude de tissus biologiques, ce travail contribue au développement d'outils numériques permettant de prédire la réponse mécanique de matériaux hétérogènes non linéaires dans lesquels les énergies d'interfaces deviennent prépondérantes. Aussi, une méthode d'homogénéisation numérique connue sous le nom de méthode des éléments finis multi-niveaux est mise en oeuvre pour l'analyse de composites hyperélastiques et pour le problème de conduction non linéaire. Celle-ci résout simultanément deux problèmes éléments finis, l'un à l'échelle macroscopique et l'autre à l'échelle microscopique. Plus précisément, il s'agit d'associer à chaque point d'intégration macroscopique un volume élémentaire représentatif du matériau afin de déterminer la relation contraintes-déformations locale. Cette démarche étant coûteuse, une méthode de réduction de modèle basée sur la décomposition orthogonale aux valeurs propres (POD) est appliquée aux équations de l'échelle la plus petite. Cette alliance, combinée à une parallélisation, montre son efficacité en terme de temps de calcul pour des problèmes de conduction fortement non linéaire.

Ensuite, des énergies d'interfaces entre les différentes phases d'un composite sont introduites. Dans les structures micro et nanométriques, ces énergies sont décrites par des modèles d'interfaces imparfaites de type cohérent : le champ de déplacement est continu à la traversée de l'interface tandis que le vecteur de contraintes y est discontinu et vérifie l'équation de Young-Laplace généralisée. Ainsi, ces effets sont modélisés par une approche liant la méthode des éléments finis étendus (XFEM) à la technique des fonctions de niveau. Cette association permet à la fois une gestion simple de microstructures complexes et le calcul des termes liés aux énergies d'interfaces sans ajout d'un système de coordonnées curvilignes. La performance de cette approche est démontrée par la comparaison des résultats numériques aux solutions analytiques établies dans ce travail pour l'analyse de composites hyperélastiques.

Enfin, la modélisation et la simulation de l'étalement d'une cellule vivante entre deux lames fixes sont réalisées. Les deux modèles proposés, l'un purement élastique et l'autre biphasique, mettent en avant deux parties, à savoir le cortex d'actine associé à la membrane plasmique et le reste de la cellule. Les simulations reproduisent de façon satisfaisante les résultats expérimentaux en terme d'évolution de géométrie et de force générée.

Mots-clés : Homogénéisation non linéaire, Grandes déformations, Méthode multi-échelle, Réduction de modèle, Interfaces imparfaites, XFEM/Level-set, Etalement de cellule.

Abstract

Motivated by the study of biological tissues, this work contributes to developing numerical tools to predict the mechanical response of nonlinear heterogeneous materials in which the energies of interfaces can no longer be ignored. First, a computational homogenization strategy based on the multilevel finite element method is implemented in the cases of large elastic deformations and highly nonlinear conduction. This technique requires solving two boundary value problems by finite elements at the same time: one at the macroscopic scale and the other at the microscopic level. More precisely, a representative volume element is associated with each integration point of the macrostructure in order to determine the local constitutive behaviour. This approach is computationally expensive. To alleviate the costs, a model reduction technique based on the proper orthogonal decomposition (POD) is used in tandem with parallel computations. Both accuracy and efficiency are examined through numerical tests involving thermal and electrical nonlinear conduction problems. Then, the interfaces between the different phases of a composite are described by means of imperfect interface models. In micro and nano composites, interfaces can be characterized by a coherent interface model in which the displacement field is continuous across the interface while the stress vector is discontinuous and has to satisfy the generalized Young-Laplace equation. Numerically, those interface effects are taken into account by an extended finite element method (XFEM) combined with a level-set technique. This approach allows the generation of complex microstructures and the evaluation of the additional interfacial energy terms without resorting to a system of curvilinear coordinates. The numerical results obtained for the analysis of hyperelastic composites are compared and discussed with respect to the relevant analytical ones derived in the present work. Finally, experimental results of single cell spreading between two fixed parallel microplates are exploited through finite element modelling. Our model includes two distinct components representing the cortex associated with the bilayer membrane on the one hand, and the rest of the cell on the other hand. The former is modelled as a homogeneous hyperelastic material while the latter is idealized either as a homogeneous hyperelastic material or a quasi-incompressible Newtonian fluid. The kinetic of spreading is ensured by a stapling procedure defined from experimental observations. Materials parameters are optimized to match the simulation closely with the experiment.

Keywords: Nonlinear homogenization, Large deformations, Multi-scale method, Model reduction, Imperfect interfaces, XFEM/Level-set, Cell spreading.

Table des matières

Table des matières	vii
Introduction générale	1
I Formulations et résolutions par éléments finis de problèmes en élasticité et conduction non linéaire	5
I.1 Formulation des problèmes	5
I.1.1 Cinématique	5
I.1.2 Statique et équation d'équilibre	8
I.1.3 Lois de comportement hyperélastique	9
I.1.4 Matériaux à contraintes internes	12
I.1.5 Exemples de fonctions densités d'énergie	13
I.1.6 Conduction thermique	16
I.2 Méthodes numériques	17
I.2.1 Formulations forte et faible du problème élastique	17
I.2.2 Linéarisation du problème	19
I.2.3 Résolution de système linéaire	20
I.2.4 Discrétisation par éléments finis	20
I.2.5 Discrétisation du problème thermique	23
I.3 Implémentations et exemples numériques	25
I.3.1 Validation du code élastique	25
I.3.2 Validation du code thermique	27
II Une méthode d'homogénéisation numérique avec réduction de modèle	31
II.1 Rappel sur l'homogénéisation	32
II.1.1 Stratégie	32
II.1.2 Homogénéisation par potentiel	34

II.2	Homogénéisation non linéaire avec réduction de modèle	36
II.2.1	Méthode des éléments finis multi-niveaux en élasticité	36
II.2.2	Méthode des éléments finis multi-niveaux en conduction	39
II.2.3	Réduction de modèle	42
II.2.4	Parallélisation	48
II.3	Applications	49
II.3.1	Tests de validation	49
II.3.2	Analyse à deux échelles de la conduction non linéaire dans un composite	54
II.4	Conclusion	59

**III Une approche XFEM/level-set pour le traitement des interfaces
imparfaites en grandes déformations 63**

III.1	Modélisation des interfaces imparfaites	64
III.1.1	Éléments de géométrie différentielle	64
III.1.2	Relations d'Hadamard	66
III.1.3	Construction du modèle	67
III.2	Solutions analytiques	71
III.2.1	Traction simple	72
III.2.2	Torsion simple	74
III.2.3	Cisaillement anti-plan	75
III.2.4	Sphère sous pression	77
III.3	Méthode XFEM pour le traitement des interfaces imparfaites cohé- rentes en grandes déformations	78
III.3.1	Méthode level-set	78
III.3.2	Méthode XFEM	80
III.3.3	Formulation variationnelle et discrétisation	85
III.4	Exemples numériques	89
III.4.1	Sphère composite sous pression	89
III.4.2	Extension d'un cylindre composite	90
III.4.3	Torsion d'un cylindre composite	94
III.4.4	Combinaison de l'approche multi-échelle avec le traitement des interfaces imparfaites	96
III.4.5	Effet de taille	98
III.5	Conclusion	100

IV Etude de l'étalement de cellules animales vivantes	101
IV.1 Aspects biomécaniques	102
IV.1.1 Le cytosquelette	103
IV.1.2 Techniques expérimentales dédiées à l'étude de la cellule . . .	104
IV.1.3 Modèles mécaniques	106
IV.1.4 Résultats expérimentaux	106
IV.2 Modélisation et simulation	108
IV.2.1 Modélisation	108
IV.2.2 Simulations	112
IV.3 Conclusion	122
Conclusions et Perspectives	123
Bibliographie	127

TABLE DES MATIÈRES

Introduction générale

Les tissus biologiques sont généralement classés en deux catégories suivant leurs propriétés mécaniques. On distingue ainsi les tissus durs comme les os ou les dents et les tissus mous comme la peau ou les muscles. Ces derniers, couramment soumis à de grandes déformations, exhibent des comportements fortement non linéaires proches de ceux des caoutchoucs en première approximation [53]. Ces observations, combinées à une microstructure hétérogène complexe, rend difficile la prédiction de leur réponse mécanique à une sollicitation donnée.

Un outil efficace pour caractériser cette réponse consiste à mettre en oeuvre une méthode d'homogénéisation. Ces techniques, bien développées en élasticité linéaire [22, 149], restent limitées en transformations finies malgré les efforts faits ces dernières années. Plus précisément, l'homogénéisation non linéaire repose sur la linéarisation du problème puis sur la résolution du problème linéarisé à l'aide des schémas d'homogénéisation linéaire. Deux approches se dégagent, à savoir celle en moyenne et celle en potentiel. La première consiste à déterminer la relation contraintes-déformations du matériau hétérogène en attribuant à chaque phase qui le constitue un comportement linéaire dépendant de la déformation ou de la contrainte moyenne. La seconde, adaptée aux élastomères, cherche un potentiel macroscopique décrivant la réponse du matériau hétérogène sachant que chaque phase est également caractérisée par un potentiel. Ces approches analytiques conduisent à l'estimation ou l'encadrement des propriétés effectives des matériaux hétérogènes sous d'importantes restrictions [20, 37, 66, 67, 95, 96, 113, 120].

Pour pallier ce défaut, une alternative possible est l'utilisation de techniques numériques [47–49, 56, 79, 85, 98, 135, 147, 156]. Celles-ci permettent de traiter à la fois des microstructures complexes, des chargements arbitraires et des matériaux fortement non linéaires. Ces méthodes, pour la plupart concourantes, se basent sur un

modèle faisant intervenir deux échelles couplées, à savoir l'échelle macroscopique où la loi de comportement est inconnue et l'échelle microscopique où chaque phase peut être décrite sans restriction. Dans ce contexte, la méthode des éléments finis multi-niveaux est largement utilisée : il s'agit de résoudre simultanément au moins deux problèmes éléments finis, l'un à l'échelle macro et l'autre à l'échelle micro. L'idée principale consiste à associer, à chaque point d'intégration du domaine macroscopique, un volume élémentaire représentatif de la microstructure afin de déterminer la relation contraintes-déformations locale. Néanmoins, le coût de calculs liés à cette approche simultanée entre les deux échelles est prohibitif si bien que des méthodes de décomposition de domaine et de calculs parallèles ont été proposées afin de les alléger.

Dans le présent travail, il convient d'introduire à cette démarche des énergies d'interface compte-tenu de l'échelle des différents éléments composant un tissu. Ces énergies jouent un rôle reconnu dans la réponse mécanique de structures micro et nanométriques [26, 35, 40, 45, 63]. Physiquement, elles peuvent être vues comme une généralisation de la notion de tension de surface entre deux fluides ou encore comme une zone de transition de faible épaisseur dans laquelle les propriétés mécaniques sont différentes de celles de phases adjacentes. Leur modélisation s'effectue au moyen de modèles d'interfaces imparfaites dont un cadre mathématique rigoureux a été établi de différentes façons et par différents auteurs [17–19, 58–60, 64, 81, 108, 140]. Les deux modèles les plus courants sont celui de type ressort et celui cohérent. Dans le premier, le vecteur de contraintes est continu à la traversée de l'interface tandis que le champ de déplacement présente un saut proportionnel à l'état de contraintes. Dans le second, le champ de déplacement est continu alors que le vecteur de contraintes ne l'est pas.

La prise en compte de ces effets dans un problème éléments finis s'apparente à l'introduction de discontinuités dans la microstructure. Une des difficultés réside dans la réalisation du maillage puisque celui-ci doit se conformer aux surfaces de discontinuités et que des éléments de surface doivent être ajoutés afin d'évaluer les termes liés aux énergies d'interfaces [54, 109]. Une alternative consiste à permettre à un élément fini de contenir plusieurs matériaux [46, 61, 100, 138, 141]. On peut citer en particulier la méthode des éléments finis étendus (XFEM) basée sur la partition de l'unité. Dans cette technique, les interfaces n'ont pas besoin d'être maillées : elles

sont représentées implicitement par des fonctions de niveau [116]. Les discontinuités sont alors prises en compte par un enrichissement construit également à partir des fonctions de niveau (voir par exemple [13, 16, 102, 103, 141, 142, 158, 159]).

L'objectif de ce travail de thèse est de développer des outils numériques permettant de prédire la réponse mécanique de matériaux hétérogènes non linéaires dans lesquels les énergies d'interfaces deviennent prépondérantes. Dans un premier temps, une méthode d'homogénéisation multi échelle de type FE^2 combinée à une technique de réduction de modèle basée sur la décomposition orthogonale aux valeurs propres (POD) est mise en oeuvre pour l'analyse de composites hyperélastiques ainsi que pour le problème de conduction thermique non linéaire. Ensuite, un modèle d'interface imparfaite cohérent est dérivé dans un cadre hyperélastique afin de modéliser les énergies d'interfaces dans les nanocomposites. Une procédure numérique associant la méthode des éléments finis étendus à la technique level-set est alors mise en place en vue de prendre en compte ces énergies numériquement sans ajout d'élément de surface ni de système de coordonnées curvilignes. Les différentes méthodes développées montrent leur performance au travers d'exemples et de comparaisons à des solutions de référence. Enfin, une étude de l'étalement d'une cellule vivante le long de deux lamelles fixes est réalisée. Plus précisément, il s'agit de vérifier l'influence de la membrane plasmique et du cortex d'actine sur la réponse mécanique de la cellule.

Ainsi, ce mémoire se décompose en trois parties. La première, comportant deux chapitres, porte sur l'homogénéisation non linéaire de matériaux hétérogènes dans un cadre thermique ou hyperélastique. Après quelques rappels sur l'élasticité en grandes déformations, la méthode éléments finis multi échelles FE^2 est détaillée. Une technique visant à réduire les coûts de calculs élevés est proposée. Celle-ci consiste à projeter le système d'équations de l'échelle la plus petite sur une base réduite de type POD.

La seconde partie, formée d'un seul chapitre, traite de la prise en compte des interfaces imparfaites dans la méthode FE^2 . Après avoir résumé des éléments de base de géométrie différentielle ainsi que les relations d'Hadamard, un modèle d'interfaces imparfaites est généralisé pour les matériaux hyperélastiques. Des solutions exactes sont déterminées afin de servir de benchmarks à la méthode numérique développée ensuite. Celle-ci combine la méthode des éléments finis étendus et celle de level-set

pour modéliser les sauts à la traversée des interfaces sans ajout d'éléments.

La troisième partie est consacrée à l'étude de l'étalement de cellules vivantes. Après quelques rappels sur les aspects biologiques et mécaniques du comportement cellulaire, deux modèles continus sont proposés pour modéliser la cellule : l'un hyperélastique et l'autre biphasique. Des simulations sont conduites afin de reproduire l'étalement d'une cellule entre deux micro plaques. Les résultats numériques sont comparés à des résultats expérimentaux fournis par l'équipe de Physique du vivant du laboratoire Matière et Systèmes Complexes de l'université Paris VII.

Chapitre I

Formulations et résolutions par éléments finis de problèmes en élasticité et conduction non linéaire

Ce chapitre introductif se décompose en deux parties. La première balaie un certain nombre de concepts et modèles se rapportant à l'élasticité non linéaire ainsi qu'au problème thermique. La seconde, quant à elle, porte sur les méthodes numériques employées pour résoudre ces deux problèmes. Inspirés des ouvrages classiques notamment [33, 75, 82, 114], les développements suivants fixent les notations adoptées dans ce mémoire et permettent de développer les codes éléments finis de base.

I.1 Formulation des problèmes

I.1.1 Cinématique

On considère un solide déformable \mathcal{B} occupant, à l'instant initial, un domaine ouvert Ω_0 de \mathbb{R}^3 dont la surface est notée $\partial\Omega_0$. Cet état supposé naturel, c'est-à-dire libre de contraintes, est appelé ci-après configuration de référence ou configuration initiale. Soumis à des forces extérieures et/ou à des déplacements sur sa frontière, le solide se déplace et se déforme de sorte qu'il occupe un nouveau domaine de \mathbb{R}^3 noté Ω de frontière $\partial\Omega$. Ce domaine correspond à la configuration déformée ou actuelle. Le problème essentiel en élasticité consiste à déterminer cette nouvelle configuration.

Pour cela, tout point matériel M_0 de Ω_0 est localisé par le vecteur position \mathbf{X}

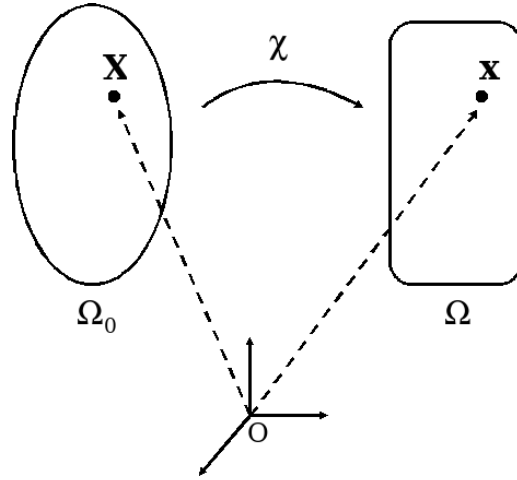


FIG. I.1 – Configurations d'un solide continu.

dans un repère orthonormé fixe. Après déformation, cette particule occupe le point M de Ω repéré par le vecteur \mathbf{x} . La description dite Lagrangienne de ce mouvement est classiquement donnée, à chaque instant, par la transformation χ :

$$\mathbf{x} = \chi(\mathbf{X}, t) \quad (\text{I.1})$$

où χ est une fonction vectorielle continûment différentiable et inversible. Par la suite, on omettra la dépendance en temps de toutes les quantités en faisant l'hypothèse de déformations quasi-statiques. En vue d'une approche numérique, il convient d'introduire le champ de déplacement \mathbf{u} :

$$\mathbf{u} = \mathbf{x} - \mathbf{X}. \quad (\text{I.2})$$

Contrairement à l'élasticité linéaire, le déplacement ne peut pas être supposé petit. De ce fait, les deux configurations introduites ne peuvent pas être confondues et chaque grandeur doit être définie sur l'une ou l'autre des configurations. Cependant, certaines sont définies à cheval sur les deux. L'une d'elles, et non des moindres, est le gradient de déformation noté \mathbf{F} traduisant le transport convecté de Ω_0 vers Ω d'un vecteur matériel de longueur infinitésimale :

$$\mathbf{F} = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{X}} = \mathbf{I} + \nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{u} \quad (\text{I.3})$$

où \mathbf{I} et $\nabla_{\mathbf{X}}$ désignent respectivement le tenseur identité d'ordre 2 et l'opérateur gradient par rapport à la configuration initiale. Le tenseur \mathbf{F} permet également de

déterminer la transformation d'un élément infinitésimal de surface et de volume. Ainsi, désignant par \mathbf{N} la normale unitaire à un élément de surface dS de Ω_0 et \mathbf{n} celle de l'élément de surface correspondant ds de Ω , il vient la formule de Nanson

$$\mathbf{n}ds = J\mathbf{F}^{-T}\mathbf{N}dS \quad (\text{I.4})$$

où $J = \det \mathbf{F}$. De plus, un élément de volume dV de Ω_0 se transforme en un élément de volume dv de Ω par $dv = JdV$. L'utilisation du principe de conservation de la masse conduit à

$$J = \frac{\rho_0}{\rho} \quad (\text{I.5})$$

où ρ_0 et ρ représentent la masse volumique dans les configurations initiale et actuelle respectivement. Il vient alors la contrainte

$$\det \mathbf{F} > 0. \quad (\text{I.6})$$

Il est à noter que cette condition est automatiquement vérifiée pour des matériaux incompressibles puisque, dans ce cas, $\det \mathbf{F}$ est égal à 1.

Enfin, à partir de \mathbf{F} , on introduit deux tenseurs largement utilisés pour construire les lois de comportement, à savoir les tenseurs de Cauchy Green droit \mathbf{C} et gauche \mathbf{B} définis respectivement par :

$$\mathbf{C} = \mathbf{F}^T\mathbf{F} \quad \text{et} \quad \mathbf{B} = \mathbf{F}\mathbf{F}^T. \quad (\text{I.7})$$

Le premier décrit les déformations dans la configuration de référence tandis que le second les décrit dans la configuration déformée. Il convient d'introduire deux familles de mesures de déformation, l'une dans Ω_0 ,

$$\mathbf{E}_n = \frac{1}{n} (\mathbf{C}^{\frac{n}{2}} - \mathbf{I}) \quad \text{pour } n \neq 0, \quad (\text{I.8})$$

$$\mathbf{E}_0 = \frac{1}{2} \ln \mathbf{C} \quad \text{pour } n = 0, \quad (\text{I.9})$$

et l'autre dans Ω ,

$$\mathbf{e}_n = \frac{1}{n} (\mathbf{B}^{\frac{n}{2}} - \mathbf{I}) \quad \text{pour } n \neq 0, \quad (\text{I.10})$$

$$\mathbf{e}_0 = \frac{1}{2} \ln \mathbf{B} \quad \text{pour } n = 0. \quad (\text{I.11})$$

Le cas particulier $n = 2$ dans Ω_0 conduit au tenseur de déformation de Green-Lagrange tandis que $n = -2$ dans Ω amène le tenseur d'Euler-Almansi.

I.1.2 Statique et équation d'équilibre

Une fois les grandeurs cinématiques introduites, il convient de s'intéresser à l'état de contraintes dans le solide, c'est-à-dire aux efforts internes générés par les différentes sollicitations mécaniques. Ces efforts de cohésion $d\mathbf{f}$ exercés sur un élément de surface ds de la configuration actuelle Ω sont caractérisés par une densité surfacique de force \mathbf{t} qui dépend uniquement de l'orientation \mathbf{n} . Plus précisément, cette densité dépend linéairement de \mathbf{n} de sorte que

$$d\mathbf{f} = \mathbf{t} ds = \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} ds \quad (\text{I.12})$$

où $\boldsymbol{\sigma}$ est le tenseur de contraintes de Cauchy. L'équilibre des moments conduit à la symétrie de ce tenseur du second ordre. La configuration déformée n'étant pas forcément connue, il convient de transporter ce champ de contraintes dans la configuration initiale, ce qui conduit à la définition d'autres tenseurs de contraintes. Deux approches sont envisageables. La première consiste à transporter l'élément de surface de Ω vers Ω_0 par la formule de Nanson telle que

$$d\mathbf{f} = \boldsymbol{\sigma} J \mathbf{F}^{-T} \mathbf{N} dS = \mathbf{P} \mathbf{N} dS \quad (\text{I.13})$$

où $\mathbf{P} = J \boldsymbol{\sigma} \mathbf{F}^{-T}$ désigne le premier tenseur de Piola-Kirchhoff ou tenseur de Bousinesq. Ce tenseur non-symétrique est à cheval sur les deux configurations et doit satisfaire la propriété $\mathbf{P} \mathbf{F}^T = \mathbf{F} \mathbf{P}^T$. La seconde approche consiste à transporter de Ω vers Ω_0 à la fois l'élément de surface et les efforts de cohésion. Ainsi, on a

$$d\mathbf{f}_0 = \mathbf{F}^{-1} d\mathbf{f} = \mathbf{S} \mathbf{N} dS \quad (\text{I.14})$$

où $\mathbf{S} = J \mathbf{F}^{-1} \boldsymbol{\sigma} \mathbf{F}^{-T}$ représente le second tenseur de Piola-Kirchhoff. Contrairement au précédent, ce tenseur est symétrique et défini sur la configuration initiale.

Le dernier point à rappeler dans cette partie concerne les équations régissant l'équilibre mécanique du solide. L'une d'elles est obtenue en considérant le principe de conservation de la quantité de mouvement dans la configuration déformée. Sous l'hypothèse de déformations quasi-statiques, les forces d'inertie peuvent être négligées, ce qui conduit classiquement à

$$\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{g} = \mathbf{0} \quad \text{dans } \Omega \quad (\text{I.15})$$

où \mathbf{g} représente les forces volumiques exercées dans Ω . Cette relation est difficile à utiliser en pratique. Il s'avère souvent plus commode de travailler dans la configuration initiale. Ainsi, en utilisant l'identité de Piola, à savoir $\operatorname{Div} J \mathbf{F}^{-T} = \mathbf{0}$, combinée

au transport du principe d'inertie [75], on obtient

$$\operatorname{div}_X \mathbf{P} + \mathbf{G} = \mathbf{0} \quad \text{dans } \Omega_0 \quad (\text{I.16})$$

où $\mathbf{G} = J\mathbf{g}$ désigne les forces volumiques exercées dans Ω_0 . Les opérateurs div et div_X correspondent à la divergence exprimée dans les configurations actuelle et initiale respectivement. Il est à noter que la présence de \mathbf{P} donne à cette équation un caractère "mixte", c'est-à-dire qu'elle est définie à cheval sur les deux configurations.

Par la suite, on privilégiera les grandeurs Lagrangiennes, c'est-à-dire celles définies dans la configuration initiale. Pour des compléments, le lecteur peut se référer à [33, 75, 114].

I.1.3 Lois de comportement hyperélastique

A ce stade, les équations établies ne suffisent pas à résoudre le problème mécanique étudié. Il est nécessaire de préciser la relation liant les contraintes aux déformations, c'est-à-dire la loi de comportement qui caractérise le matériau. Dans ce travail, on se restreint aux matériaux hyperélastiques, c'est-à-dire aux matériaux élastiques caractérisés par l'existence d'une énergie de déformation W dépendant uniquement de l'état de déformation actuel :

$$W = W(\mathbf{F}). \quad (\text{I.17})$$

Ce potentiel doit satisfaire le principe d'objectivité ou d'indifférence matérielle. Il s'agit de s'assurer qu'il est indépendant de la position et de l'orientation du référentiel d'observation. Autrement dit, il doit être invariant dans toute rotation de la configuration courante, ce qui se traduit par

$$W(\mathbf{F}) = W(\mathbf{QF}) \quad (\text{I.18})$$

où \mathbf{Q} est un tenseur de rotation vérifiant $\mathbf{Q}^{-1} = \mathbf{Q}^T$ et $\det \mathbf{Q} = 1$. Ainsi, en utilisant la décomposition polaire de \mathbf{F} , soit $\mathbf{F} = \mathbf{R}\mathbf{U}$, et en choisissant judicieusement \mathbf{Q} , par exemple $\mathbf{Q} = \mathbf{R}^T$, on montre que cette densité d'énergie est objective si elle est exprimée en fonction de \mathbf{U} , \mathbf{C} ou \mathbf{E} (voir [5]) :

$$W(\mathbf{F}) \equiv W_u(\mathbf{U}) \equiv W_c(\mathbf{C}) \equiv W_e(\mathbf{E}). \quad (\text{I.19})$$

Outre l'objectivité, le potentiel élastique doit vérifier des conditions de croissance : l'énergie à fournir pour réduire à zéro ou étirer à l'infini un volume élémentaire de matière doit être infinie, ce qui implique

$$W(\mathbf{F}) \rightarrow \infty \quad \text{lorsque } \det \mathbf{F} \rightarrow 0 \quad (\text{I.20})$$

$$W(\mathbf{F}) \rightarrow \infty \quad \text{lorsque } \det \mathbf{F} \rightarrow \infty. \quad (\text{I.21})$$

Une condition supplémentaire peut être définie lorsque le solide n'est soumis à aucune sollicitation. Cette condition, connue sous le nom de normalisation, requiert que le potentiel s'annule dans la configuration de référence, à savoir

$$W(\mathbf{I}) = 0. \quad (\text{I.22})$$

Enfin, le potentiel doit également satisfaire des conditions issues de symétries matérielles dues à une géométrie interne identique dans différentes directions. Ces conditions traduisent donc l'invariance de celui-ci dans ces directions. L'une des plus simples est l'isotropie pour laquelle toutes les directions sont équivalentes. La réponse mécanique du solide est alors indépendante de la direction de sollicitation. Cette propriété s'écrit

$$W(\mathbf{F}) = W(\mathbf{F}\mathbf{Q}^T). \quad (\text{I.23})$$

En combinant cette propriété au principe d'objectivité, on montre qu'un potentiel exprimé en fonction de \mathbf{C} , \mathbf{E} ou \mathbf{B} est nécessairement isotrope. Les théorèmes de représentation permettent de représenter ce potentiel par une fonction scalaire dont les arguments sont les trois invariants de \mathbf{C} (\mathbf{B} ou \mathbf{E}) :

$$W = W(I_1(\mathbf{C}), I_2(\mathbf{C}), I_3(\mathbf{C})) \quad (\text{I.24})$$

avec

$$I_1(\mathbf{C}) = \text{tr } \mathbf{C} \quad (\text{I.25})$$

$$I_2(\mathbf{C}) = \frac{1}{2} [(\text{tr } \mathbf{C})^2 - \text{tr } \mathbf{C}^2] \quad (\text{I.26})$$

$$I_3(\mathbf{C}) = \det \mathbf{C}. \quad (\text{I.27})$$

Pour d'autres symétries matérielles, les trois invariants de \mathbf{C} ne suffisent plus. Il est donc nécessaire d'ajouter des variables au potentiel. Il a été établi, dans [137], que le potentiel d'un matériau anisotrope peut s'exprimer en fonction de \mathbf{C} et de tenseurs d'anisotropie construits à partir des vecteurs liés aux directions privilégiées.

A titre d'exemple, le potentiel d'un matériau isotrope transverse dont la direction privilégiée correspond au vecteur \mathbf{E}_1 est de la forme

$$W = W(I_1(\mathbf{C}), I_2(\mathbf{C}), I_3(\mathbf{C}), I_4(\mathbf{C}), I_5(\mathbf{C})) \quad (\text{I.28})$$

où

$$I_4(\mathbf{C}) = \mathbf{C} : \mathbf{E}_1 \otimes \mathbf{E}_1 \quad \text{et} \quad I_5(\mathbf{C}) = \mathbf{C}^2 : \mathbf{E}_1 \otimes \mathbf{E}_1. \quad (\text{I.29})$$

D'autres formes ont été proposées dans la littérature. Le lecteur peut se référer à [137] ou, plus récemment, à [78, 132]. Dans ce mémoire, on se limitera aux matériaux isotropes.

A présent, il ne reste plus qu'à établir les relations contraintes-déformations qui découlent d'une approche thermodynamique. Plus précisément, l'utilisation du second principe dans différentes configurations et en absence d'effet thermique conduit à l'écriture des tenseurs de contraintes en fonction du potentiel choisi. Ainsi, on a

$$\mathbf{P} = \frac{\partial W(\mathbf{F})}{\partial \mathbf{F}} \quad \text{en description mixte,} \quad (\text{I.30})$$

$$\mathbf{S} = 2 \frac{\partial W(\mathbf{C})}{\partial \mathbf{C}} \quad \text{en description Lagrangienne.} \quad (\text{I.31})$$

Sous l'hypothèse d'isotropie, la variation du potentiel W par rapport à \mathbf{C} s'écrit

$$\frac{\partial W}{\partial \mathbf{C}} = \frac{\partial W}{\partial I_1} \frac{\partial I_1}{\partial \mathbf{C}} + \frac{\partial W}{\partial I_2} \frac{\partial I_2}{\partial \mathbf{C}} + \frac{\partial W}{\partial I_3} \frac{\partial I_3}{\partial \mathbf{C}} \quad (\text{I.32})$$

avec

$$\frac{\partial I_1}{\partial \mathbf{C}} = \mathbf{I}, \quad \frac{\partial I_2}{\partial \mathbf{C}} = I_1 \mathbf{I} - \mathbf{C} \quad \text{et} \quad \frac{\partial I_3}{\partial \mathbf{C}} = I_3 \mathbf{C}^{-1}. \quad (\text{I.33})$$

En notant que $I_3 = J^2$, on a

$$\mathbf{S} = 2 \left(\frac{\partial W}{\partial I_1} + I_1 \frac{\partial W}{\partial I_2} \right) \mathbf{I} - 2 \frac{\partial W}{\partial I_2} \mathbf{C} + \frac{\partial W}{\partial J} J \mathbf{C}^{-1}. \quad (\text{I.34})$$

Une relation similaire peut être obtenue pour le premier tenseur de Piola-Kirchhoff. Celle-ci s'obtient au moyen de dérivations par rapport au gradient de déformation, à savoir

$$\frac{\partial I_1}{\partial \mathbf{F}} = 2\mathbf{F} \quad \frac{\partial I_2}{\partial \mathbf{F}} = 2\mathbf{F}(I_1 \mathbf{I} - \mathbf{C}) \quad \text{et} \quad \frac{\partial I_3}{\partial \mathbf{F}} = I_3 \mathbf{F}^{-T}. \quad (\text{I.35})$$

I.1.4 Matériaux à contraintes internes

Outre les conditions évoquées précédemment, un matériau peut présenter un comportement particulier comme l'incompressibilité ou l'inextensibilité dans une direction notée \mathbf{E}_1 . Ce comportement se traduit par une contrainte interne que l'on exprime généralement en fonction du gradient de déformation. En guise d'exemple, l'incompressibilité et l'inextensibilité s'écrivent respectivement

$$c(\mathbf{F}) = \det \mathbf{F} - 1 = 0 \quad \text{et} \quad c(\mathbf{F}) = \mathbf{C} : \mathbf{E}_1 \otimes \mathbf{E}_1 - 1 = 0. \quad (\text{I.36})$$

Ces contraintes qui doivent satisfaire le principe d'objectivité sont prises en compte dans le potentiel élastique. Pour cela, diverses techniques issues de l'optimisation peuvent être employées. Parmi les plus courantes, on trouve la méthode des multiplicateurs de Lagrange, la méthode de pénalité, celle du Lagrangien perturbé ou encore celle du Lagrangien augmenté. On se propose ici de rappeler la forme que prend le potentiel dans chacune de ces approches.

Méthode de pénalité

Cette méthode n'introduit aucune inconnue supplémentaire. Il s'agit de traiter le matériau incompressible comme un matériau compressible de module de compressibilité tendant vers l'infini. Le potentiel s'écrit

$$W = W(\mathbf{F}) + \frac{\beta}{2} (c(\mathbf{F}))^2 \quad (\text{I.37})$$

où β , paramètre de pénalité, doit être nettement supérieur aux autres paramètres du modèle : plus sa valeur est importante, plus la contrainte sera respectée. Cependant, cette augmentation dégrade le conditionnement du système associé.

Méthode des multiplicateurs de Lagrange

Cette technique dite multi-champs contraint le potentiel au moyen d'un (ou plusieurs) multiplicateurs de Lagrange :

$$W = W(\mathbf{F}) + p c(\mathbf{F}). \quad (\text{I.38})$$

Dans le cas de l'incompressibilité, ce multiplicateur de Lagrange est assimilable à la pression hydrostatique. Contrairement à celle qui précède, cette méthode ajoute des inconnues au problème et rend la matrice associée non définie positive. D'un point de vue analytique, c'est l'approche privilégiée car la contrainte est vérifiée exactement.

Méthode du Lagrangien perturbé

Cette méthode consiste en une régularisation du système précédent par l'ajout d'un terme de perturbation au potentiel, à savoir

$$W = W(\mathbf{F}) + p c(\mathbf{F}) + \frac{\epsilon}{2} p^2 \quad (\text{I.39})$$

où ϵ est un réel positif le plus petit possible. Le cas extrême $\epsilon = 0$ ramène à la méthode précédente. A l'image de ce qui est fait en éléments finis linéaires, cette formulation peut être utilisée pour décrire des matériaux compressibles.

Méthode du Lagrangien augmenté

Cette approche apparaît comme une combinaison de la méthode de pénalité et celle des multiplicateurs de Lagrange :

$$W = W(\mathbf{F}) + p c(\mathbf{F}) + \frac{\beta}{2} (c(\mathbf{F}))^2 + \frac{\epsilon}{2} p^2. \quad (\text{I.40})$$

Elle tire ses avantages des deux méthodes tout en réduisant leurs inconvénients. En pratique, on observe que l'augmentation de β compense la diminution de ϵ .

I.1.5 Exemples de fonctions densités d'énergie

La littérature regorge de modèles de fonctions densités d'énergie. Certaines ont été élaborées de façon phénoménologique, à savoir par identification du potentiel W reproduisant au mieux le comportement macroscopique observée. Essentiellement basée sur des considérations mathématiques, cette approche s'oppose à celle plus physique tendant à intégrer des phénomènes microscopiques dans leur formulation. On ne présente, dans ce travail, que les modèles les plus courants.

Modèle de Mooney-Rivlin

Ce modèle, développé pour un matériau isotrope incompressible pour lequel l'effort de cisaillement est proportionnel à la déformation de cisaillement, s'exprime uniquement en fonction des deux premiers invariants de \mathbf{C} ($I_3 = 1$). Sa forme est :

$$W = C_1(I_1 - 3) + C_2(I_2 - 3) \quad (\text{I.41})$$

où C_1 et C_2 représentent deux constantes matérielles à identifier. Il est bien adapté aux caoutchoucs naturels dont la déformation est inférieure à 300%.

De nombreuses autres formes ont été développées à partir de la généralisation de ce modèle. Il s'agit de considérer le potentiel comme une série polynomiale de la forme

$$W = \sum C_{ij} (I_1 - 3)^i (I_2 - 3)^j. \quad (\text{I.42})$$

Une extension aux matériaux compressibles fut apportée dans [114]. Celle-ci s'écrit

$$W = \sum C_{ijk} (I_1 - 3)^i (I_2 - 3)^j (I_3 - 1)^k. \quad (\text{I.43})$$

Un cas particulier, à savoir le modèle Néo-Hookéen, s'obtient en prenant $i=1, j=0$ et $k=0$:

$$W = C_{100} (I_1 - 3). \quad (\text{I.44})$$

Modèle d'Ogden

Contrairement aux modèles précédents, celui d'Ogden s'exprime en fonction des élongations principales de la déformation, soient les valeurs principales du tenseur \mathbf{U} . Ce potentiel prend la forme

$$W = \sum \frac{\mu_n}{\alpha_n} (\lambda_1^{\alpha_n} + \lambda_2^{\alpha_n} + \lambda_3^{\alpha_n} - 3) \quad (\text{I.45})$$

où μ_n et α_n désignent des paramètres matériaux. Ces derniers ne sont pas quelconques. Ils doivent satisfaire les conditions suivantes

$$\sum \mu_n \alpha_n = 2\mu \quad \text{et} \quad \mu_n \alpha_n > 0 \quad (\text{I.46})$$

où μ est le module de cisaillement.

Modèle de Gent-Thomas

Ce modèle s'appuie sur la forme empirique générale, établie dans [128], dans laquelle une fonction logarithme est introduite :

$$W = C_1 (I_1 - 3) + C_2 \ln \left(\frac{I_2}{3} \right). \quad (\text{I.47})$$

Modèle de Gent

Ce modèle limite l'élongation des chaînes moléculaires en faisant l'hypothèse que I_1 admet une valeur maximale notée J_m de sorte que

$$W = \frac{\mu}{2} \ln \left(\frac{J_m - I_1 + 3}{J_m} \right). \quad (\text{I.48})$$

Modèles compressibles

La plupart des modèles présentés ci-dessus décrivent un comportement hyperélastique isotrope incompressible. Une extension aux matériaux compressibles est possible en ajoutant une partie volumique au potentiel incompressible notée $W_{vol}(J)$ [77]. Un certain nombre de fonctions ont été proposées dans la littérature. De façon générale, ces fonctions dépendent de J et s'annulent dans la configuration de référence afin de satisfaire (I.22). Il convient également de les choisir de sorte que leur dérivée s'annule dans Ω_0 pour ne pas introduire de précontraintes. Le tableau ci-dessous, issu de [62], reprend les formes les plus usuelles.

$W_{vol}(J)$	$\frac{\partial W_{vol}(J)}{\partial J}$
$\frac{1}{2}(\ln J)^2$	$\frac{1}{J} \ln J$
$\frac{1}{2}(J-1)^2$	$J-1$
$J - \ln J - 1$	$1 - \frac{1}{J}$
$J \ln J - J + 1$	$\ln J$
$\frac{1}{\beta^2} \left(\frac{1}{J^\beta} - 1 + \beta \ln J \right)$	$\frac{1}{\beta} \left(\frac{1}{J} - \frac{1}{J^{1+\beta}} \right)$
$\frac{1}{4} ((J-1)^2 + (\ln J)^2)$	$\frac{1}{2} \left(J-1 + \frac{1}{J} \ln J \right)$

TAB. I.1 – Parties volumiques du potentiel élastique.

Toutefois, compte-tenu de la différence d'énergie mise en jeu lors de dilatations et de glissements, il est classique de découpler le potentiel en une partie purement isochore et une autre volumique [50]. Pour cela, on décompose le gradient de déformation \mathbf{F} ainsi que le tenseur de Cauchy droit \mathbf{C} tel que

$$\mathbf{F} = (J^{\frac{1}{3}} \mathbf{I}) \bar{\mathbf{F}} \quad \text{et} \quad \mathbf{C} = (J^{\frac{2}{3}} \mathbf{I}) \bar{\mathbf{C}} \quad (\text{I.49})$$

où $\bar{\mathbf{F}}$ et $\bar{\mathbf{C}}$ désignent la partie isochore de \mathbf{F} et \mathbf{C} respectivement. Un découplage similaire peut être fait du potentiel, à savoir

$$W = W_{iso}(\bar{\mathbf{C}}) + W_{vol}(J). \quad (\text{I.50})$$

La partie isochore W_{iso} peut prendre l'une des formes incompressibles présentées ci-dessus dans laquelle les invariants de \mathbf{C} sont remplacés par ceux de $\bar{\mathbf{C}}$ qui s'écrivent

$$\bar{I}_1 = J^{-\frac{2}{3}} I_1 \quad \text{et} \quad \bar{I}_2 = J^{-\frac{4}{3}} I_2. \quad (\text{I.51})$$

Afin de déterminer la relation contraintes-déformations, il est nécessaire de calculer la variation de $\bar{\mathbf{C}}$ par rapport à \mathbf{C} , ce qui conduit à l'introduction d'un tenseur du

quatrième ordre \mathbb{P}_C défini par

$$\mathbb{P}_C = \frac{\partial \bar{\mathbf{C}}}{\partial \mathbf{C}} = J^{-\frac{2}{3}} \left(\mathbb{I} - \frac{1}{3} \mathbf{C}^{-1} \otimes \mathbf{C} \right) \quad (\text{I.52})$$

Ce tenseur est l'opérateur déviatorique associé à la configuration de référence. Son utilisation dans la loi de comportement conduit à la relation

$$\mathbf{S} = \mathbb{P}_C : \bar{\mathbf{S}} + \frac{\partial W_{vol}}{\partial J} J \mathbf{C}^{-1} \quad (\text{I.53})$$

où $\bar{\mathbf{S}} = 2\partial W_{iso}/\partial \bar{\mathbf{C}}$. Des relations similaires peuvent être déterminées sur les autres configurations. De manière générale, l'utilisation d'un potentiel découplé complexifie légèrement l'implémentation numérique.

I.1.6 Conduction thermique

A présent, on s'intéresse au problème de conduction thermique non linéaire dans la configuration courante. Ainsi, on considère le solide \mathcal{B} occupant le domaine borné Ω de \mathbb{R}^3 dont le bord $\partial\Omega$ se décompose en quatre parties disjointes et complémentaires, c'est-à-dire $\bigcap \partial\Omega_i = \emptyset$ et $\bigcup \partial\Omega_i = \partial\Omega$ avec $i = 1, 2, 3, 4$. A chaque instant t , l'équilibre thermique du solide est régi par l'équation de la chaleur qui s'écrit

$$\rho(T)c(T)\dot{T} + \text{div } \mathbf{q} - r = 0 \quad (\text{I.54})$$

où r est une fonction scalaire représentant une source volumique interne de chaleur, \mathbf{q} le flux de chaleur, ρ et c deux constantes matérielles, à savoir la masse volumique et la chaleur spécifique du matériau considéré. Conventionnellement, le point présent au-dessus du champ de température T symbolise la dérivation par rapport au temps.

La relation liant la température au flux en tout point du solide est donnée par la loi de Fourier :

$$\mathbf{q} = -\mathbf{K}(T)\nabla T \quad (\text{I.55})$$

où \mathbf{K} correspond à un tenseur symétrique de second ordre caractérisant la conductivité thermique du matériau. L'introduction de cette expression du flux dans l'équation de la chaleur conduit à

$$\rho(T)c(T)\dot{T} - \text{div}(\mathbf{K}(T)\nabla T) - r = 0. \quad (\text{I.56})$$

Sur le bord, le champ de température doit satisfaire des conditions aux limites de nature différente, à savoir

- des conditions en température imposée sur $\partial\Omega_1$

$$T = \bar{T} \tag{I.57}$$

- des conditions de flux imposé sur $\partial\Omega_2$

$$\mathbf{qn} = \bar{q} \tag{I.58}$$

- des conditions de convection naturelle sur $\partial\Omega_3$

$$\mathbf{qn} = h_T(T - T_\infty) \tag{I.59}$$

- des conditions de rayonnement sur $\partial\Omega_4$

$$\mathbf{qn} = \xi\varphi(T^4 - T_\infty^4) \tag{I.60}$$

où h_T , ξ et φ représentent respectivement le coefficient d'échange convectif, le facteur d'émission et la constante de Stephan-Boltzmann. Les grandeurs \mathbf{n} et T_∞ désignent la normale unitaire extérieure à $\partial\Omega$ et la température extérieure.

Afin de résoudre le problème transitoire, il faut ajouter une condition initiale sur le champ de température de la forme

$$T(t = 0) = T_0 \quad \text{dans } \Omega. \tag{I.61}$$

I.2 Méthodes numériques

La résolution analytique des problèmes exposés ci-dessus est limitée à des situations particulières (géométrie élémentaire, lois non linéaires simples ...). Pour des cas plus complexes, il convient de chercher une approximation de la solution. Celle-ci est généralement obtenue à l'aide de la méthode des éléments finis [82, 111, 161]. Cette technique de discrétisation spatiale repose sur une formulation intégrale des équations à résoudre qu'on se propose de fournir ci-après.

I.2.1 Formulations forte et faible du problème élastique

Le problème que l'on cherche à résoudre est un problème élastostatique isotherme qui peut s'écrire sous deux formes. La première consiste en un problème aux limites composé d'équations aux dérivées partielles du second ordre. La seconde, quant à

elle, correspond à un problème de minimisation de l'énergie associée. Dans un cadre hyperélastique, l'équivalence entre ces deux approches n'est pas totalement établie.

Ainsi, en décomposant $\partial\Omega_0$ en deux parties complémentaires et disjointes notées $\partial\Omega_0^u$ et $\partial\Omega_0^t$ (soit $\partial\Omega_0^u \cup \partial\Omega_0^t = \partial\Omega_0$ et $\partial\Omega_0^u \cap \partial\Omega_0^t = \emptyset$), l'équilibre mécanique du solide \mathcal{B} est décrit, sous sa forme locale et en absence de forces d'inertie, par

– l'équation d'équilibre

$$\operatorname{div}_X \mathbf{P} + \mathbf{G} = \mathbf{0} \quad \text{dans } \Omega_0; \quad (\text{I.62})$$

– la loi de comportement

$$\mathbf{P} = \frac{\partial W(\mathbf{F})}{\partial \mathbf{F}}; \quad (\text{I.63})$$

– la relation de compatibilité

$$\mathbf{F} = \frac{\partial \chi(\mathbf{X})}{\partial \mathbf{X}}; \quad (\text{I.64})$$

– les conditions aux limites

$$\mathbf{P}\mathbf{N} = \bar{\mathbf{t}}_0 \quad \text{sur } \partial\Omega_0^t, \quad (\text{I.65})$$

$$\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}}_0 \quad \text{sur } \partial\Omega_0^u \quad (\text{I.66})$$

avec $\bar{\mathbf{t}}_0$ les efforts imposés sur $\partial\Omega_0^t$ et $\bar{\mathbf{u}}_0$ les déplacements prescrits sur $\partial\Omega_0^u$. Ces équations, écrites en description mixte, représentent la forme forte du problème hyperélastique.

En vue d'une résolution numérique, il convient de transformer cette forme locale en une forme intégrale à l'aide du principe des travaux virtuels. Ce principe traduit l'équilibre entre le travail des forces extérieures et celui des forces internes. Par conséquent, pour tout incrément $\delta\mathbf{v}$ cinématiquement admissible (CA), c'est-à-dire compatible avec les conditions aux limites en déplacement, on obtient la forme faible suivante

Trouver $\mathbf{u} \in \mathcal{S}(\Omega_0)$ tel que $\forall \delta\mathbf{v} \in \mathcal{S}_0(\Omega_0)$,

$$\int_{\Omega_0} \mathbf{P} : \nabla_X \delta\mathbf{v} \, dV = \int_{\partial\Omega_0^t} \bar{\mathbf{t}}_0 \delta\mathbf{v} \, dS + \int_{\Omega_0} \mathbf{G} \delta\mathbf{v} \, dV \quad (\text{I.67})$$

où $\mathcal{S}(\Omega_0)$ et $\mathcal{S}_0(\Omega_0)$ désignent des espaces définis par

$$\mathcal{S}(\Omega_0) = \{\mathbf{u} \text{ suffisamment régulier} \mid \mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}}_0 \text{ sur } \partial\Omega_0^u\}, \quad (\text{I.68})$$

$$\mathcal{S}_0(\Omega_0) = \{\mathbf{u} \text{ suffisamment régulier} \mid \mathbf{u} = \mathbf{0} \text{ sur } \partial\Omega_0^u\}. \quad (\text{I.69})$$

Il est à noter que cette forme est mixte. Pour la rendre purement Lagrangienne, on commence par introduire la relation qu'il existe entre les deux tenseurs de Piola-Kirchhoff, à savoir $\mathbf{P} = \mathbf{F}\mathbf{S}$, combinée à quelques manipulations :

$$\int_{\Omega_0} \mathbf{P} : \nabla_X \delta \mathbf{v} \, dV = \int_{\Omega_0} \mathbf{S} : \mathbf{F}^T \nabla_X \delta \mathbf{v} \, dV. \quad (\text{I.70})$$

Puis, la symétrie de \mathbf{S} associée à $\delta \mathbf{C} = \mathbf{F}^T \nabla_X \delta \mathbf{v} + \nabla_X \delta \mathbf{v}^T \mathbf{F}$ conduit à la forme Lagrangienne suivante :

$$\begin{aligned} &\text{Trouver } \mathbf{u} \in \mathcal{S}(\Omega_0) \text{ tel que } \forall \delta \mathbf{v} \in \mathcal{S}_0(\Omega_0), \\ &\frac{1}{2} \int_{\Omega_0} \mathbf{S} : \delta \mathbf{C} \, dV = \int_{\partial \Omega_0^t} \bar{\mathbf{t}}_0 \delta \mathbf{v} \, dS + \int_{\Omega_0} \mathbf{G} \delta \mathbf{v} \, dV. \end{aligned} \quad (\text{I.71})$$

Une attention particulière doit être portée à cette équation puisque \mathbf{S} et $\delta \mathbf{C}$ dépendent, tous deux, du champ de déplacement inconnu \mathbf{u} , ce qui rend le système étudié non linéaire. Pour le résoudre, il est donc nécessaire de la linéariser.

I.2.2 Linéarisation du problème

Afin de résoudre le problème précédent, on le réécrit synthétiquement sous la forme

$$R(\mathbf{u}) = \mathbf{0} \quad (\text{I.72})$$

où R est appelé résidu. Dans le cadre de la méthode des éléments finis, bien adaptée à ce type problème, une méthode itérative doit être utilisée. On opte ici pour la méthode de Newton-Raphson qui s'avère plus robuste que les autres algorithmes itératifs tels que les méthodes dites quasi-Newton. Basée sur un développement de Taylor du résidu à l'ordre 1, cette méthode consiste à résoudre itérativement le problème linéarisé suivant

$$D_{\Delta u} R(\mathbf{u}) = -R(\mathbf{u}) \quad (\text{I.73})$$

où $D_{\Delta u}$ représente l'opérateur de dérivation de Gâteaux défini par

$$D_{\Delta u} R(\mathbf{u}) = \left. \frac{d}{d\epsilon} R(\mathbf{u} + \epsilon \Delta \mathbf{u}) \right|_{\epsilon=0}. \quad (\text{I.74})$$

Quelques manipulations conduisent à l'écriture de l'opérateur tangent du problème hyperélastique [75], à savoir

$$D_{\Delta u} R(\mathbf{u}) = \int_{\Omega_0} \mathbf{F}^T \nabla_X \delta \mathbf{v} : \mathbb{C} : \mathbf{F}^T \nabla_X \Delta \mathbf{u} \, dV + \int_{\Omega_0} \nabla_X \delta \mathbf{v} \mathbf{S} : \nabla_X \Delta \mathbf{u} \, dV \quad (\text{I.75})$$

où $\mathbb{C} = 2\partial\mathbf{S}/\partial\mathbf{C}$ désigne le module d'élasticité tangent dans la configuration de référence associé au potentiel élastique considéré.

Il est à noter que la convergence de la méthode de Newton-Raphson est quadratique lorsque le point de départ de la recherche est proche de la solution cherchée. Ainsi, pour des chargements importants, il convient de subdiviser le chargement afin d'effectuer une série de calculs élastostatiques avec des sollicitations plus faibles de sorte que l'état initial de la recherche soit proche de la solution. Cependant, le choix des subdivisions n'est pas forcément efficace, tant en terme de vitesse que de taux de convergence. Une méthode plus automatique, appelée longueur d'arc, permet de contrôler la taille des incréments. Cette technique, détaillée dans [15], n'est pas utilisée dans ce travail.

I.2.3 Résolution de système linéaire

Afin de résoudre le problème linéarisé (I.73) à chaque itération, il existe deux catégories de techniques, à savoir les méthodes directes et les méthodes itératives. Les premières donnent la solution exacte du système d'équations à la précision de la machine. Ces méthodes sont gourmandes en temps et en mémoire. Parmi elles, on compte la factorisation LU, de Cholesky, le pivot de Gauss ou la transformée de Fourier. Les secondes, quant à elles, résolvent le système de façon approchée avec une erreur contrôlable a priori. Ces techniques sont généralement moins gourmandes que les premières. On cite, comme exemple, le gradient conjugué ou biconjugué et le solveur GMRES [131]. Toutefois, la matrice de raideur étant mal conditionnée, l'utilisation de méthodes itératives semble difficile sans un bon préconditionneur.

I.2.4 Discrétisation par éléments finis

La méthode des éléments finis permet de convertir la forme faible continue établie ci-dessus en un système discret d'équations. Pour cela, le domaine Ω_0 est divisé en sous-domaines Ω_0^e , appelés éléments finis, tel que $\bigcup \Omega_0^e = \Omega_0$ et $\bigcap \Omega_0^e = \emptyset$. Chaque élément est défini par des noeuds où se concentrent les inconnues du problème notées $\tilde{\mathbf{u}}$. Dans une représentation isoparamétrique, les coordonnées d'un point à l'intérieur d'un élément sont approximées à l'aide des mêmes fonctions que le champ inconnu. Ainsi, le champ de déplacement et le champ virtuel sont approximés à partir de leurs

valeurs prises aux noeuds à l'aide de fonctions de forme tel que

$$\mathbf{u}^h(\mathbf{X}) = \sum_i N_i(\mathbf{X}) \tilde{\mathbf{u}}_i \quad \text{et} \quad \delta \mathbf{v}^h(\mathbf{X}) = \sum_i N_i(\mathbf{X}) \delta \tilde{\mathbf{v}}_i \quad (\text{I.76})$$

où $N_i(\mathbf{X})$ désigne la fonction de forme associée au noeud i . L'ordre polynomiale de ces fonctions N dépend du nombre de noeuds par élément. Quelque soit celui-ci, ces fonctions dites chapeaux valent 1 au noeud auquel elles sont associées et 0 aux autres.

L'introduction de ces interpolations dans le problème linéarisé (I.73) combinée au fait que $\delta \mathbf{v}$ est arbitraire conduit au système matriciel suivant :

$$[K]\{\Delta u\} = -\{R\} \quad (\text{I.77})$$

où $[K]$ et $\{R\}$ sont respectivement la matrice associée à l'opérateur tangent (I.75) et le vecteur résidu associé à (I.71). Conventionnellement, le vecteur $\{\Delta u\}$ contient tous les degrés de liberté du domaine de façon ordonnée. De plus, on a

$$[R] = \sum_e \left(\int_{\Omega_0^e} ([\tilde{B}^T]\{S\} - [N^T]\{G\}) dV - \int_{\partial\Omega_0^e \cap \partial\Omega_0^e} [N^T]\{\bar{t}_0\} dS \right) \quad (\text{I.78})$$

$$[K] = \sum_e \left(\int_{\Omega_0^e} ([\tilde{B}^T][C][\tilde{B}] + [B^T][S][B]) dV \right) \quad (\text{I.79})$$

avec, pour un noeud I donné,

– $[N]$ la matrice contenant les fonctions de forme associées à I

$$[N_I] = \begin{bmatrix} N_I & 0 & 0 \\ 0 & N_I & 0 \\ 0 & 0 & N_I \end{bmatrix} \quad (\text{I.80})$$

– $[B]$ la matrice permettant de calculer le gradient en notation de Voigt

$$[B_I] = \begin{bmatrix} N_{I,1} & 0 & 0 \\ N_{I,2} & 0 & 0 \\ N_{I,3} & 0 & 0 \\ 0 & N_{I,1} & 0 \\ 0 & N_{I,2} & 0 \\ 0 & N_{I,3} & 0 \\ 0 & 0 & N_{I,1} \\ 0 & 0 & N_{I,2} \\ 0 & 0 & N_{I,3} \end{bmatrix} \quad (\text{I.81})$$

– $[\tilde{B}_I]$ la matrice associée à la partie symétrique de l'opérateur $\mathbf{F}^T \nabla_X$

$$[\tilde{B}_I] = \begin{bmatrix} F_{11}N_{I,1} & F_{21}N_{I,1} & F_{31}N_{I,1} \\ F_{12}N_{I,2} & F_{22}N_{I,2} & F_{32}N_{I,2} \\ F_{13}N_{I,3} & F_{23}N_{I,3} & F_{33}N_{I,3} \\ F_{12}N_{I,3} + F_{13}N_{I,2} & F_{22}N_{I,3} + F_{23}N_{I,2} & F_{32}N_{I,3} + F_{33}N_{I,2} \\ F_{11}N_{I,3} + F_{13}N_{I,1} & F_{21}N_{I,3} + F_{23}N_{I,1} & F_{31}N_{I,3} + F_{33}N_{I,1} \\ F_{11}N_{I,2} + F_{12}N_{I,1} & F_{21}N_{I,2} + F_{22}N_{I,1} & F_{31}N_{I,2} + F_{32}N_{I,1} \end{bmatrix} \quad (\text{I.82})$$

– $\{S\}$ le vecteur colonne contenant les valeurs de \mathbf{S} en notation de Voigt

$$\{S\} = [S_{11} \ S_{22} \ S_{33} \ S_{23} \ S_{13} \ S_{12}]^T \quad (\text{I.83})$$

– $[S]$ la matrice contenant les valeurs de \mathbf{S} ordonnées de manière à être compatible avec le gradient

$$[S] = \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ S_{21} & S_{22} & S_{23} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ S_{31} & S_{32} & S_{33} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & S_{11} & S_{12} & S_{13} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & S_{21} & S_{22} & S_{23} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & S_{31} & S_{32} & S_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & S_{11} & S_{12} & S_{13} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & S_{21} & S_{22} & S_{23} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & S_{31} & S_{32} & S_{33} \end{bmatrix} \quad (\text{I.84})$$

– $[C]$ la matrice associée au tenseur d'élasticité écrit dans la configuration de référence

$$[C] = \begin{bmatrix} C_{1111} & C_{1122} & C_{1133} & C_{1123} & C_{1113} & C_{1112} \\ C_{2211} & C_{2222} & C_{2233} & C_{2223} & C_{2213} & C_{2212} \\ C_{3311} & C_{3322} & C_{3333} & C_{3323} & C_{3313} & C_{3312} \\ C_{2311} & C_{2322} & C_{2333} & C_{2323} & C_{2313} & C_{2312} \\ C_{1311} & C_{1322} & C_{1333} & C_{1323} & C_{1313} & C_{1312} \\ C_{1211} & C_{1222} & C_{1233} & C_{1223} & C_{1213} & C_{1212} \end{bmatrix}. \quad (\text{I.85})$$

Pour les matériaux isotropes, on donne l'expression de \mathbb{C} en fonction du potentiel

choisi :

$$\begin{aligned} \mathbf{C} = & \alpha_0 \mathbb{I} + \alpha_1 \mathbf{I} \otimes \mathbf{I} + \alpha_2 \mathbf{C} \otimes \mathbf{C} + \alpha_3 \mathbf{C}^{-1} \otimes \mathbf{C}^{-1} + \alpha_4 \mathbf{C}^{-1} \underline{\otimes} \mathbf{C}^{-1} + \alpha_5 (\mathbf{I} \otimes \mathbf{C} + \mathbf{C} \otimes \mathbf{I}) \\ & + \alpha_6 (\mathbf{I} \otimes \mathbf{C}^{-1} + \mathbf{C}^{-1} \otimes \mathbf{I}) + \alpha_7 (\mathbf{C} \otimes \mathbf{C}^{-1} + \mathbf{C}^{-1} \otimes \mathbf{C}) \end{aligned} \quad (\text{I.86})$$

avec $(\mathbf{C}^{-1} \underline{\otimes} \mathbf{C}^{-1})_{ijkl} = (C_{ik}^{-1} C_{jl}^{-1} + C_{il}^{-1} C_{jk}^{-1})/2$ et

$$\begin{aligned} \alpha_0 = & -4 \frac{\partial W}{\partial I_2}, & \alpha_1 = & 4 \left(\frac{\partial^2 W}{\partial I_1 \partial I_1} + 2I_1 \frac{\partial^2 W}{\partial I_1 \partial I_2} + I_1^2 \frac{\partial^2 W}{\partial I_2 \partial I_2} + \frac{\partial W}{\partial I_2} \right) \\ \alpha_2 = & 4 \frac{\partial^2 W}{\partial I_2 \partial I_2}, & \alpha_3 = & J \left(J \frac{\partial^2 W}{\partial J \partial J} + \frac{\partial W}{\partial J} \right), & \alpha_4 = & -2J \frac{\partial W}{\partial J} \\ \alpha_5 = & -4 \left(\frac{\partial^2 W}{\partial I_1 \partial I_2} + I_1 \frac{\partial^2 W}{\partial I_2 \partial I_2} \right), & \alpha_6 = & 2J \left(\frac{\partial^2 W}{\partial I_1 \partial J} + I_1 \frac{\partial^2 W}{\partial I_2 \partial J} \right) \\ & & \alpha_7 = & -2J \frac{\partial^2 W}{\partial I_2 \partial J}. \end{aligned} \quad (\text{I.87})$$

I.2.5 Discrétisation du problème thermique

De façon similaire, on construit la formulation faible du problème thermique à partir de sa formulation forte constituée des équations (I.55-I.61) dans laquelle on omet volontairement la condition en rayonnement. Ainsi, pour tout champ de température virtuel θ , on a :

$$\begin{aligned} \text{Trouver } T \in \mathcal{S}^t(\Omega) \text{ vérifiant (I.57) et (I.61) tel que } \forall \theta \in \mathcal{S}_0^t(\Omega), \\ \int_{\Omega} \rho(T) c(T) \dot{T} \theta \, dv + \int_{\Omega} \nabla \theta \mathbf{K}(T) \nabla T \, dv - \int_{\partial\Omega_2} \bar{q} \theta \, ds \\ - \int_{\partial\Omega_3} h_T (T - T_{\infty}) \theta \, ds - \int_{\Omega} r \theta \, dv = 0 \end{aligned} \quad (\text{I.88})$$

où $\mathcal{S}^t(\Omega)$ et $\mathcal{S}_0^t(\Omega)$ désignent des espaces définis par

$$\mathcal{S}^t(\Omega) = \{T \text{ suffisamment régulier} \mid T = \bar{T} \text{ sur } \partial\Omega_1\} \quad (\text{I.89})$$

$$\mathcal{S}_0^t(\Omega) = \{T \text{ suffisamment régulier} \mid T = 0 \text{ sur } \partial\Omega_1\}. \quad (\text{I.90})$$

Comme la précédente, cette formulation est non linéaire puisque les paramètres matériaux dépendent de la température. Il est donc nécessaire de la linéariser également. A cela, s'ajoute la difficulté liée à la présence d'une dérivée temporelle. Le modèle numérique s'obtient alors par double discrétisation, l'une spatiale et l'autre temporelle.

Discrétisation temporelle et linéarisation

Avant de linéariser, on procède à la discrétisation temporelle. Dans ce travail, on utilise un schéma implicite décentré pour discrétiser l'équation de la chaleur : on exprime toutes les quantités à l'instant $t + \Delta t$. Cette méthode, généralement inconditionnellement stable, permet l'utilisation de grands pas de temps Δt mais requiert des temps de calculs plus long par rapport à des schémas explicites. La forme faible s'écrit

$$\int_{\Omega} \rho(T^{t+\Delta t})c(T^{t+\Delta t}) (T^{t+\Delta t} - T^t) \theta \, dv + \Delta t \int_{\Omega} \nabla \theta \mathbf{K}(T^{t+\Delta t}) \nabla T^{t+\Delta t} \, dv - \Delta t \left(\int_{\partial\Omega_2} \bar{q} \theta \, ds + \int_{\partial\Omega_3} h_T (T^{t+\Delta t} - T_{\infty}) \theta \, ds + \int_{\Omega} r \theta \, dv \right) = 0 \quad (\text{I.91})$$

Dans cette relation, l'inconnue est le champ de température à l'instant $t + \Delta t$ noté $T^{t+\Delta t}$. Par conséquent, si les paramètres ne sont pas constants, cette formule est non linéaire. Il convient donc de la linéariser à l'aide de l'opérateur de Gâteaux. En notant $R_t(T)$ le résidu du problème thermique (I.91), le problème linéarisé associé prend la forme

$$D_{\Delta T} R_t(T^{t+\Delta t}) = -R_t(T^{t+\Delta t}) \quad (\text{I.92})$$

avec

$$D_{\Delta T} R_t(T^{t+\Delta t}) = \int_{\Omega} \hat{c}(\Delta T) (T^{t+\Delta t} - T^t) \theta \, dv + \int_{\Omega} \rho(T^{t+\Delta t})c(T^{t+\Delta t}) \Delta T \theta \, dv + \Delta t \left(\int_{\Omega} (\nabla \theta \hat{\mathbf{K}}(\Delta T) \nabla T^{t+\Delta t} + \nabla \theta \mathbf{K}(T^{t+\Delta t}) \nabla \Delta T) \, dv - \int_{\partial\Omega_3} h_T \Delta T \theta \, ds \right) \quad (\text{I.93})$$

où $\hat{c}(\Delta T) = D_{\Delta T} [\rho(T^{t+\Delta t})c(T^{t+\Delta t})]$ et $\hat{\mathbf{K}}(\Delta T) = D_{\Delta T} [\mathbf{K}(T^{t+\Delta t})]$.

Discrétisation spatiale

En divisant le domaine Ω en éléments finis Ω^e , le champ de température réel ainsi que le virtuel sont approximés par

$$T^h(\mathbf{x}) = \sum_i N_i(\mathbf{x}) \tilde{T}_i \quad \text{et} \quad \theta^h(\mathbf{x}) = \sum_i N_i(\mathbf{x}) \tilde{\theta}_i \quad (\text{I.94})$$

où $N_i(\mathbf{x})$, \tilde{T}_i et $\tilde{\theta}_i$ représentent respectivement la fonction d'interpolation, la température et le champ virtuel au noeud i . En notant $\{T\}$ le vecteur des températures

de tous les noeuds du maillage, l'introduction de ces expressions dans la forme faible conduit au système matriciel

$$[C(T)]\{\dot{T}\} + [K(T)]\{T\} = \{F\} \quad (\text{I.95})$$

avec

$$[C(T)]_{ij} = \sum \left(\int_{\Omega^e} \rho(T)c(T)N_i N_j dv \right), \quad (\text{I.96})$$

$$[K(T)]_{ij} = \sum \left(\int_{\Omega^e} \nabla N_i \mathbf{K}(T) \nabla N_j dv + \int_{\partial\Omega^e \cap \partial\Omega_3} h_T N_i N_j ds \right), \quad (\text{I.97})$$

$$\{F\}_i = \sum \left(\int_{\Omega^e} N_i r dv + \int_{\partial\Omega^e \cap \partial\Omega_2} N_i \bar{q} ds - \int_{\partial\Omega^e \cap \partial\Omega_3} h_T N_i T_\infty ds \right). \quad (\text{I.98})$$

I.3 Implémentations et exemples numériques

Les modèles numériques étant établis, il convient de les implémenter dans un code de calculs. Dans ce travail, on développe deux logiciels sous Matlab : l'un pour résoudre le problème hyperélastique et l'autre pour traiter le problème thermique. Ainsi, cette dernière section porte sur la validation de ces codes. De nombreux tests numériques ont été faits. Ici, on se restreindra à présenter un exemple pour chaque problème.

I.3.1 Validation du code élastique

Le test présenté ici consiste à soumettre un barreau circulaire à une torsion simple. Il s'agit alors de fixer une de ces extrémités et de soumettre l'autre à une rotation dans son plan. Afin de comparer les résultats numériques aux solutions analytiques de [5, 76], on considère que le cylindre est constitué d'un matériau dont le comportement dérive d'un potentiel néo-hookéen incompressible. Sous ces conditions, on rappelle que la pression ne dépend que du rayon, soit

$$p(R) = \frac{C_1 \tau^2}{2} (R_e^2 - R^2) + C_1 \quad (\text{I.99})$$

où R_e et C_1 correspondent respectivement au rayon du cylindre et à une constante du matériau. Le paramètre τ caractérise la rotation imposée.

L'objet de la simulation est un cylindre de rayon $R_e = 2m$ et de longueur $L = 5m$. Dû à la symétrie, le calcul numérique s'effectue sur un quart du cylindre

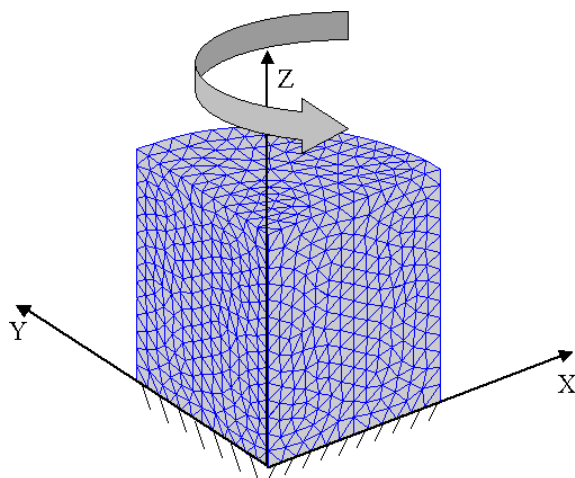


FIG. I.2 – Problème élastique étudié.

discrétisé en 15625 noeuds et 10529 tétraèdres. On impose une rotation de 10° sur la face supérieure. La figure I.2 illustre le problème traité. La comparaison du champ de pression obtenu numérique à celui établi analytiquement est présentée dans la figure I.3. Une bonne concordance est observée. L'erreur, calculée par l'équation (II.36), reste inférieure à 1% tout au long de la simulation.

$$err_{hy} = \frac{|W^{num} - W^{ex}|}{|W^{ex}|} \quad (I.100)$$

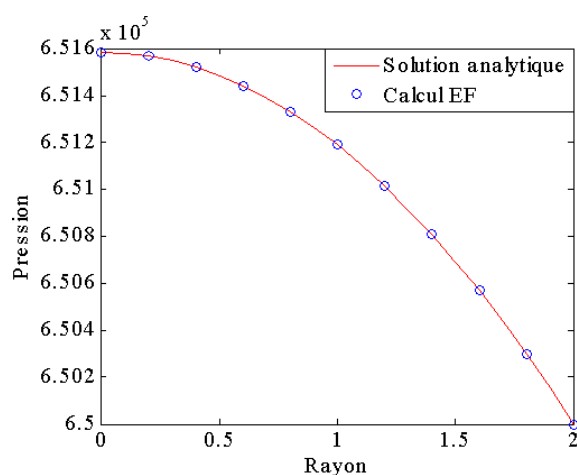


FIG. I.3 – Comparaison du champ de pression.

I.3.2 Validation du code thermique

Le test présenté ici consiste à modéliser un transfert thermique unidirectionnel dans une plaque carrée homogène de longueur $L = 10$ m. On impose sur un bord une température T_s de 473 K alors que, sur le bord en vis-à-vis, la température imposée T_i est de 273 K. On considère que les deux autres parois sont adiabatiques, c'est-à-dire que le flux de chaleur sortant est nul. Le maillage utilisé ainsi que les conditions aux limites sont représentés sur la figure I.4.

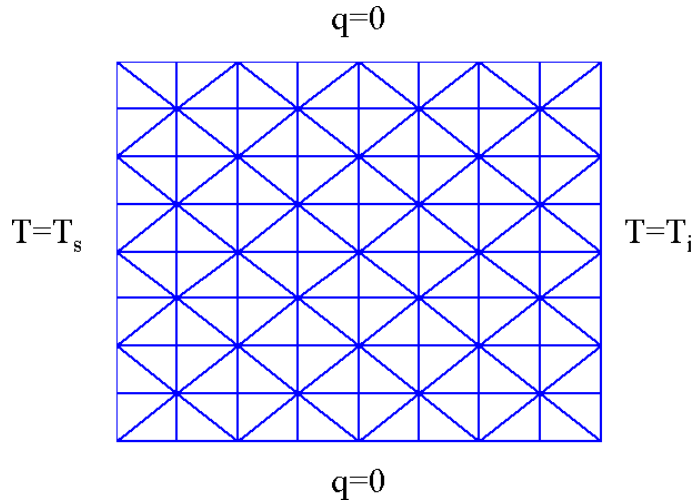


FIG. I.4 – Problème thermique étudié.

Le tenseur de conductivité se réduit alors à une simple fonction scalaire dépendant de T . On choisit de modéliser linéairement les variations des caractéristiques thermiques du matériau en fonction de la température :

$$k(T) = k_1T + k_2 \quad c(T) = c_1T + c_2 \quad (\text{I.101})$$

où k_1 , k_2 , c_1 et c_2 sont des constantes. On suppose aussi la présence, en tout point de la plaque, d'une source interne de chaleur dont l'expression est :

$$r(x) = \frac{2(T_s - T_i)(k_2 + k_1(T_s + \frac{(T_i - T_s)x^2}{L^2}))}{L^2}. \quad (\text{I.102})$$

Cette fonction, qui représente la chaleur dégagée par la source, a été choisie de façon à obtenir une solution analytique au problème de conduction non linéaire en régime stationnaire de la forme :

$$T_{exacte} = T_s + \frac{T_i - T_s}{L^2}x^2 \quad (\text{I.103})$$

L'introduction de cette source nous permet de comparer la solution en régime stationnaire calculée numériquement et la solution analytique le long d'une ligne traversant la plaque sur la figure I.5. On compare ces solutions pour différentes valeurs des propriétés du matériau et différentes valeurs de température imposée. A chaque fois, les deux solutions se superposent. L'erreur relative

$$err_{th} = \frac{||T^{num} - T^{ex}||}{||T^{ex}||} \quad (I.104)$$

reste inférieur à $10^{-2}\%$, ce qui permet de valider les résultats obtenus par le code en régime permanent.

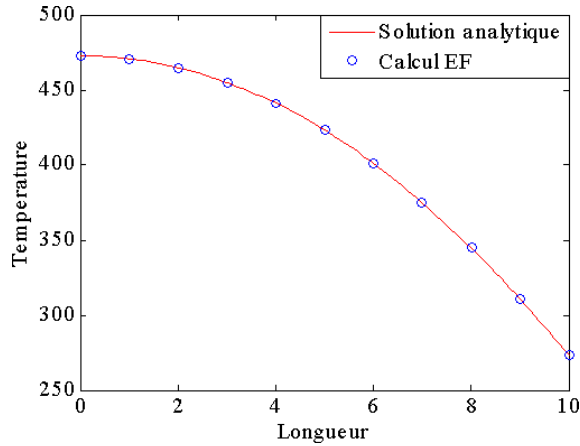


FIG. I.5 – Champ de température le long de la plaque.

Il reste à vérifier l'exactitude des résultats en régime transitoire. Pour cela, on modifie légèrement le problème étudié de sorte que la solution exacte soit de la forme

$$T_{exacte} = T_i + (T_s - T_i) e^{-xt}. \quad (I.105)$$

Ainsi, on modifie la source de chaleur utilisée dont l'expression devient

$$r(x, t) = -(T_s - T_i) e^{-xt} [c_2 x + k_2 t^2 + (c_1 x + k_1 t^2)(T_i + (T_s - T_i) e^{-xt})]. \quad (I.106)$$

La condition aux limites en $x = 0$ reste identique à la précédente. Toutefois, en $x = L$, on impose la température exacte à chaque instant. On compare la solution numérique et la solution analytique pour différents instants sur la figure I.6. L'écart entre les deux solutions reste inférieur à 0.1% , ce qui valide définitivement l'algorithme thermique.

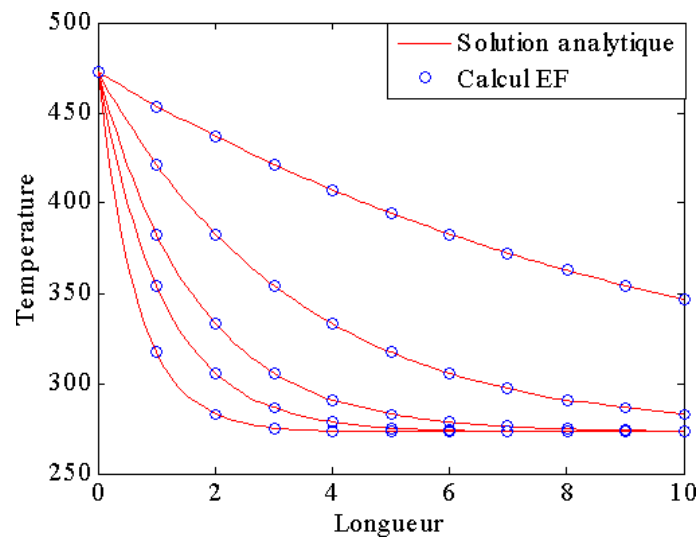


FIG. I.6 – Champ de température le long de la plaque à différents instants.

CHAPITRE I. FORMULATIONS ET RÉOLUTIONS PAR ÉLÉMENTS FINIS DE
PROBLÈMES EN ÉLASTICITÉ ET CONDUCTION NON LINÉAIRE

Chapitre II

Une méthode d'homogénéisation numérique avec réduction de modèle

Ce chapitre concerne la résolution de problèmes d'homogénéisation périodique de composites non linéaires. Les approches analytiques, dans ce cas, sont limitées. La plupart d'entre elles conduisent à l'estimation ou l'encadrement des propriétés effectives du matériau hétérogène. Quelques résultats analytiques ont toutefois été établis pour des chargements et des microstructures particulières (voir par exemple [20, 66, 67, 88, 95, 113, 120, 122]). Une alternative consiste à adopter des approches numériques. Celles-ci permettent de traiter à la fois des microstructures quelconques, des chargements arbitraires et des matériaux fortement non linéaires. Une synthèse récente sur l'homogénéisation se trouve dans [83].

Dans ce cadre, la méthode des éléments finis multi-niveau (FE^2), initiée dans [127], est très largement utilisée. L'idée est de résoudre deux problèmes aux limites simultanément par la méthode des éléments finis, l'un à l'échelle de la structure et l'autre à l'échelle du matériau hétérogène [47–49, 56, 85, 98, 135, 147]. L'idée est d'associer à chaque point de la structure macroscopique le comportement d'une cellule microscopique représentative du matériau. Toutefois, le coût de calculs de cette approche est prohibitif si bien que des méthodes de décomposition de domaine et de calculs parallèles ont été proposées afin de les alléger.

Dans ce chapitre, on propose de combiner cette approche multi-échelle à une réduction de modèle de type POD [84, 92] afin de réduire d'avantage les coûts. Ini-

tialement introduite dans [156] pour les problèmes hyperélastiques, cette démarche est adaptée, ici et dans [106, 157], au problème de conduction non linéaire. Après quelques rappels sur l'homogénéisation non linéaire, on présente la méthode R3M comme l'ont surnommée les auteurs. Des applications à la conduction thermique et électrique sont présentées en fin de chapitre. D'autres impliquant le problème élastique seront données au chapitre suivant.

II.1 Rappel sur l'homogénéisation

II.1.1 Stratégie

L'homogénéisation permet de prédire ou estimer le comportement mécanique macroscopique d'un matériau hétérogène à partir des propriétés de ses constituants et de leur répartition. Autrement dit, il s'agit de décrire un milieu hétérogène à l'aide d'un milieu homogène équivalent. Cette approche requiert la distinction d'au moins deux échelles, à savoir l'échelle macroscopique associée à la taille de la structure et l'échelle microscopique associée à la taille des hétérogénéités. Selon le type de microstructure, on oppose deux approches micromécaniques : l'une périodique et l'autre aléatoire. Dans les deux cas, il est nécessaire de définir un volume élémentaire représentatif (VER) sur lequel le comportement effectif sera déterminé. Le choix de ce VER constitue la première étape de la procédure d'homogénéisation [22].

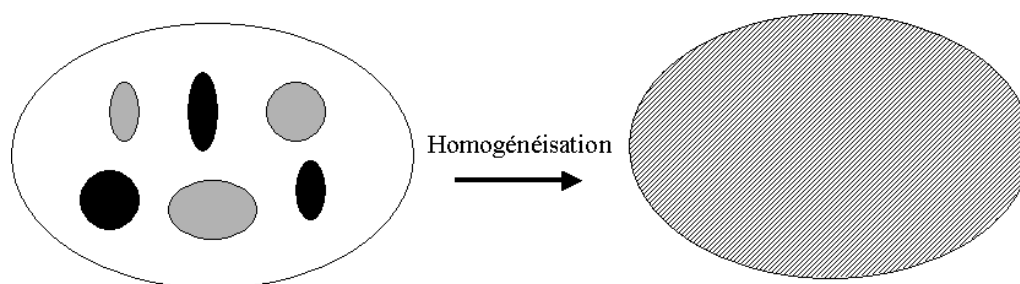


FIG. II.1 – Illustration de l'homogénéisation.

Cette étape dite de représentation consiste en une description de la microstructure la plus fine possible. On y précise les différentes phases constituant le matériau hétérogène ainsi que leurs caractéristiques géométriques (formes, fractions volumiques, distribution spatiale). Cette tâche s'avère généralement complexe. A cela,

s'ajoute une difficulté liée à la détermination de la taille du domaine à considérer. En effet, le VER doit être suffisamment grand face aux dimensions des hétérogénéités de sorte que les champs solution soient uniformes sur le pourtour de celui-ci et indépendants de la sollicitation. De plus, il doit être suffisamment petit par rapport aux dimensions de la structure afin d'obtenir des champs macroscopiques continus. Par conséquent, le VER désigne la plus petite échelle à laquelle on observe le matériau équivalent. Pour les matériaux à microstructure périodique, le VER correspond à une période tandis que, pour les matériaux aléatoires, un processus stochastique doit être employé pour le générer.

La seconde étape, plus connue sous le nom de localisation, consiste à résoudre un problème aux limites sur le VER. Cette étape permet d'obtenir les champs locaux de contraintes et de déformations à partir des propriétés de la microstructure. Classiquement, deux types d'approche sont envisagés, à savoir une approche en déformation et une approche en contrainte. La première consiste à imposer des conditions aux limites en déplacement. De là, on en déduit le champ de déformation local par la relation établie dans [71, 110]

$$\bar{\mathbf{F}} = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \mathbf{F} \, dv = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\partial\Omega} \chi(\mathbf{X}) \otimes \mathbf{n} \, ds \quad (\text{II.1})$$

où $|\Omega|$ correspond au volume de Ω . L'utilisation des lois de comportement de chaque phase conduit à la détermination du champ de contraintes locales associées.

L'approche en contraintes, quant à elle, consiste à imposer des conditions aux limites en contraintes qui, combinées aux diverses lois de comportement micro et à la relation

$$\bar{\mathbf{P}} = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \mathbf{P} \, dv = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\partial\Omega} (\mathbf{P}\mathbf{n}) \otimes \mathbf{x} \, ds \quad (\text{II.2})$$

permet d'obtenir le champ de contraintes locales puis celui des déformations locales associées. Ce problème de localisation est nettement plus compliqué à résoudre dans un contexte non linéaire que dans le cas linéaire. Ainsi, un traitement incrémental est proposé dans [70] afin de se ramener, à chaque pas, à un problème linéarisé autour d'un état de référence conservant la distribution morphologique du problème : c'est la notion de matériaux linéaires de comparaison [22, 95, 124].

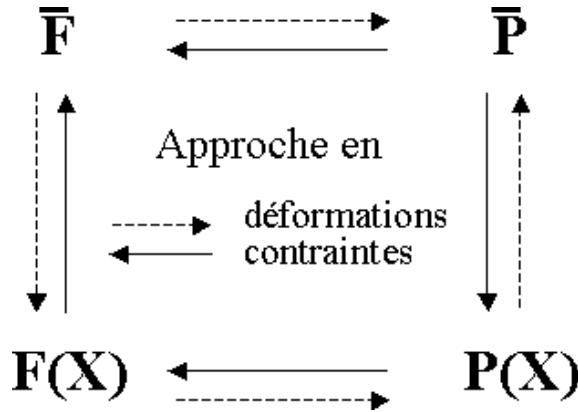


FIG. II.2 – Schéma de la procédure d'homogénéisation.

La dernière étape permet de déterminer les champs de contraintes et de déformations macroscopiques à l'aide de moyennes volumiques des champs locaux établis à l'étape précédente. En guise de résumé, un schéma de la procédure d'homogénéisation est représenté en figure II.2.

Une démarche similaire à celle présentée ci-dessus peut être établie pour le problème de conduction non linéaire [121, 123, 144, 145]. Dans les deux cas, cette approche, qualifiée de séquentielle, s'avère très difficile à résoudre. En pratique, on privilégie plutôt des méthodes énergétiques, basées sur des formulations variationnelles, afin de caractériser le comportement effectif du matériau hétérogène. Ces méthodes conduisent à des bornes comme celles de Voigt et Reuss ou encore celle de Hashin-Shtrikman [113, 120, 143].

II.1.2 Homogénéisation par potentiel

La méthode présentée ci-dessus illustre les principes de l'homogénéisation. Toutefois, elle n'est pas appliquée aux matériaux hétérogènes hyperélastiques dont le comportement dérive d'une densité d'énergie : on lui préfère une approche en potentiel [22] qui est succinctement rappelée ci-après.

On considère Ω_0 un volume élémentaire représentatif d'un composite dans sa configuration de référence. Chaque phase, supposée hyperélastique, occupe le domaine $\Omega_0^{(r)}$. Aucune restriction n'est faite sur la géométrie et les interfaces entre les phases sont présumées parfaites. Sous ces conditions, la densité d'énergie du

composite s'écrit :

$$W = \sum \delta^{(r)}(\mathbf{X})W^{(r)}(\mathbf{F}) \quad (\text{II.3})$$

où $W^{(r)}$ représente la densité d'énergie de la phase r et $\delta^{(r)}$ une fonction caractéristique décrivant la distribution des phases : elle est égale à 1 si $\mathbf{X} \in \Omega_0^{(r)}$ et 0 sinon. Une relation similaire peut être écrite pour la relation contraintes-déformations locale, à savoir

$$\mathbf{P} = \sum \delta^{(r)}(\mathbf{X})\mathbf{P}^{(r)}(\mathbf{F}). \quad (\text{II.4})$$

Sans perte de généralité, on privilégie une approche en déformation pour l'étape de localisation : on impose des conditions homogènes sur le bord $\partial\Omega_0$ de la forme

$$\mathbf{u} = (\bar{\mathbf{F}} - \mathbf{I}) \mathbf{X} \quad (\text{II.5})$$

où $\bar{\mathbf{F}}$ est le gradient de déformation macroscopique. Ainsi, d'après [71], la relation contraintes-déformations macroscopique dérive également d'un potentiel tel que

$$\bar{P} = \frac{\partial \bar{W}(\bar{\mathbf{F}})}{\partial \bar{\mathbf{F}}} \quad (\text{II.6})$$

avec

$$\bar{W}(\bar{\mathbf{F}}) = \underset{\mathbf{F}}{\text{Min}} \langle W \rangle \quad (\text{II.7})$$

où $\langle . \rangle$ représente la moyenne volumique de W sur Ω_0 . Ainsi, la détermination du potentiel macroscopique revient à un problème de minimisation sur les gradients de déformation cinématiquement admissibles [96]. Or, les densités d'énergie caractérisant le comportement hyperélastique en grandes déformations sont non convexes par rapport à leur argument \mathbf{F} du fait de la positivité de son déterminant. Par conséquent, l'existence d'un tel minimum n'est pas garantie. Néanmoins, des conditions moins restrictives permettent d'assurer l'existence du minimum sans, toutefois, garantir son unicité. Parmi elles, on peut citer, dans l'ordre décroissant, la polyconvexité, la quasiconvexité ou encore la convexité de rang 1 [9, 36] de sorte que :

$$\text{convexité} \Rightarrow \text{polyconvexité} \Rightarrow \text{quasi-convexité} \Rightarrow \text{convexité de rang 1.}$$

Les potentiels les plus courants sont polyconvexes. Ainsi, dans ce travail, on opte pour des densités d'énergie polyconvexes qui s'écrivent

$$W = W(\mathbf{F}, \text{cof}(\mathbf{F}), \text{det}(\mathbf{F})). \quad (\text{II.8})$$

où W doit être convexe par rapport à \mathbf{F} , $\text{cof}(\mathbf{F}) = \text{det}(\mathbf{F})\mathbf{F}^{-T}$ et $\text{det}(\mathbf{F})$.

II.2 Homogénéisation non linéaire avec réduction de modèle

Le problème que l'on vient de détailler s'avère également très difficile à résoudre. Il se complexifie d'avantage pour des géométries compliquées. Une alternative consiste à utiliser une approche multi-échelle concourante dans laquelle aucune loi macroscopique n'est définie a priori. Dans cette approche, on ne cherche plus à identifier un modèle de comportement macroscopique par la théorie de l'homogénéisation mais à déterminer le comportement effectif par un calcul mené sur le VER. La méthode des éléments finis multi-niveau s'inscrit dans ce cadre. Cette technique consiste à résoudre deux problèmes éléments finis, l'un à l'échelle macroscopique et l'autre à l'échelle microscopique. Plus précisément, en chaque point d'intégration macroscopique, un calcul sur le VER est conduit avec des conditions aux limites liées à l'état de déformation macroscopique au point d'intégration. De ce calcul, on sort les contraintes macroscopiques par moyenne. Dans ce qui suit, on formule le problème aux deux échelles dans le cas élastique et thermique.

II.2.1 Méthode des éléments finis multi-niveaux en élasticité

Formulation du problème macro

Le problème à résoudre à l'échelle macroscopique est régi par les équations (I.62)-(I.66) dans lesquelles on substitue les grandeurs par des grandeurs surlignées. En vue d'une résolution numérique, on ne donne ici que la formulation faible associée :

$$\begin{aligned} &\text{Trouver } \bar{\mathbf{u}} \in \mathcal{S}(\bar{\Omega}_0) \text{ tel que } \forall \delta \bar{\mathbf{v}} \in \mathcal{S}_0(\bar{\Omega}_0), \\ &\int_{\bar{\Omega}_0} \bar{\mathbf{P}} : \nabla_X \delta \bar{\mathbf{v}} \, dV = \int_{\partial \bar{\Omega}_0^t} \bar{\mathbf{t}}_0 \delta \bar{\mathbf{v}} \, dS + \int_{\bar{\Omega}_0} \bar{\mathbf{G}} \delta \bar{\mathbf{v}} \, dV \end{aligned} \quad (\text{II.9})$$

Il est à noter que $\bar{\mathbf{P}}$ est indéterminé à cette échelle. Il en est de même pour le tenseur d'élasticité apparaissant dans l'opérateur tangent.

Formulation du problème micro

Le problème à résoudre à l'échelle microscopique est régi par les mêmes équations. On rappelle la formulation faible associée :

$$\text{Trouver } \mathbf{u} \in \mathcal{S}(\Omega_0) \text{ tel que } \forall \delta \mathbf{v} \in \mathcal{S}_0(\Omega_0),$$

$$\int_{\Omega_0} \mathbf{P} : \nabla_X \delta \mathbf{v} \, dV = \int_{\partial \Omega_0^t} \bar{\mathbf{t}}_0 \delta \mathbf{v} \, dS + \int_{\Omega_0} \mathbf{G} \delta \mathbf{v} \, dV \quad (\text{II.10})$$

A cette échelle, on suppose que les lois de comportement ainsi que les tenseurs d'élasticité de chaque phase sont parfaitement connus. On restreint cependant le choix des densités d'énergie à celles qui sont polyconvexes.

Lien entre les échelles

L'objectif de la démarche est de déterminer le comportement macroscopique au voisinage de chaque point d'intégration par un calcul à l'échelle microscopique. Ainsi, le calcul micro fournit la relation contraintes-déformations $\bar{\mathbf{P}}$ et l'opérateur tangent macroscopique noté matriciellement $[\bar{K}]$. D'autre part, il est nécessaire d'identifier les conditions aux limites à appliquer sur le bord du VER afin d'obtenir le comportement effectif.

A l'échelle microscopique, on suppose que le gradient de déformation est la somme d'un terme constant correspondant au gradient macroscopique et d'un terme fluctuant $\nabla_X \mathbf{w}(\mathbf{X})$, à savoir

$$\mathbf{F} = \bar{\mathbf{F}} + \nabla_X \mathbf{w}(\mathbf{X}). \quad (\text{II.11})$$

Le calcul de la moyenne volumique de l'équation précédente conduit à

$$\frac{1}{|\Omega_0|} \int_{\Omega_0} \nabla_X \mathbf{w}(\mathbf{X}) \, dV = \mathbf{0} \quad (\text{II.12})$$

soit

$$\frac{1}{|\Omega_0|} \int_{\partial \Omega_0} \mathbf{w}(\mathbf{X}) \otimes \mathbf{N} \, dS = \mathbf{0}. \quad (\text{II.13})$$

Cette condition est satisfaite si $\mathbf{w}(\mathbf{X})$ est nul sur tout le bord du VER ou s'il prend des valeurs similaires sur deux points en vis-à-vis du bord. Afin de retomber sur le problème exposé à la section précédente, on opte pour la condition homogène sur le bord qui conduit à

$$\mathbf{u} = (\bar{\mathbf{F}} - \mathbf{I}) \mathbf{X} \quad \text{sur } \partial \Omega_0. \quad (\text{II.14})$$

Enfin, le champ de contraintes macroscopique est obtenu par moyennage

$$\bar{\mathbf{P}} = \frac{1}{|\Omega_0|} \int_{\Omega_0} \mathbf{P} dV. \quad (\text{II.15})$$

Le dernier point à aborder porte sur la détermination de l'opérateur tangent. Pour cela, on utilise la méthode de perturbation décrite dans [49]. Celle-ci consiste à modifier légèrement chaque composante des conditions aux limites du problème microscopique afin de construire une approximation de la matrice tangente. Ce procédé, assez coûteux numériquement, requiert le calcul de trois (2D) ou quatre (3D) problèmes à l'échelle microscopique à chaque itération. Un résumé de la méthodologie est fourni dans la figure II.3.

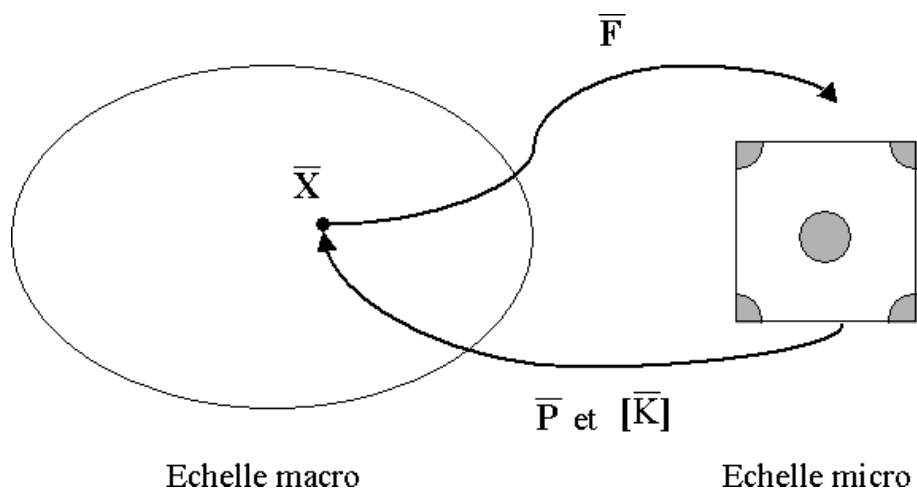


FIG. II.3 – Illustration de la méthode multi-échelle en élasticité.

II.2.2 Méthode des éléments finis multi-niveaux en conduction

L'homogénéisation appliquée aux problèmes de conduction dans les matériaux hétérogènes non linéaires suit la même démarche que celle décrite précédemment. D'un point de vue théorique, le gradient de déformation et le champ de contraintes sont remplacés respectivement par le gradient de température et le flux thermique. Dans un cadre non linéaire, la forme de la relation entre le gradient de température et le flux associé à l'échelle macroscopique n'est pas connue a priori : il convient de la déterminer. Par la suite, on se limite à adapter la procédure numérique au cas thermique.

Formulation du problème macro

Le champ macroscopique \bar{T} doit satisfaire le système d'équations établi précédemment, à savoir :

$$\begin{aligned} \text{Trouver } \bar{T} \in \mathcal{S}^t(\bar{\Omega}) \text{ vérifiant (I.57) et (I.61) tel que } \forall \bar{\theta} \in \mathcal{S}_0^t(\bar{\Omega}), \\ \int_{\bar{\Omega}} \bar{\rho}(\bar{T}) \bar{c}(\bar{T}) \dot{\bar{T}} \bar{\theta} \, dv + \int_{\bar{\Omega}} \nabla \bar{\theta} \bar{\mathbf{K}}(\bar{T}) \nabla \bar{T} \, dv - \int_{\partial \bar{\Omega}_2} \bar{q} \bar{\theta} \, ds \\ - \int_{\partial \bar{\Omega}_3} \bar{h}_T(\bar{T} - T_\infty) \bar{\theta} \, ds - \int_{\bar{\Omega}} \bar{r} \bar{\theta} \, dv = 0 \end{aligned} \quad (\text{II.16})$$

où les grandeurs surlignées désignent les propriétés macroscopiques du matériau. Il est à noter que la relation entre le flux \bar{q} et le champ n'est pas connue explicitement à cette échelle.

Formulation du problème micro

Le champ microscopique T obéit à la même formulation, soit

$$\begin{aligned} \text{Trouver } T \in \mathcal{S}^t(\Omega) \text{ vérifiant (I.57) et (I.61) tel que } \forall \theta \in \mathcal{S}_0^t(\Omega), \\ \int_{\Omega} \rho(T) c(T) \dot{T} \theta \, dv + \int_{\Omega} \nabla \theta \mathbf{K}(T) \nabla T \, dv - \int_{\partial \Omega_2} \bar{q} \theta \, ds \\ - \int_{\partial \Omega_3} h_T(T - T_\infty) \theta \, ds - \int_{\Omega} r \theta \, dv = 0 \end{aligned} \quad (\text{II.17})$$

Contrairement à l'échelle macroscopique, la relation entre le flux et le champ, à cette échelle, est connue pour les deux matériaux. Dans ce travail, on traite à la fois le

problème de conduction thermique et celui de conduction électrique. Afin de traiter le premier des deux, on adopte la loi de Fourier, à savoir

$$\mathbf{q} = -\mathbf{K}(T) \cdot \nabla T \quad (\text{II.18})$$

tandis que, pour le second, on privilégie une loi puissance de la forme

$$\mathbf{q} = -\chi \|\nabla T\|^{p-1} \nabla T \quad (\text{II.19})$$

où χ et p désignent des paramètres matériaux.

Lien entre les deux échelles

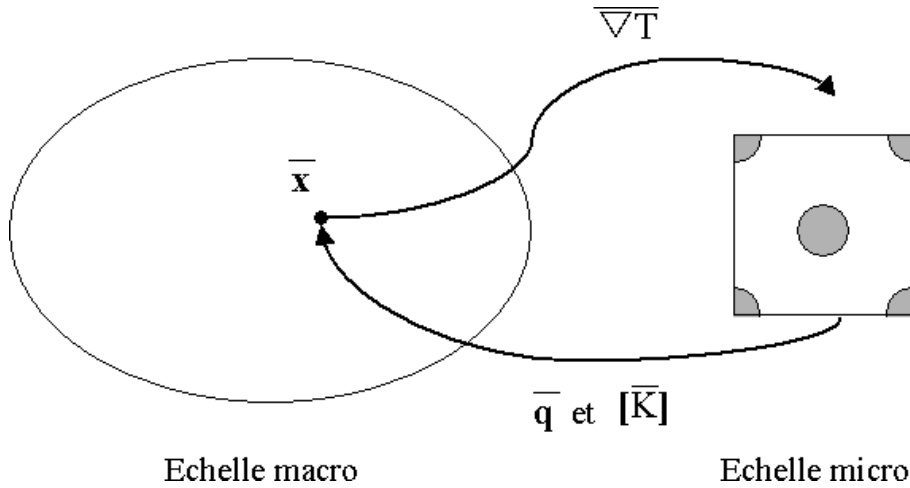


FIG. II.4 – Illustration de la méthode multi-échelle en conduction.

Comme précédemment, l'idée de la démarche est de résoudre le problème macroscopique (II.16) par la méthode des éléments finis en considérant qu'en chaque point d'intégration du domaine se trouve un domaine élémentaire représentatif dans lequel on résout le problème (II.16) également par éléments finis. Ainsi, deux liens entre les échelles apparaissent, à savoir l'un portant sur les conditions aux limites à appliquer au bord du VER et l'autre sur la détermination de la relation flux-gradient de l'échelle macroscopique.

Pour le second, on suppose que le champ inconnu à l'échelle microscopique se décompose en une partie constante correspondant à la valeur moyenne connue au niveau macroscopique et une fluctuation :

$$T = \overline{\text{grad } T} \cdot \mathbf{x} + w(\mathbf{x}) \quad (\text{II.20})$$

En appliquant l'opérateur gradient à l'équation précédente et en moyennant sur le volume, on obtient :

$$\frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \mathbf{grad} T d\Omega = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \overline{\mathbf{grad} T} d\Omega + \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \mathbf{grad} w(\mathbf{x}) d\Omega \quad (\text{II.21})$$

soit :

$$\overline{\mathbf{grad} T} = \overline{\mathbf{grad} T} + \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \mathbf{grad} w(\mathbf{x}) d\Omega \quad (\text{II.22})$$

On en déduit que :

$$\frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \mathbf{grad} w(\mathbf{x}) d\Omega = 0 \quad (\text{II.23})$$

L'utilisation de la divergence conduit à :

$$\frac{1}{|\Omega|} \int_{\partial\Omega} w(\mathbf{x}) \mathbf{n} dS = 0 \quad (\text{II.24})$$

Cette relation est vérifiée si, sur $\partial\Omega$,

$$w(\mathbf{x}) = 0 \quad \text{ou} \quad w(\mathbf{x}^+) = w(\mathbf{x}^-) \quad (\text{II.25})$$

où \mathbf{x}^+ et \mathbf{x}^- désignent deux points du contour en vis-à-vis. La première condition est vérifiée si

$$T = \overline{\mathbf{grad} T} \cdot \mathbf{x} \quad \text{sur } \partial\Omega \quad (\text{II.26})$$

tandis que la seconde l'est si

$$u^+ - u^- = \overline{\mathbf{grad} T} \cdot (\mathbf{x}^+ - \mathbf{x}^-) \quad \text{sur } \partial\Omega \quad (\text{II.27})$$

avec u^+ et u^- la solution du problème micro évaluée en \mathbf{x}^+ et \mathbf{x}^- respectivement.

Après la résolution du problème à l'échelle microscopique, on calcule la moyenne volumique du flux par :

$$\bar{\mathbf{q}} = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \mathbf{q} d\Omega. \quad (\text{II.28})$$

Afin de résoudre le problème en régime transitoire, la capacité thermique homogénéisée est la moyenne volumique des capacités des matériaux formant le VER

$$\bar{c} = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} c(T) d\Omega. \quad (\text{II.29})$$

Dans cette approche, il est important de souligner que le flux macroscopique ainsi que le paramètre matériau sont obtenus par moyenne sur le VER : aucune forme n'est supposé a priori. Ainsi, il est possible de traiter des géométries aussi complexes que l'on souhaite avec des lois de comportement quelconques. Enfin, la matrice tangente macroscopique est obtenue par une méthode de perturbations développée dans [49]. Afin de réduire les coûts liés aux calculs couplés aux deux échelles, une méthode de réduction de modèle est détaillée dans la section suivante.

II.2.3 Réduction de modèle

L'approche multi-échelle à deux niveaux présentée ci-dessus présente un inconvénient majeur, à savoir son coût de calculs. En effet, en chaque point d'intégration de l'échelle macroscopique, il est nécessaire de calculer la réponse d'un volume élémentaire représentatif soumis à des conditions limites spécifiques. Ces calculs deviennent rapidement prohibitifs. Afin de réduire ces coûts, on se propose d'utiliser une technique de réduction de modèle basée sur la décomposition orthogonale aux valeurs propres (POD). Cette méthode est une façon élégante et efficace d'analyse des données permettant d'approximer un système de dimension élevée par un autre de dimension plus faible [6, 84, 86, 92, 119]. Plus précisément, elle permet d'extraire l'information pertinente d'un ensemble de données, provenant selon le cas de simulations numériques ou d'expériences, en capturant les corrélations entre ces données. Dans ce qui suit, on explicite succinctement la décomposition orthogonale aux valeurs propres. Puis, on décrit la procédure adoptée dans le contexte de l'homogénéisation numérique. On termine par la mise en parallèle de l'algorithme d'homogénéisation : on se focalisera notamment sur la logique et les moyens employés.

Présentation

La POD peut être considérée comme une méthode d'approximation en dimension finie ou infinie. Cette approximation se veut optimale d'un point de vue énergétique. Cette technique est capable à la fois d'extraire les traits dominants d'une série de données et d'en fournir une base de modes propres orthogonaux susceptibles de reproduire le phénomène étudié. La POD a été développée, simultanément et vraisemblablement indépendamment, dans diverses disciplines. C'est pourquoi elle est étroitement liée à la décomposition de Karhunen-Loève issue de la théorie des probabilités, à l'analyse des composants principaux ainsi qu'à la décomposition en valeurs

singulières. Ces approches sont équivalentes pour des problèmes en dimension finie [92]. Dans la littérature, la plupart des études rapportées incluant la POD traite de sa version discrète étroitement liée aux résolutions numériques. Initialement introduite en dynamique des fluides [74], cette combinaison s'est rapidement étendue à la dynamique des structures en passant par l'aéroélasticité et le transfert thermique. Une revue bibliographique [84] retrace cette évolution en détails. Dans ce qui suit, on se limite à un rappel du cas discret dont un développement mathématique se trouve dans [87]. Ceux intéressés par la formulation continue peuvent se référer à [74].

Formulation mathématique

L'idée essentielle de la méthode POD consiste à remplacer un champ dont un grand nombre de variables sont interdépendantes par un autre champ de dimension plus faible mais dont les variables sont décorrélées. Pour cela, on considère que l'évolution d'un système comme le VER est caractérisé par champ vectoriel $\{u(t)\} \in \mathbb{R}^N$. Par exemple, ce champ peut être la solution du problème discrétisé d'élasticité ou de conduction à l'échelle microscopique. Ce champ peut alors se décomposer de la façon suivante :

$$\{u(t)\} = [\Phi] \{\xi(t)\} \quad (\text{II.30})$$

où $[\Phi] = [\{\phi_1\}, \{\phi_2\}, \dots, \{\phi_N\}]$ désigne une base orthogonale arbitraire de dimension N et $\{\xi(t)\}$ les coefficients associés.

L'objectif de la réduction de modèle est de remplacer $\{u(t)\}$ par une solution approchée $\{\hat{u}(t)\} = [\hat{\Phi}]\{\hat{\xi}(t)\}$, et ce en utilisant seulement M vecteurs de la base au lieu de N ($M \ll N$), tel que

$$\underset{\{\phi_i\}}{\text{Min}} \|\{u(t)\} - \{\hat{u}(t)\}\|^2 \quad (\text{II.31})$$

sous la contrainte d'orthogonalité :

$$\langle \{\phi_i\}, \{\phi_j\} \rangle = \delta_{ij} \quad (\text{II.32})$$

où δ_{ij} correspond au symbole de Kronecker. On peut montrer que ce problème se ramène à un problème aux valeurs propres de la forme [92] :

$$[V]\{\phi_i\} = \mu_i\{\phi_i\} \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (\text{II.33})$$

où $[V]$ désigne la matrice de corrélation définie par

$$[V] = [Q][Q]^T \quad (\text{II.34})$$

avec $[Q]$ une matrice de dimension $N \times S$ construite à partir de différents résultats collectés lors de calculs préliminaires :

$$[Q] = [\{u(1)\} \{u(2)\} \cdots \{u(S)\}]. \quad (\text{II.35})$$

A ce stade, il ne reste plus qu'à préciser le nombre de vecteurs propres à conserver pour représenter le phénomène, ce qui revient à définir la dimension M . Une définition plutôt arbitraire consiste à ne retenir que les modes dont la somme des énergies représente au moins 90% de l'énergie totale et ce en s'assurant que chaque mode négligé représente moins de 1% du mode principal [134]. Dans ce travail, la base réduite $[\hat{\Phi}]$ est obtenu en ne gardant que les M vecteurs propres de $[\Phi]$ associés aux M plus grandes valeurs propres μ_i . L'erreur introduite par cette approximation est estimée par

$$\|\{u(t)\} - \{\hat{u}(t)\}\| = \left(\sum_{i=M+1}^N \mu_i \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (\text{II.36})$$

Ainsi, le nombre M de fonctions est déterminé à l'aide du critère suivant

$$\frac{\left(\sum_{i=M+1}^N \mu_i \right)^{\frac{1}{2}}}{\left(\sum_{i=1}^N \mu_i \right)^{\frac{1}{2}}} < \delta \quad (\text{II.37})$$

où δ est la tolérance choisie. Il est important de souligner qu'en pratique les valeurs propres décroissent rapidement. Ainsi, seul un petit nombre de modes est retenu.

Formulation du problème micro

On rappelle que le problème microscopique se ramène, après discrétisation par éléments finis et linéarisation par Newton Raphson, à un système de taille $(N \times N)$ de la forme :

$$[K_T]\{\Delta u\} = -\{R\} \quad (\text{II.38})$$

Dans le cadre de la POD, les variations de champ inconnu (déplacement ou température), à chaque itération de Newton Raphson, sont développées sous la forme :

$$\{\Delta u\} = [\Phi]\{\Delta \xi\} \quad (\text{II.39})$$

En introduisant (II.39) dans le système (II.38) et en pré-multipliant par $[\Phi]^T$, on obtient un système constitué de m équations s'écrivant :

$$[\Phi]^T [K_T] [\Phi] \{\Delta \xi\} = -[\Phi]^T \{R\}. \quad (\text{II.40})$$

La matrice à inverser est alors de taille ($m \times m$) avec $m \ll N$, ce qui réduit les temps de calculs. Un gain non négligeable peut également être obtenu en assemblant directement la matrice réduite au lieu de construire la matrice complète puis de la multiplier par $[\Phi]$. L'algorithme complet de la méthode est présenté en figure II.5

Un point important à évoquer concerne les conditions aux limites de Dirichlet à l'échelle microscopique dont la linéarisation donne

$$\Delta u = 0 \quad \text{ou} \quad \Delta u^+ - \Delta u^- = 0. \quad (\text{II.41})$$

Ces conditions sont imposées à l'aide de multiplicateurs de Lagrange de sorte que le système à résoudre prend la forme matricielle

$$\begin{bmatrix} [K_T] & [G^T] \\ [G] & [0] \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \{\Delta u\} \\ \{\Delta \lambda\} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \{R\} \\ \{0\} \end{bmatrix}. \quad (\text{II.42})$$

On se propose ici de réduire ces nouvelles inconnues en modifiant la matrice $[Q]$ en incluant les multiplicateurs, à savoir

$$[Q] = \begin{bmatrix} \{u(1)\} & \{u(2)\} & \cdots & \{u(S)\} \\ \{\Delta \lambda_1\} & \{\Delta \lambda_2\} & \cdots & \{\Delta \lambda_S\} \end{bmatrix}. \quad (\text{II.43})$$

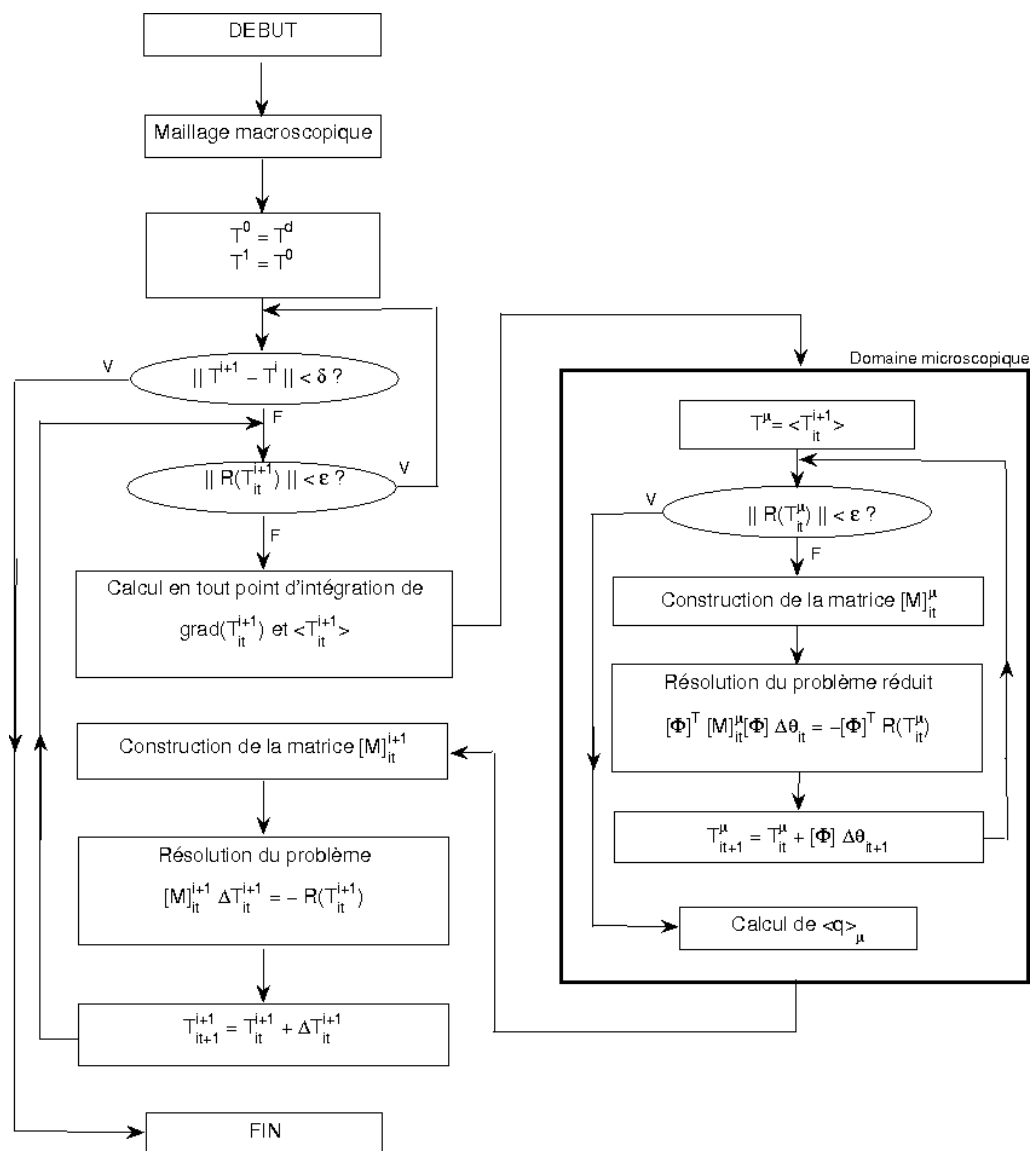


FIG. II.5 – Algorithme de calcul : approche éléments finis multi niveaux et réduction de modèle en conduction.

Construction de la base réduite

A présent, il ne reste plus qu'à déterminer la base réduite qui caractérise au mieux le comportement du système. Il est donc nécessaire de procéder à des calculs préliminaires. Pour cela, on choisit S points de l'espace des paramètres définissant le système, puis on résout le problème microscopique pour chacune des combinaisons sorties. Afin de restreindre l'espace considéré, on borne la valeur de chaque paramètre par des estimations faites de ces derniers à l'échelle macroscopique. Dans ce travail, le problème élastique est régi, au maximum, par neuf paramètres correspondant à toutes les composantes du gradient de déformations tandis que le problème de conduction n'en compte que trois dus au gradient de température. Une illustration de la stratégie du choix des S points est présentée dans la figure II.6 pour un système ne comportant que deux paramètres notés γ_1 et γ_2 . Cette stratégie n'est pas unique : on aurait pu choisir, par exemple, un nuage régulier de points ou un nuage de points aléatoires.

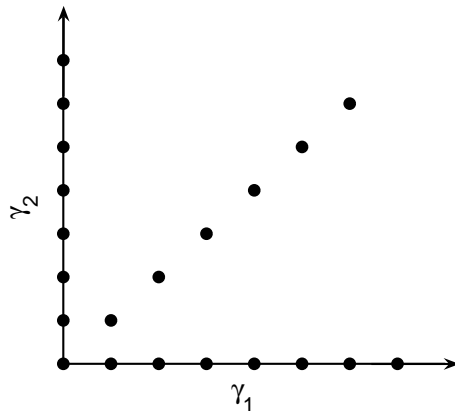


FIG. II.6 – Illustration du choix des paramètres des calculs préliminaires.

Il est important de souligner que la construction de la base est relativement coûteuse en terme de temps de calculs. De plus, il n'est pas certain que l'échantillonnage réalisé soit le meilleur. Ainsi, une méthode, proposée dans [129, 130], consiste à construire la base simultanément au calcul. Cette approche évite donc les calculs préliminaires tout en garantissant un bon échantillonnage puisque la matrice $[Q]$ est complétée tout au long de la simulation par les résultats intermédiaires. Toutefois, dans ce travail, on n'adopte pas cette stratégie.

II.2.4 Parallélisation

La procédure d'homogénéisation établie ci-dessus se prête bien aux calculs parallèles. Ainsi, en plus d'une réduction de modèles, on propose d'augmenter le nombre de machines utilisées lors d'un calcul. Cette démarche ne modifie que très légèrement l'implémentation de la méthode.

Au sein du laboratoire, deux approches sont envisageables. La première implique une machine de grande capacité mémoire munie de plusieurs processeurs. Généralement, ces processeurs sont identiques de sorte qu'une tâche met le même temps à s'exécuter sur l'un ou l'autre des noeuds (ou processeurs). La seconde approche nécessite plusieurs machines disposant chacune d'un processeur. Afin d'assurer la communication entre elles, ces machines doivent être reliées par un réseau haut débit. Dans cette approche, les processeurs ne sont pas nécessairement de même fréquence d'où des différences de temps lors de l'exécution d'une même tâche. Ainsi, on privilégie l'utilisation d'une machine à mémoire partagée.

Dans ce contexte, la parallélisation intervient au niveau macroscopique. Plus précisément, on découpe le domaine macroscopique en sous-domaines de sorte qu'un même nombre de points d'intégration macroscopiques soit transmis aux différents processeurs mobilisés pour le calcul. Chaque noeud contribue alors à la construction de la matrice tangente macroscopique ainsi qu'à celle du vecteur résidu en estimant le comportement effectif par des calculs sur le VER.

En guise d'exemple, on considère une structure macroscopique dont le maillage contient 338 degrés de liberté. La microstructure associée est décrite par un VER contenant 1066 degrés de liberté. Le domaine macroscopique est soumis à une traction simple. L'équilibre aux deux niveaux est atteint en 7 itérations de Newton-Raphson. La figure II.7 montre la durée relative des calculs pour différents nombres de processeurs. Celle-ci est divisée par 4 lors de l'utilisation de 4 processeurs.

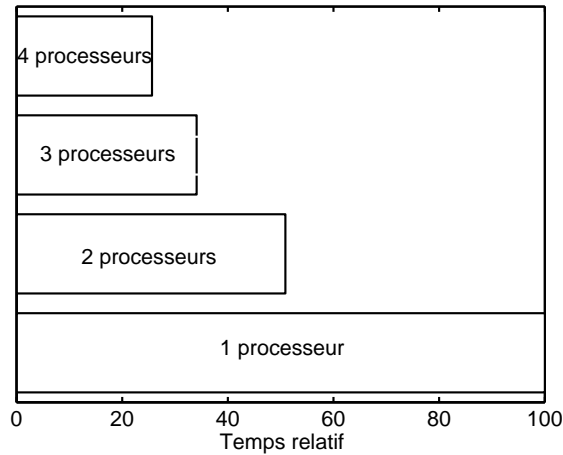


FIG. II.7 – Comparaison des temps de calculs par rapport au nombre de processeurs.

II.3 Applications

Dans cette section, les différentes méthodes exposées ci-dessus sont testées par des exemples numériques. Seul le cas thermique est abordé ici. Des exemples impliquant le problème élastique seront traités au chapitre suivant.

II.3.1 Tests de validation

Validation de la procédure de réduction

Ce premier exemple consiste à valider la procédure de réduction de modèle. On traite le cas d'une plaque carrée de longueur $L = 10^{-5} m$ constituée de deux matériaux dont les caractéristiques thermiques varient linéairement avec la température. On impose sur un bord une température T_s de 473 K alors que, sur le bord en vis-à-vis, la température imposée T_i est de 273 K. On considère que les deux autres parois sont adiabatiques. Le problème est représenté en figure II.8. Le champ de température solution est alors déterminé par la méthode des éléments finis classique. La figure II.9 illustre ce champ à un instant t .

En vue d'utiliser la réduction de modèle, on détermine le nombre de modes significatifs suivant le critère (II.37). On fixe le paramètre δ à 10^{-6} d'après l'étude de convergence effectuée en figure II.10. On vérifie a posteriori la convergence de l'erreur relative entre le flux calculé à l'aide du modèle complet et le flux calculé par réduction.

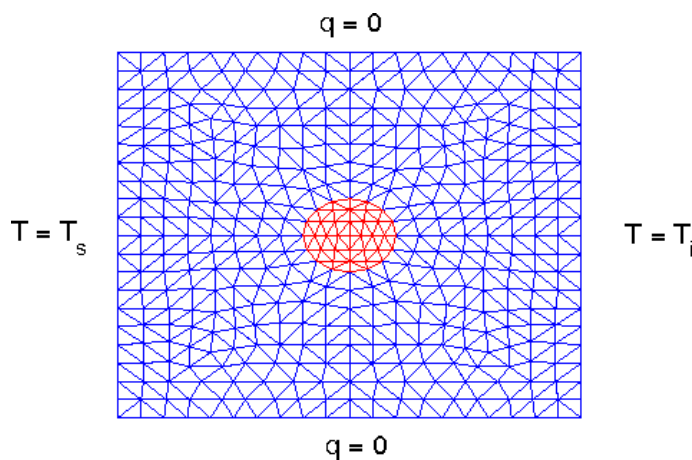


FIG. II.8 – Problème traité.

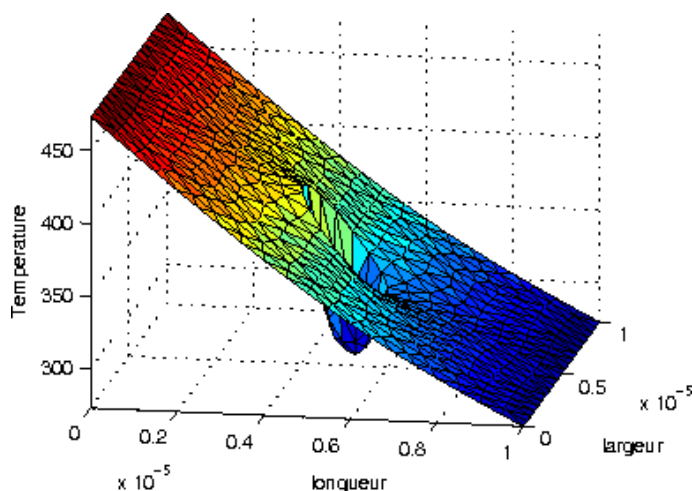


FIG. II.9 – Champ de température dans la plaque composite.

tion de modèle pour différentes valeurs du paramètre.

Seulement cinq modes propres sont suffisants pour assurer une erreur inférieure à 10^{-6} . On construit alors la base réduite à partir de ces vecteurs propres associés. On peut visualiser en figure II.11 l'allure de ces fonctions de base. La matrice $[\Phi]$ est de taille (439×5) . Par conséquent, la taille de la matrice à inverser n'est plus que (5×5) au lieu de (439×439) . On compare dans la figure II.12 le champ de température, à différents instants, obtenu par le calcul éléments finis classique et par un calcul éléments finis combiné à la réduction de modèle. On constate que les résultats engendrés par la réduction de modèle sont comparables à ceux obtenus

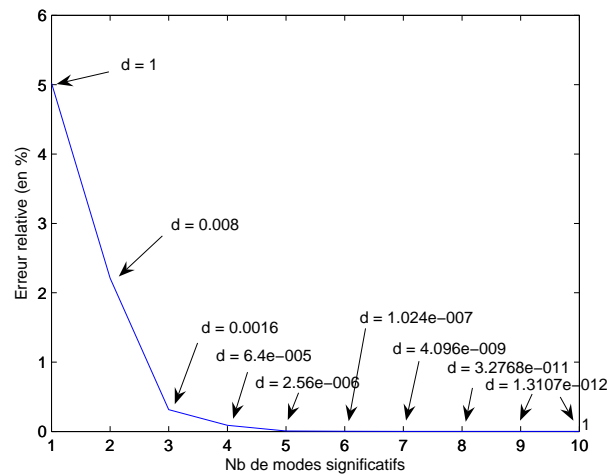


FIG. II.10 – Erreur relative en fonction du nombre de modes.

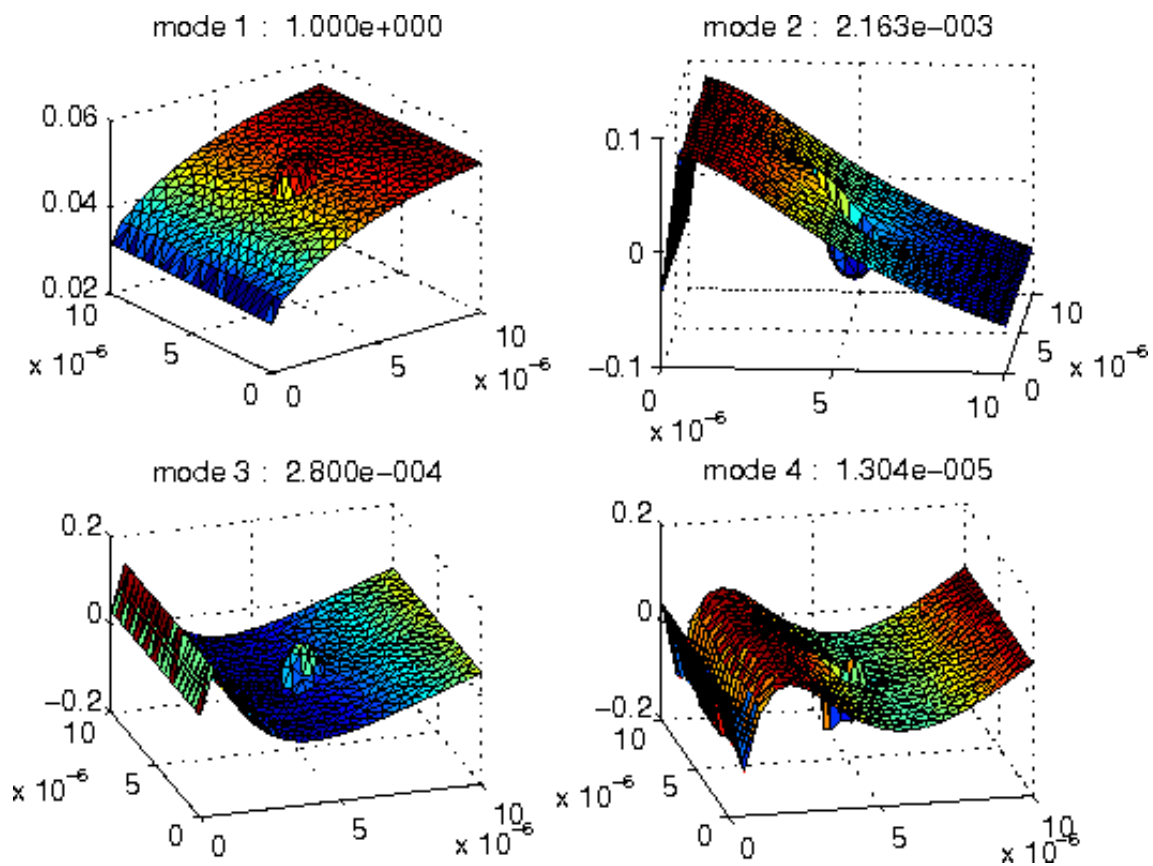


FIG. II.11 – 4 premiers modes significatifs.

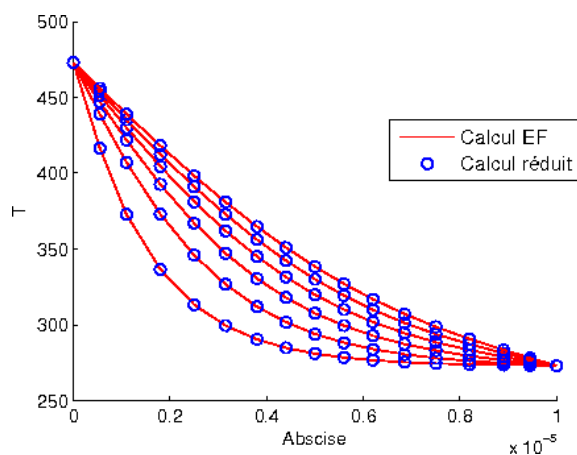


FIG. II.12 – Comparaison entre le calcul éléments finis et le calcul réduit à différents instants.

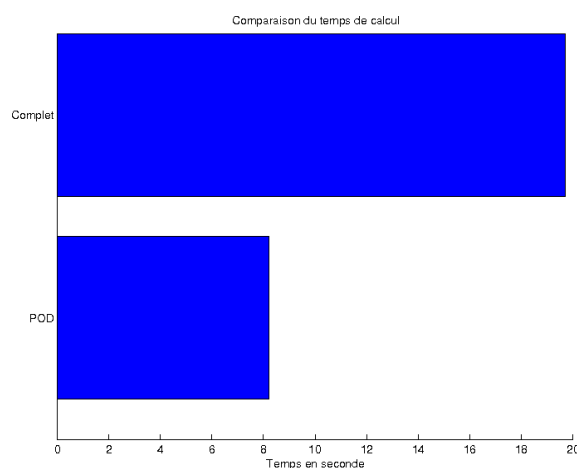


FIG. II.13 – Comparaison des temps de calcul.

par un calcul classique. On arrive donc à reproduire de manière très satisfaisante le comportement thermique de la plaque avec seulement cinq coefficients, ce qui permet de réduire de façon significative le temps de calcul comme le montre la figure II.13. Ces résultats homologuent le code associé à la méthode de réduction de modèle.

Validation de la procédure multi-échelle

L'objectif de cet exemple est de valider la procédure combinant l'approche multi-échelle à la réduction de modèle, notée R3M, en régime transitoire. Pour cela, on choisit de résoudre le problème de conduction thermique sur une plaque rectangu-

laire homogène de dimension 0.2×0.1 m. Celle-ci se divise en 45 noeuds répartis sur 64 éléments triangulaires. En conditions aux limites, on impose une convection naturelle sur deux bords opposés. Afin de comparer les résultats obtenus à ceux établis dans [146] via une méthode aux frontières, le coefficient de transfert thermique est pris égal à $200 \text{ Wm}^{-2}\text{K}^{-1}$ tandis que la température ambiante T_{amb} est choisie à 773 K. Les deux autres bords sont supposés adiabatiques. La température initiale de la plaque est de 373 K.

Le VER est supposé homogène. Sa capacité thermique est de $440 \text{ Jkg}^{-1}\text{K}^{-1}$ tandis que sa masse volumique vaut 7800 kgm^{-3} . On choisit une conductivité thermique de la forme

$$\mathbf{K}(T) = (98.43 - 0.09155 T + 0.2554 \cdot 10^{-4} T^2) \mathbf{I}. \quad (\text{II.44})$$

Des calculs préliminaires, avec un paramètre de tolérance égal à 10^{-6} , permettent de retenir six modes. On procède alors à deux simulations : l'un en FE^2 et l'autre en R3M. L'évolution de la température macroscopique le long d'une ligne horizontale est comparée aux résultats de [146] en figure II.14. Une bonne concordance est observée.

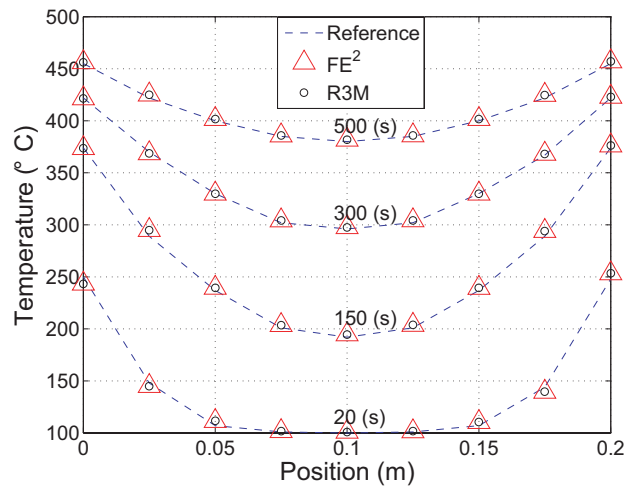


FIG. II.14 – Champ de température à différents instants.

II.3.2 Analyse à deux échelles de la conduction non linéaire dans un composite

Pour la suite, on considère un composite constitué d'un matériau hétérogène périodique. Afin de valider les résultats de l'approche multi-échelle, un maillage complet de la structure comprenant toutes les hétérogénéités est construit et représenté en figure II.15. La microstructure est décrite par le VER de la figure II.16.

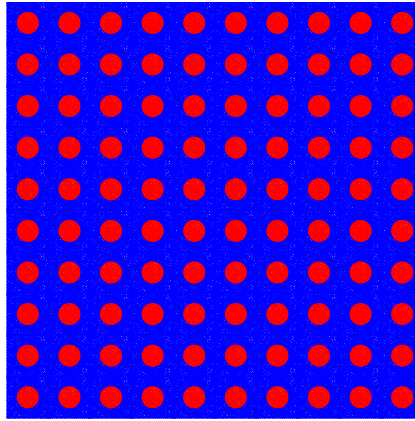


FIG. II.15 – Structure complète.

Problème de conduction électrique

On s'intéresse, tout d'abord, à la conduction électrique en régime stationnaire. La structure macroscopique est une plaque carrée dont le maillage est constitué de 100 noeuds et 162 éléments triangulaires. Une différence de 500 V est imposée sur deux bords opposés du domaine macroscopique, à savoir ($\bar{x} = 0$) et ($\bar{x} = 1$). Sur les deux autres bords, on suppose que le flux normal est nul. La matrice ainsi que l'inclusion sont constituées de matériaux dont la loi de comportement est de la forme

$$\mathbf{q}(u) = -(a_0 + a_1 u + a_2 u^2 + a_3 u^3) \nabla u + a_4 \|\nabla u\|^{p-1} \nabla u \quad (\text{II.45})$$

avec a_i des constantes choisies arbitrairement et explicitées dans la table II.1. L'index p , quant à lui, est identique dans les deux phases et est pris arbitrairement égal à 4.

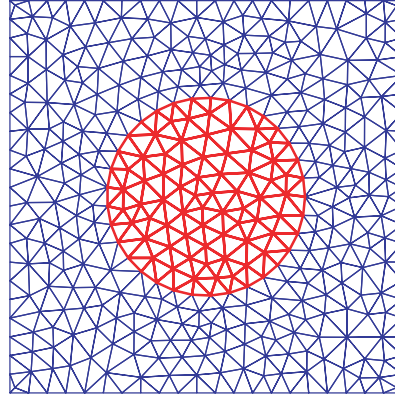


FIG. II.16 – VER à inclusion circulaire.

	a_0	a_1	a_2	a_3	a_4
Matrix	500	2.10^{-1}	3.10^{-3}	1.10^{-6}	1.10^{-10}
Inclusion	100	-5.10^{-2}	-4.10^{-4}	5.10^{-7}	2.10^{-7}

TAB. II.1 – Propriétés électriques utilisées.

Afin d'obtenir la base réduite, on suit la procédure énoncée ci-dessus en fixant le paramètre δ du critère de sélection à 10^{-6} . Seuls huit modes sont retenus. Le problème microscopique ne compte plus que 8 inconnues au lieu de 423. Le profil des 5 premiers est tracé en figure II.17. Il est maintenant possible de mener le calcul sur la totalité de la structure. On réalise alors trois simulations : la première sur la structure complète, la seconde en utilisant la méthode multi-échelle sans réduction et la dernière en utilisant la méthode multi-échelle combinée à la réduction de modèle. Le calcul sur la structure complète sert de référence. Outre ces trois calculs, on procède à trois autres simulations dans lesquelles on inverse les rôles de la matrice et de l'inclusion, c'est-à-dire les propriétés de l'inclusion deviennent celles de la matrice et réciproquement.

En figures II.18 et II.19, on trace l'évolution du champ de température le long d'une ligne découpant la géométrie en deux. On trace également le champ électrique qu'aurait la même plaque si elle n'était constituée que d'un des deux matériaux considérés. Une bonne concordance des résultats est observé dans les différentes

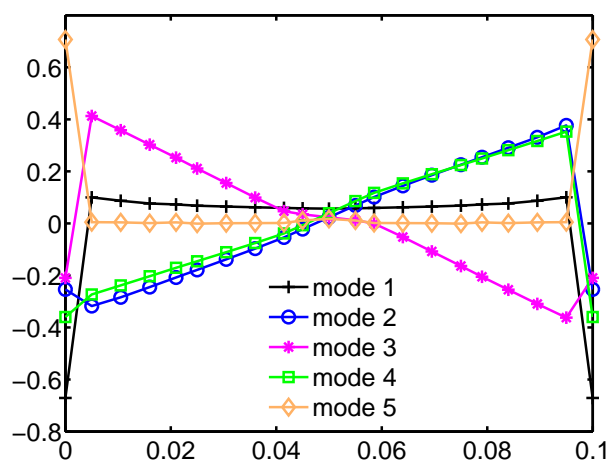


FIG. II.17 – Profils des 5 premiers modes du problème de conduction électrique.

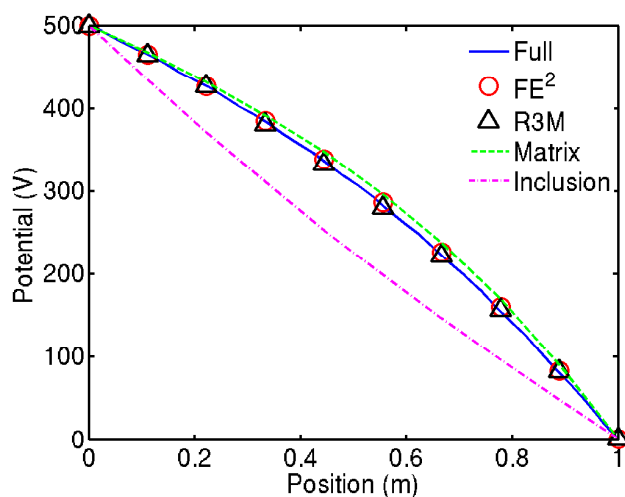


FIG. II.18 – Potentiel le long d'une ligne centrée.

simulations. De plus, on remarque bien que l'ajout d'inclusions moins conductrices diminue la conductivité de l'ensemble et inversement. Enfin, la figure II.21 montre un réel gain de temps de calcul.

Problème de conduction thermique

Ce dernier exemple porte sur la conduction thermique dans un composite constitué de zirconium et d'aluminium. La matrice est formée de zircone stabilisé dont

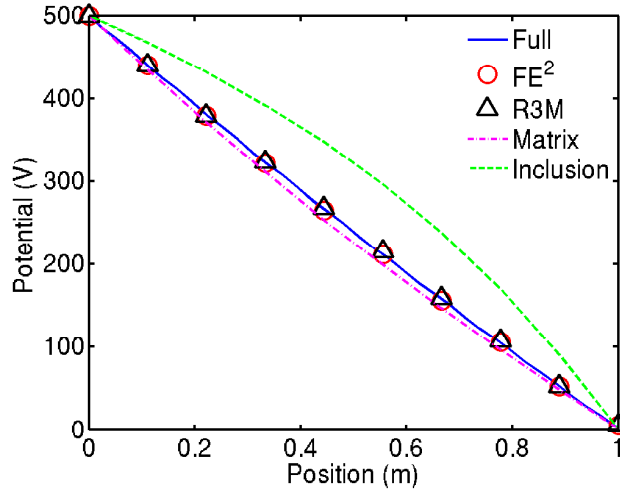


FIG. II.19 – Potentiel le long d'une ligne centrée avec les propriétés inversées.

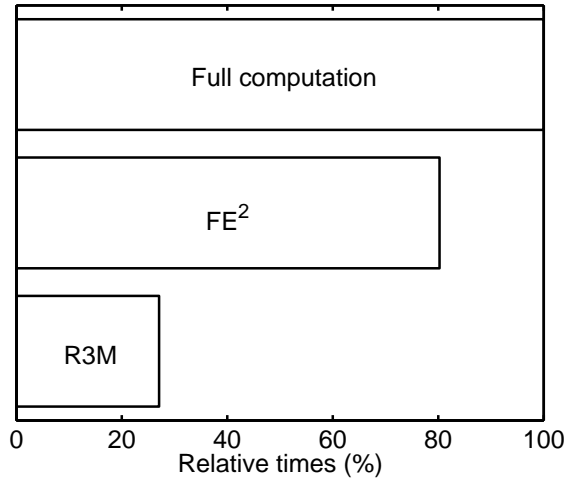


FIG. II.20 – Comparaison des temps de calcul.

la masse volumique est de $5.9.10^3 kg.m^{-3}$ alors que les inclusions sont en aluminium dont la masse volumique est de $3.9.10^3 kg.m^{-3}$. Sachant que leur conductivité thermique est de la forme

$$\mathbf{K}(u) = (\alpha_0 + \alpha_1 u + \alpha_2 u^2 + \alpha_3 u^3 + \alpha_4 u^{-1}) \mathbf{I}, \quad (\text{II.46})$$

les propriétés thermiques des deux matériaux sont explicitées dans le tableau II.2. Cette forme est motivée par des mesures expérimentales qui montrent qu'elle couvre une multitude d'applications [3, 11].

	α_0	α_1	α_2	α_3	α_4
$k_{alumina}$	23.6	$-3.68.10^{-2}$	$2.85.10^{-5}$	$-7.73.10^{-9}$	155
$k_{zirconia}$	2.91	$3.90.10^{-3}$	$3.60.10^{-6}$	$-9.55.10^{-10}$	-2.86
$Cp_{alumina}$	0.899	$8.91.10^{-4}$	$-8.43.10^{-7}$	$3.24.10^{-10}$	-3.71
$Cp_{zirconia}$	0.737	$-3.22.10^{-4}$	$7.75.10^{-7}$	$-3.78.10^{-10}$	-1.12

TAB. II.2 – Propriétés thermiques du zircon et de l'aluminium.

Dans ce problème, on impose une température de $500^\circ C$ sur deux bords consécutifs tandis que les deux autres sont supposés adiabatiques. La température initiale est de $100^\circ C$. Le critère de sélection fixé à 10^{-6} a permis de retenir sept modes, ce qui permet de se ramener à un problème impliquant 7 inconnues en lieu et place des 480 initiales. Le profil ainsi que l'allure des quatre modes les plus pertinents sont décrits par la figure II.22.

On procède alors à trois simulations : la première sur la structure complète qui sert de référence, la seconde en utilisant FE² et la troisième à l'aide de R3M. Le champ de température obtenu par chacune d'elle est représenté en figure II.23. On remarque que, globalement, le champ obtenu est le même dans les trois calculs. Afin de confirmer ces observations, on trace l'évolution de la température le long d'une ligne et on calcule l'erreur relative par rapport au calcul complet à l'aide de la formule

$$e = 100 \frac{\|T - T^{ref}\|}{\|T^{ref}\|}. \quad (\text{II.47})$$

On peut ainsi constater que l'erreur dont le maximum se situe au début de la simulation reste inférieure à 2%. De leur côté, le gain en temps de calcul est de l'ordre de 60% par rapport au calcul complet et de 40% par rapport au calcul multi-échelle. Bien entendu, dans ces comparaisons, on ne tient pas compte du temps mis pour déterminer la base réduite.

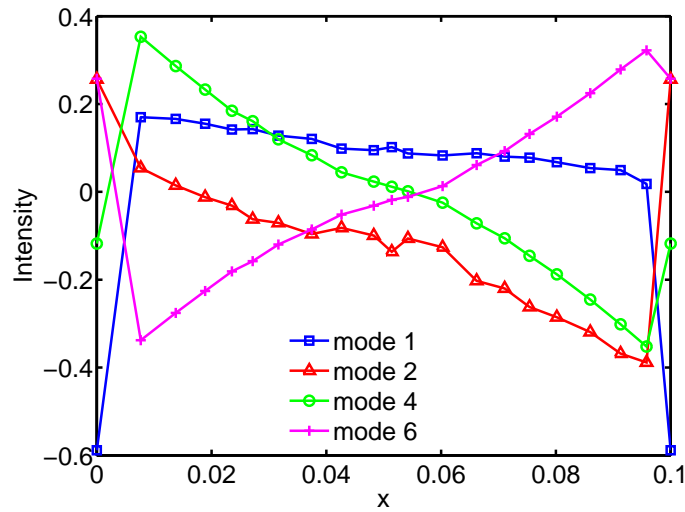
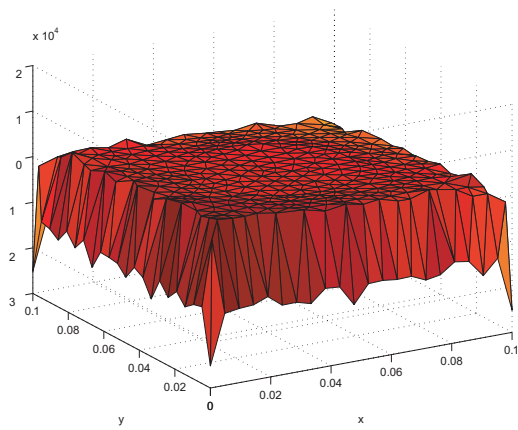


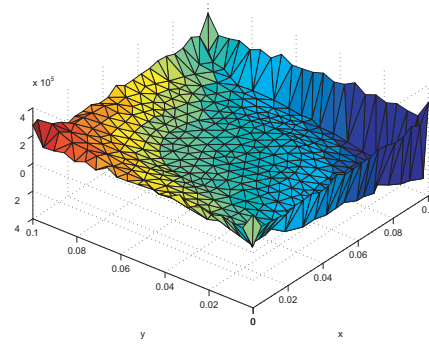
FIG. II.21 – Profils des modes les plus pertinents.

II.4 Conclusion

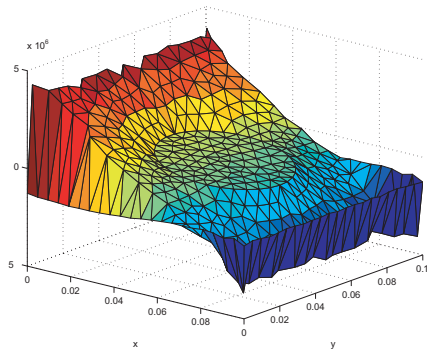
Ce chapitre a proposé une méthode numérique multi échelle avec réduction de modèle pour prédire le comportement non linéaire de matériaux hétérogènes. Cette technique présente l'avantage de réduire les coûts de calculs comparée à une approche FE^2 classique ou à un calcul dans lequel toutes les hétérogénéités sont modélisées. Elle a été validée sur différents benchmarks puis appliquée à des problèmes de conduction non linéaire thermique et électrique. Des applications à l'élasticité non linéaire seront présentées au chapitre suivant.



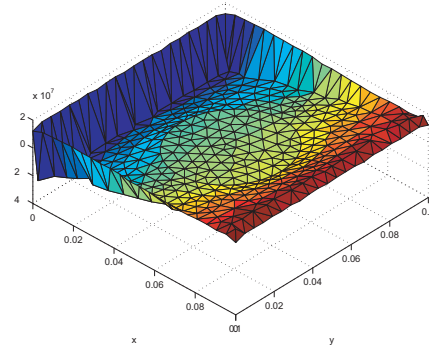
(a) Mode 1



(b) Mode 2

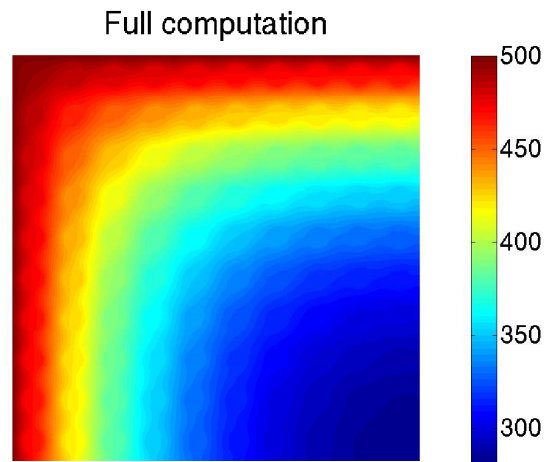


(c) Mode 4

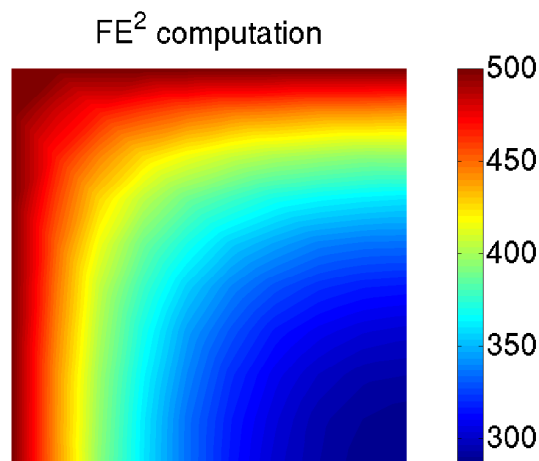


(d) Mode 6

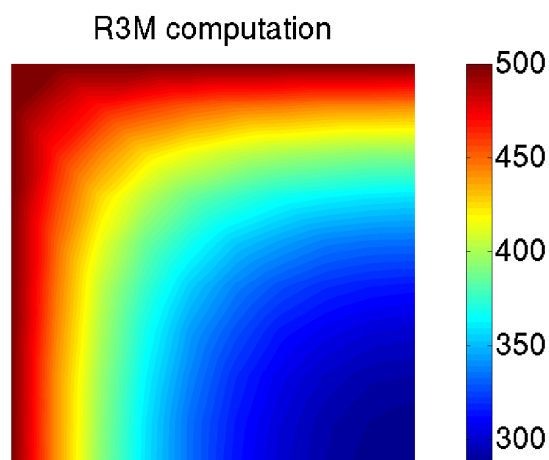
FIG. II.22 – Modes les plus pertinents.



(a) structure complète

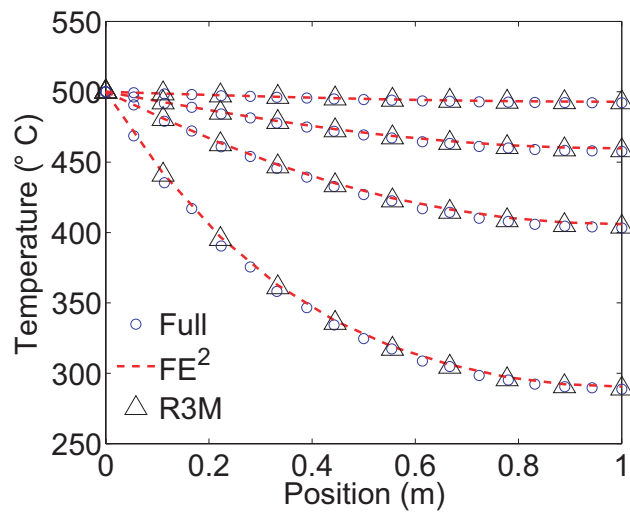


(b) FE²

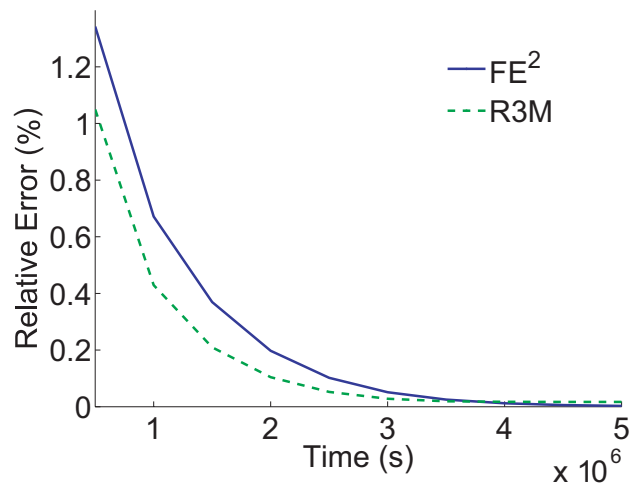


(c) R3M

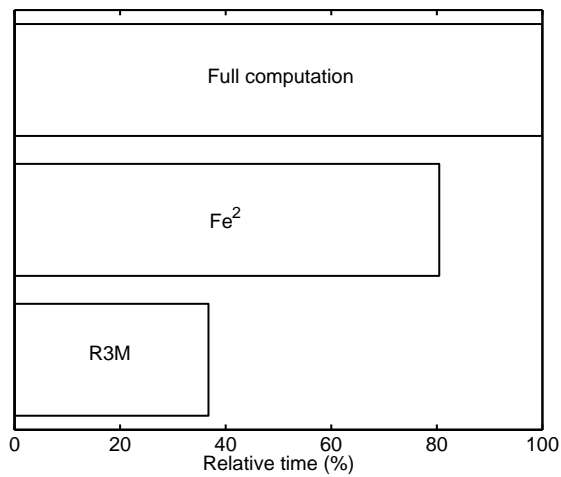
FIG. II.23 – Champ de température.



(a) Comparaison



(b) Erreur relative



(c) Comparaison temps

Chapitre III

Une approche XFEM/level-set pour le traitement des interfaces imparfaites en grandes déformations

Ce chapitre concerne la résolution de problèmes de modélisation de matériaux hétérogènes non linéaires en présence d'énergie d'interfaces. En calcul de structures, les interfaces entre les constituants sont généralement supposées parfaites et d'épaisseur nulle. Or, ces jonctions, de faible épaisseur, présentent souvent des propriétés différentes de celles des matériaux voisins. Si leur effet est négligeable à l'échelle "normale", il l'est moins à l'échelle micro ou nanométrique où les propriétés effectives du matériau hétérogène s'en trouve affectées puisque le rapport entre l'aire des interfaces et le volume devient grand [26, 30, 35, 45, 89].

Basée sur des approches rigoureuses développées dans [17, 59, 60, 108], la modélisation de ces effets s'effectue au moyen de modèles d'interfaces imparfaites [18, 19, 58] dont les deux plus courants sont le modèle ressort et le modèle cohérent. Dans le premier, le vecteur de contraintes est continu à la traversée de l'interface tandis que le champ de déplacement présente un saut qui est proportionnel à l'état de contraintes. Dans le second, retenu dans cette étude, le champ de déplacement est continu alors que le vecteur de contraintes ne l'est pas. Plus précisément, il doit vérifier l'équation de Young-Laplace. Une extension à l'élasticité non linéaire a été proposée dans [80, 81, 140]. D'un point de vue numérique, une méthode consiste à ajouter des éléments de surface pour prendre en compte ces effets [54, 109]. Cepen-

nant, la difficulté de cette tâche croit avec la complexité de la microstructure. Une alternative serait de permettre l'existence de discontinuités à l'intérieur des éléments finis. Dans ce contexte, on peut citer par exemple [16, 46, 61, 100].

Dans ce chapitre, on propose une méthode numérique permettant de prendre en compte les effets d'interfaces. Cette technique, initialement introduite dans [158–160], s'appuie sur la méthode des éléments finis étendus [13] combinée à la méthode de level-set [116]. Ainsi, on commence par dériver un modèle d'interface imparfaite en transformations finies pour lequel on cherche des solutions analytiques servant de benchmark à la méthode proposée [105, 107]. Ensuite, la méthode proposée est détaillée et des exemples numériques sont produits.

III.1 Modélisation des interfaces imparfaites

Dans cette partie, on introduit les outils mathématiques de base nécessaires à l'étude des interfaces imparfaites indépendamment de tout système de coordonnées. L'approche adoptée est celle proposée dans [59] et reprise dans [58, 65]. Puis, le modèle d'interface est développée et des solutions analytiques impliquant le modèle établi sont trouvées.

III.1.1 Éléments de géométrie différentielle

On considère une interface Γ séparant deux constituants d'un composite. Suivant la dimension du problème, il s'agit d'une courbe (2D) ou d'une surface (3D) que l'on suppose, dans les deux cas, suffisamment régulière. Une méthode issue de la géométrie différentielle permettant de décrire Γ indépendamment de tout système de coordonnées consiste à caractériser l'interface par une fonction implicite [41]. Cette approche est privilégiée à la description paramétrique classique car elle se prête bien au calcul numérique de par son lien avec la méthode level-set. Ainsi, l'interface est représentée par l'iso-valeur d'une fonction scalaire Φ :

$$\Gamma = \{\mathbf{X} \in \mathbb{R}^k \mid \Phi(\mathbf{X}) = 0\} \quad (\text{III.1})$$

où k désigne la dimension de l'espace considérée. En supposant que la fonction Φ est dérivable et que $\nabla\Phi(\mathbf{X}) \neq 0$ pour tout point de l'interface, on définit $\mathbf{n}(\mathbf{X})$, le

vecteur unitaire normal à l'interface, par

$$\mathbf{n}(\mathbf{X}) = \frac{\nabla\Phi(\mathbf{X})}{\|\nabla\Phi(\mathbf{X})\|} \quad (\text{III.2})$$

où $\|\cdot\|$ est la norme euclidienne. Il est également possible d'introduire deux opérateurs orthogonaux de projection, à savoir

$$\mathbf{N}(\mathbf{X}) = \mathbf{n}(\mathbf{X}) \otimes \mathbf{n}(\mathbf{X}) \quad \text{et} \quad \mathbf{T}(\mathbf{X}) = \mathbf{I} - \mathbf{N}(\mathbf{X}) \quad (\text{III.3})$$

où \mathbf{I} désigne le tenseur identité du second ordre. D'un point de vue purement géométrique, l'opérateur $\mathbf{T}(\mathbf{X})$ projette un champ sur le plan tangent à l'interface en \mathbf{X} tandis que $\mathbf{N}(\mathbf{X})$ le projette sur la droite de vecteur directeur $\mathbf{n}(\mathbf{X})$ et passant par \mathbf{X} . Par la suite, afin d'alléger les notations, on omet la dépendance en \mathbf{X} des opérateurs. De part leur orthogonalité, ces opérateurs vérifient les relations suivantes

$$\mathbf{T}^2 = \mathbf{T}, \quad \mathbf{T}^T = \mathbf{T}, \quad \mathbf{N}^2 = \mathbf{N}, \quad \mathbf{N}^T = \mathbf{N} \quad \text{et} \quad \mathbf{TN} = \mathbf{NT} = \mathbf{0}. \quad (\text{III.4})$$

Par conséquent, tout vecteur \mathbf{v} peut se décomposer de façon unique en une composante tangentielle \mathbf{v}_s et une composante normale \mathbf{v}_n tel que

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_s + \mathbf{v}_n \quad (\text{III.5})$$

avec

$$\mathbf{v}_s = \mathbf{T}.\mathbf{v} \quad \text{et} \quad \mathbf{v}_n = \mathbf{N}.\mathbf{v}. \quad (\text{III.6})$$

De plus, lorsque \mathbf{v} est dérivable, on peut aussi décomposer certains opérateurs

$$\nabla\mathbf{v} = \nabla_s\mathbf{v} + \nabla_n\mathbf{v} \quad (\text{III.7})$$

$$\text{div}\mathbf{v} = \text{div}_s\mathbf{v} + \text{div}_n\mathbf{v} \quad (\text{III.8})$$

avec

$$\nabla_s\mathbf{v} = \nabla\mathbf{v}.\mathbf{T} \quad \text{div}_s\mathbf{v} = \nabla\mathbf{v} : \mathbf{T} \quad (\text{III.9})$$

$$\nabla_n\mathbf{v} = \nabla\mathbf{v}.\mathbf{N} \quad \text{div}_n\mathbf{v} = \nabla\mathbf{v} : \mathbf{N}. \quad (\text{III.10})$$

Ces décompositions subsistent pour des tenseurs du second ordre ou des fonctions scalaires. On peut aussi montrer que ces opérateurs vérifient les relations suivantes

$$\text{div}_s(\Phi\mathbf{v}) = \Phi\text{div}_s\mathbf{v} + \mathbf{v}.\nabla_s\Phi \quad (\text{III.11})$$

$$\text{div}_s(\Phi\mathbf{A}) = \Phi\text{div}_s\mathbf{A} + \mathbf{A}.\nabla_s\Phi \quad (\text{III.12})$$

$$\text{div}_s(\mathbf{A}^T\mathbf{v}) = \mathbf{v}\text{div}_s\mathbf{A} + \mathbf{A}.\nabla_s\mathbf{v}. \quad (\text{III.13})$$

ainsi que

$$\int_{\Gamma} \operatorname{div}_s \mathbf{v} \, dS = \int_{\partial\Gamma} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, dl \quad (\text{III.14})$$

$$\int_{\Gamma} \operatorname{div}_s \mathbf{A} \, dS = \int_{\partial\Gamma} \mathbf{A} \cdot \mathbf{n} \, dl \quad (\text{III.15})$$

Dans toutes ces relations, les indices n et s sont associés aux composantes normale et tangentielle des quantités indexées.

III.1.2 Relations d'Hadamard

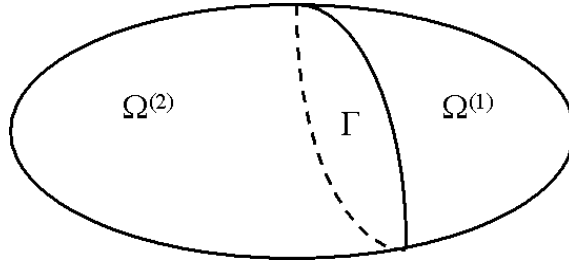


FIG. III.1 – Relations d'Hadamard.

Avant de rentrer dans le vif du sujet, il convient de rappeler les relations de compatibilité d'Hadamard [69] dont l'objectif est d'exprimer le saut de la dérivée d'une fonction continue (scalaire, vectorielle ou tensorielle) mais dérivable presque partout. On se limite au cas de fonctions vectorielles. A ce titre, on considère le champ $\mathbf{v}(\mathbf{x})$ défini par

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}) = \begin{cases} \mathbf{v}^{(1)}(\mathbf{x}) & \text{si } \mathbf{x} \in \Omega^{(1)} \\ \mathbf{v}^{(2)}(\mathbf{x}) & \text{si } \mathbf{x} \in \Omega^{(2)} \end{cases} \quad (\text{III.16})$$

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}) = \mathbf{v}^{(1)}(\mathbf{x}) = \mathbf{v}^{(2)}(\mathbf{x}) \quad \text{si } \mathbf{x} \in \Gamma. \quad (\text{III.17})$$

Le développement de Taylor appliqué aux fonctions $\mathbf{v}(\mathbf{x})$ en deux points voisins de Γ noté \mathbf{x}_1 et \mathbf{x}_2

$$\mathbf{v}^{(1)}(\mathbf{x}_2) = \mathbf{v}^{(1)}(\mathbf{x}_1) + \nabla \mathbf{v}^{(1)}(\mathbf{x})(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1) + o(\|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1\|^2) \quad (\text{III.18})$$

$$\mathbf{v}^{(2)}(\mathbf{x}_2) = \mathbf{v}^{(2)}(\mathbf{x}_1) + \nabla \mathbf{v}^{(2)}(\mathbf{x})(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1) + o(\|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1\|^2) \quad (\text{III.19})$$

conduit à la relation

$$[\nabla \mathbf{v}^{(2)}(\mathbf{x}) - \nabla \mathbf{v}^{(1)}(\mathbf{x})](\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1) = o(\|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1\|^2). \quad (\text{III.20})$$

Faisant tendre \mathbf{x}_2 vers \mathbf{x}_1 , on obtient

$$[\nabla \mathbf{v}^{(2)}(\mathbf{x}) - \nabla \mathbf{v}^{(1)}(\mathbf{x})] \mathbf{m}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \quad (\text{III.21})$$

où $\mathbf{m}(\mathbf{x})$ est un vecteur unitaire tangent à Γ . On en déduit alors que le saut est au maximum de rang 1 et a la forme

$$\nabla \mathbf{v}^{(2)}(\mathbf{x}) - \nabla \mathbf{v}^{(1)}(\mathbf{x}) = \mathbf{a} \otimes \mathbf{n}(\mathbf{x}) \quad (\text{III.22})$$

où \mathbf{a} est un vecteur. Cette relation implique que le gradient de surface ainsi que la divergence surfacique sont continus à la traversée de l'interface, soit

$$\nabla_s \mathbf{v}^{(1)}(\mathbf{x}) = \nabla_s \mathbf{v}^{(2)}(\mathbf{x}) \quad \text{si } \mathbf{x} \in \Gamma \quad (\text{III.23})$$

$$\text{div}_s \mathbf{v}^{(1)}(\mathbf{x}) = \text{div}_s \mathbf{v}^{(2)}(\mathbf{x}) \quad \text{si } \mathbf{x} \in \Gamma. \quad (\text{III.24})$$

Des relations similaires existent pour des fonctions scalaires ou tensorielles [58].

III.1.3 Construction du modèle

Approche directe

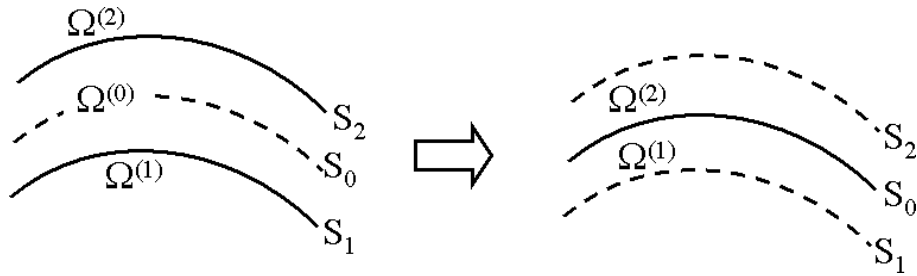


FIG. III.2 – Remplacement d'une interphase par une interface.

A présent, on aborde le coeur de ce chapitre, à savoir l'obtention d'un modèle d'interface imparfaite dans le cadre de l'élasticité non linéaire. L'idée de base est de remplacer l'interphase d'épaisseur non nulle par une interface d'épaisseur nulle à travers laquelle des conditions de saut doivent être satisfaites. Pour cela, on considère deux configurations. Dans la première, une interphase d'épaisseur uniforme h se trouve au milieu de deux matériaux. On note 1 et 2 les deux matériaux et 0 l'interphase. On suppose que les trois phases sont parfaitement collées au travers de

deux surfaces S_1 et S_2 , ce qui implique la continuité du champ de déplacement \mathbf{u} ainsi que du vecteur de contraintes \mathbf{t} :

$$\mathbf{u}^{(1)}|_{S_1} = \mathbf{u}^{(0)}|_{S_1} \qquad \mathbf{t}^{(1)}|_{S_1} = \mathbf{t}^{(0)}|_{S_1} \qquad (\text{III.25})$$

$$\mathbf{u}^{(2)}|_{S_2} = \mathbf{u}^{(0)}|_{S_2} \qquad \mathbf{t}^{(2)}|_{S_2} = \mathbf{t}^{(0)}|_{S_2} \qquad (\text{III.26})$$

Dans la seconde configuration, l'interphase est éliminée et remplacée par une interface imparfaite. L'objectif de cette partie consiste à déterminer les conditions dont l'interface doit être dotée afin de préserver l'équivalence à une erreur près. Dans le cas linéaire et pour une interphase très rigide, [58] montre, à l'aide d'une analyse asymptotique et d'un développement de Taylor, que les conditions à la nouvelle interface sont

$$[[\mathbf{u}]] = \mathbf{0} \quad \text{et} \quad [[\mathbf{t}]] = -\text{div}_s \boldsymbol{\sigma}_s \qquad (\text{III.27})$$

où $\boldsymbol{\sigma}_s$ désigne le tenseur de contraintes de Cauchy associé à l'interface. Dans ce modèle d'interface dite cohérente, la seconde relation correspond à l'équation de Young-Laplace largement utilisée pour décrire les effets de surface dans les matériaux nanométriques [26, 44]. Une généralisation en grandes déformations de cette relation conduit à

$$[[\mathbf{P}]] \mathbf{N} = -\text{div}_{X_s} \mathbf{P}_s \qquad (\text{III.28})$$

où \mathbf{P}_s représente le premier tenseur de Piola-Kirchhoff associé à l'interface tandis que div_{X_s} est l'opérateur de divergence surfacique sur la configuration de référence. Dans un contexte hyperélastique, on suppose que la relation contraintes-déformations de l'interface dérive d'un potentiel U dépendant de sa déformation [4, 81]. Toutefois, il convient d'exprimer ce potentiel en fonction d'une quantité continue à travers l'interface afin d'être pertinent. L'utilisation des relations d'Hadamard établies précédemment sur la continuité du champ de déplacement suggère que le gradient de déformation admet un saut normal à l'interface de la forme

$$[[\mathbf{F}]] = \mathbf{a} \otimes \mathbf{N}. \qquad (\text{III.29})$$

Sachant que le gradient de déformation le long de l'interface \mathbf{F}_s peut s'exprimer par la projection de sa contrepartie volumique

$$\mathbf{F}_s = \mathbf{F}\mathbf{T} = \mathbf{T} + \nabla_{X_s} \mathbf{u}, \qquad (\text{III.30})$$

on en déduit que

$$[[\mathbf{F}_s]] = \mathbf{0}. \qquad (\text{III.31})$$

Par conséquent, on propose d'exprimer le potentiel surfacique en fonction de \mathbf{F}_s . Ainsi, la relation contraintes-déformations s'écrit

$$\mathbf{P}_s = \frac{\partial U(\mathbf{F}_s)}{\partial \mathbf{F}_s}. \quad (\text{III.32})$$

Afin de satisfaire le principe d'objectivité, les densités d'énergie surfacique doivent dépendre du tenseur de Cauchy droit surfacique \mathbf{C}_s défini par

$$\mathbf{C}_s = \mathbf{F}_s^T \mathbf{F}_s = \mathbf{TCT}. \quad (\text{III.33})$$

Pour un traitement numérique, il convient de donner l'expression du second tenseur de Piola-Kirchhoff surfacique \mathbf{S}_s , à savoir

$$\mathbf{S}_s = 2 \frac{\partial U(\mathbf{C}_s)}{\partial \mathbf{C}_s}. \quad (\text{III.34})$$

Approche énergétique

À présent, on cherche à établir une forme énergétique du problème hyperélastique avec prise en compte des effets d'interface imparfaite [81, 140]. Sans perte de généralité, on considère que le solide \mathcal{B} est constitué uniquement de deux phases tel que $\Omega_0 = \Omega_0^{(1)} \cup \Omega_0^{(2)}$ et $\Omega_0^{(1)} \cap \Omega_0^{(2)} = \Gamma$ où Γ représente l'interface entre les deux matériaux.

Sous ces conditions, l'énergie de déformation du solide W_{int} est la somme des contributions volumiques et surfacique telle que

$$W_{int} = \sum_{i=1}^2 \left(\int_{\Omega_0^{(i)}} W^{(i)}(\mathbf{C}) dV \right) + \int_{\Gamma} U(\mathbf{C}_s) dS \quad (\text{III.35})$$

Classiquement, l'équilibre mécanique du solide revient à déterminer un minimum de l'énergie potentielle définie par

$$L(\mathbf{u}) = W_{int} + W_{ext} \quad (\text{III.36})$$

dans laquelle W_{ext} désigne le potentiel des forces extérieures

$$W_{ext} = - \int_{\Omega_0} \mathbf{G}\mathbf{u} dV - \int_{\partial\Omega_0^t \setminus \partial\Gamma} \bar{\mathbf{t}}_0 \mathbf{u} dS - \int_{\partial\Omega_0^t \cap \partial\Gamma} \bar{\mathbf{t}}_{0s} \mathbf{u} dL. \quad (\text{III.37})$$

Cette expression tient compte des forces de volume s'exerçant sur toutes les phases et des efforts de traction sur le bord extérieur. Si aucune des interfaces n'est débouchante, le dernier terme est nul. Dans le cas contraire, le vecteur $\bar{\mathbf{t}}_{0s}$ désigne les

efforts surfaciques appliqués aux extrémités de Γ .

L'existence d'un minimum local est assujettie à un certain nombre de conditions portant sur les densités d'énergie volumiques ainsi que surfaciques. Il est bien connu qu'une des conditions serait la convexité de ces densités. Or, on a déjà vu que cette condition est physiquement irréaliste compte-tenu de la condition d'imperméabilité définissant le domaine $\{\mathbf{F} | \det \mathbf{F} > 0\}$ comme non convexe. Le cas de la partie volumique est résolu en se restreignant aux densités d'énergie polyconvexes. Quant aux interfaces, on se propose d'utiliser également des densités d'énergie polyconvexes de dimensions inférieures. Avec ce seul choix, l'interface est susceptible de résister à des efforts de compression, ce qui est incompatible avec la notion de membrane au sens strict du terme [4, 118]. Néanmoins, un point selle peut être obtenu par

$$D_{\delta v} L(\mathbf{u}) = D_{\delta v} W_{int} + D_{\delta v} W_{ext} = 0 \quad (\text{III.38})$$

avec

$$D_{\delta v} W_{int} = \sum_{i=1}^2 \left(\int_{\Omega_0^{(i)}} \mathbf{P}^{(i)} : \nabla_X \delta \mathbf{v} dV \right) + \int_{\Gamma} \mathbf{P}_s : \nabla_{X_s} \delta \mathbf{v} dS, \quad (\text{III.39})$$

$$D_{\delta v} W_{ext} = - \int_{\Omega_0} \mathbf{G} \delta \mathbf{v} dV - \int_{\partial \Omega_0^t \setminus \partial \Gamma} \bar{\mathbf{t}}_0 \delta \mathbf{v} dS - \int_{\partial \Omega_0^t \cap \partial \Gamma} \bar{\mathbf{t}}_{0s} \delta \mathbf{v} dL. \quad (\text{III.40})$$

L'utilisation du théorème de Stokes conduit à

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^2 \left(\int_{\Omega_0^{(i)}} \operatorname{div}_X \mathbf{P}^{(i)} \delta \mathbf{v} dV \right) + \int_{\Gamma} \operatorname{div}_{X_s} \mathbf{P}_s \delta \mathbf{v} dS \\ - \int_{\Gamma} (\mathbf{P}^{(1)} \mathbf{N}^{(1)} + \mathbf{P}^{(2)} \mathbf{N}^{(2)}) \delta \mathbf{v} dS + \int_{\Omega_0} \mathbf{G} \delta \mathbf{v} dV = \mathbf{0}. \end{aligned} \quad (\text{III.41})$$

En remarquant le sens opposé des normales dans chaque phase, à savoir $\mathbf{N}^{(2)} = -\mathbf{N}^{(1)}$, on obtient

$$\sum_{i=1}^2 \left(\int_{\Omega_0^{(i)}} \operatorname{div}_X \mathbf{P}^{(i)} \delta \mathbf{v} dV \right) + \int_{\Gamma} (\operatorname{div}_{X_s} \mathbf{P}_s + \llbracket \mathbf{P} \rrbracket \mathbf{N}^{(1)}) \delta \mathbf{v} dS + \int_{\Omega_0} \mathbf{G} \delta \mathbf{v} dV = \mathbf{0}. \quad (\text{III.42})$$

Cette relation étant valable pour tout champ arbitraire $\delta \mathbf{v}$, on en sort, à la fois,

– un système d'équilibre volumique

$$\begin{cases} \operatorname{div}_X \mathbf{P}^{(i)} + \mathbf{G} = \mathbf{0} & \text{dans } \Omega_0^{(i)}, \\ \mathbf{P}^{(i)} \mathbf{N}^{(i)} = \bar{\mathbf{t}}_0 & \text{sur } \partial \Omega_0^t \setminus \Gamma, \end{cases} \quad (\text{III.43})$$

– un système d'équilibre surfacique

$$\begin{cases} \operatorname{div}_{X_s} \mathbf{P}_s = - \llbracket \mathbf{P} \rrbracket \mathbf{N} & \text{sur } \Gamma, \\ \mathbf{P}_s \mathbf{M} = \bar{\mathbf{t}}_{0s} & \text{sur } \partial\Omega_0^t \cap \partial\Gamma. \end{cases} \quad (\text{III.44})$$

où \mathbf{M} désigne la normale unitaire extérieure à Γ appartenant au plan tangent de Γ . On retrouve ainsi les équations classiques d'un problème aux limites en transformations finies complétées par des conditions d'équilibre de l'interface consistant en la généralisation de l'équation de Young-Laplace et des conditions aux limites.

III.2 Solutions analytiques

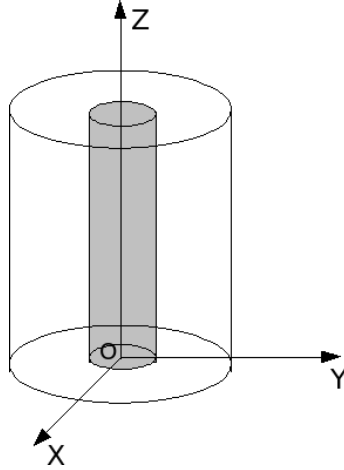


FIG. III.3 – Composite utilisé.

A présent, on propose des solutions analytiques mettant en jeu des matériaux hyperélastiques en présence d'interfaces imparfaites. Ces solutions permettent de valider la méthode numérique développée un peu plus loin. On s'intéresse au cas d'un cylindre renforcé par une fibre dont l'orientation correspond à celle de son axe de révolution comme le montre la figure III.15. On note R_e le rayon du cylindre, R_i celui de la fibre et H la longueur du composite. Compte-tenu de la géométrie choisie, on travaille, dans les deux configurations, avec un système de coordonnées cylindriques dont la troisième direction coïncide avec celle du cylindre. Un point matériel est alors caractérisé par ses coordonnées (R, Θ, Z) dans la configuration de référence et par (r, θ, z) dans la configuration déformée. Les bases associées aux

configurations initiale et actuelle sont notées respectivement \mathbf{E}_i et \mathbf{e}_i avec $i = r, \theta, z$.

Afin de simplifier le problème, on choisit d'étudier des matériaux hyperélastiques incompressibles dont la loi de comportement dérive de densités d'énergie de type néo-hookéenne de la forme

$$W^{(i)} = \frac{\mu^{(i)}}{2} (I_1 - 3) - p(J - 1) \quad i = 1, 2. \quad (\text{III.45})$$

Ainsi, l'état de contraintes dans les deux configurations s'écrit

$$\mathbf{P} = \mu^{(i)} \mathbf{F} - p \mathbf{F}^{-T} \quad (\text{III.46})$$

$$\boldsymbol{\sigma} = \mu^{(i)} \mathbf{B} - p \mathbf{I} \quad (\text{III.47})$$

L'interface, quant à elle, possède une densité d'énergie de type néo-hookéenne compressible dont l'expression est

$$U = \frac{\mu_s}{2} (I_1^s - 2 - 2 \ln J_s) - \frac{c_s}{2} \ln J_s + \frac{c_s}{4} (J_s - 1) \quad (\text{III.48})$$

Son état de contraintes est alors

$$\mathbf{P}_s = \mu_s \mathbf{F}_s + \left(\frac{c_s J_s}{4} - \frac{c_s}{2} - \mu_s \right) \mathbf{F}_s^{-T} \quad (\text{III.49})$$

$$\boldsymbol{\sigma}_s = J_s^{-1} \mu_s \mathbf{B}_s + \left(\frac{c_s J_s}{4} - \frac{c_s}{2} - \mu_s \right) J_s^{-1} \mathbf{I}. \quad (\text{III.50})$$

Ses relations sont générales et restent valables pour toute transformation subie. Par la suite, on s'intéresse à des déformations courantes, à savoir la traction simple, le cisaillement anti-plan et la torsion.

III.2.1 Traction simple

Cette première déformation consiste en une simple extension longitudinale du cylindre en supposant que les différents plans perpendiculaires à l'axe restent plans. Cette sollicitation implique nécessairement le rétrécissement radiale du cylindre du fait de l'hypothèse d'incompressibilité et de la géométrie. Ainsi, en considérant l'une des extrémités fixe et l'autre soumise à un déplacement δ , on peut établir les relations

$$r = R + f^{(i)}(R), \quad \theta = \Theta, \quad z = \frac{H + \delta}{H} Z \quad (\text{III.51})$$

où $f^{(i)}$ désigne une fonction scalaire à priori différentiable dans les deux phases reflétant le rétrécissement. La condition d'incompressibilité se traduit alors par l'équation différentielle :

$$f_{,r}^{(i)}(R) f^{(i)}(R) = \frac{H}{H + \delta} R \quad (\text{III.52})$$

dont la solution est

$$f^{(i)}(r) = -\sqrt{\frac{H}{H + \delta} R^2 + C_1^{(i)}}. \quad (\text{III.53})$$

où $C_1^{(i)}$ désigne une constante d'intégration pour la phase i . La présence de matière à l'origine ($R = 0$) combinée à la continuité du déplacement à la traversée de l'interface entraîne la nullité de la constante dans les deux phases, si bien que le gradient de déformation s'écrit, dans les deux phases, de la façon suivante :

$$\mathbf{F} = -\sqrt{\frac{H}{H + \delta}} (\mathbf{e}_r \otimes \mathbf{E}_r + \mathbf{e}_\theta \otimes \mathbf{E}_\theta) + \frac{H + \delta}{H} \mathbf{e}_z \otimes \mathbf{E}_z. \quad (\text{III.54})$$

L'état de contraintes peut être déterminé à une pression près

$$\begin{aligned} \mathbf{P}^{(i)} = & \left[\mu^{(i)} \sqrt{\frac{H}{H + \delta}} - p^{(i)} \sqrt{\frac{H + \delta}{H}} \right] (\mathbf{e}_r \otimes \mathbf{E}_r + \mathbf{e}_\theta \otimes \mathbf{E}_\theta) \\ & + \left[\mu^{(i)} \frac{H + \delta}{H} - p^{(i)} \frac{H}{H + \delta} \right] \mathbf{e}_z \otimes \mathbf{E}_z. \end{aligned} \quad (\text{III.55})$$

L'équilibre mécanique permet de démontrer que la pression est constante dans chaque phase. En faisant l'hypothèse que la surface extérieure est libre de contrainte, on en déduit que la pression dans la matrice est

$$p^{(2)} = \mu^{(2)} \frac{H}{H + \delta}. \quad (\text{III.56})$$

Afin de déterminer la pression dans la fibre à partir de l'équation de Young-Laplace, il convient d'exprimer la déformation de la surface. La normale restant égale à \mathbf{E}_r , le tenseur de Cauchy surfacique s'écrit

$$\mathbf{C}_s = \frac{H}{H + \delta} \mathbf{E}_\theta \otimes \mathbf{E}_\theta + \left(\frac{H + \delta}{H} \right)^2 \mathbf{E}_z \otimes \mathbf{E}_z, \quad (\text{III.57})$$

ce qui génère l'état de contraintes suivant

$$\mathbf{P}_s = \frac{\delta [2\mu_s H - c_s(\delta + H)]}{2H^{3/2} \sqrt{\delta + H}} \mathbf{e}_\theta \otimes \mathbf{E}_\theta + \frac{\delta [H(c_s + 4\mu_s) + 2\delta\mu_s]}{2H(\delta + H)} \mathbf{e}_z \otimes \mathbf{E}_z. \quad (\text{III.58})$$

Finalement, on obtient une pression dans la fibre de la forme

$$p^{(1)} = \mu^{(1)} \frac{H}{H + \delta} + \frac{c_s \delta (H + \delta) - 2H\delta\mu_s}{2HR_i(\delta + H)}. \quad (\text{III.59})$$

Il est important de souligner que seule la fibre est affectée par la présence de l'interface cohérente. Si l'interface redevient parfaite, la pression dans la fibre devient

$$p^{(1)} = \mu^{(1)} \frac{H}{H + \delta}. \quad (\text{III.60})$$

III.2.2 Torsion simple

Dans ce nouvel exemple, le cylindre est soumis à une torsion pure : l'une de ces extrémités est fixe pendant que l'autre subit une rotation dans son plan. On suppose qu'aucun rétrécissement, allongement ou voilement n'est possible. Sous ces hypothèses, on peut établir que

$$r = R, \quad \theta = \Theta + \tau Z, \quad z = Z \quad (\text{III.61})$$

où τ est l'angle de rotation par unité de longueur. L'intensité géométrique de cette torsion est caractérisée par la rotation de l'extrémité, à savoir τH . Le gradient de déformation apparaît alors comme la décomposition d'un glissement suivi d'une rotation dont la représentation matricielle est

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} \cos(\tau Z) & -\sin(\tau Z) & 0 \\ \sin(\tau Z) & \cos(\tau Z) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & R\tau \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad (\text{III.62})$$

ce qui conduit à un tenseur de déformations de Cauchy droit de la forme

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & R\tau \\ 0 & R\tau & 1 + (R\tau)^2 \end{bmatrix}. \quad (\text{III.63})$$

On peut aussi remarquer que la condition d'incompressibilité est automatiquement vérifiée pour cette déformation. L'état de contraintes généré dans chaque phase s'écrit

$$\mathbf{P}^{(i)} = \begin{bmatrix} (\mu^{(i)} - p^{(i)})\cos(\tau Z) & (p^{(i)} - \mu^{(i)})\sin(\tau Z) & -\mu^{(i)} R\tau \sin(\tau Z) \\ (\mu^{(i)} - p^{(i)})\sin(\tau Z) & (\mu^{(i)} - p^{(i)})\cos(\tau Z) & \mu^{(i)} R\tau \cos(\tau Z) \\ 0 & R\tau p^{(i)} & \mu^{(i)} - p^{(i)} \end{bmatrix}. \quad (\text{III.64})$$

L'utilisation de l'équilibre mécanique permet de démontrer que la pression est une fonction de R uniquement. Comme précédemment, en supposant le bord extérieur libre de contrainte, il est possible d'estimer la pression dans la matrice

$$p^{(2)} = \frac{\mu^{(2)}\tau^2}{2} (R_e^2 - R^2) + \mu^{(2)}. \quad (\text{III.65})$$

Pour celle dans la fibre, on a besoin d'explicitier les déformations occasionnées à l'interface, à savoir

$$\mathbf{C}_s = \begin{bmatrix} 1 & R\tau \\ R\tau & 1 + (R\tau)^2 \end{bmatrix} \quad (\text{III.66})$$

ainsi que son état de contraintes

$$\mathbf{P}_s = \begin{bmatrix} 0 & -\mu_s R\tau \sin(\tau Z) \\ 0 & \mu_s R\tau \cos(\tau Z) \\ \mu_s R\tau & 0 \end{bmatrix}. \quad (\text{III.67})$$

En utilisant l'équation de Young-Laplace, on obtient la pression à l'intérieur de la fibre

$$p^{(1)} = \frac{\mu^{(2)}\tau^2}{2} (R_e^2 - R_i^2) + \frac{\mu^{(1)}\tau^2}{2} (R_i^2 - R^2) + \mu^{(1)} + \mu_s \tau^2 R_i \quad (\text{III.68})$$

Là-encore, l'énergie de surface ne modifie que l'état de la fibre et non celui de la matrice.

III.2.3 Cisaillement anti-plan

Le dernier exemple pour le cylindre composite porte sur le cisaillement anti-plan : la face latérale du cylindre est soumis à un déplacement longitudinal δ tandis que l'axe de révolution reste immobile. Dans le cas axisymétrique, on peut établir que le déplacement est de la forme

$$\mathbf{u}^{(i)} = f^{(i)}(R)\mathbf{e}_z, \quad (\text{III.69})$$

ce qui entraîne un gradient de déformation

$$\mathbf{F}^{(i)} = \mathbf{I} + f_{,R}^{(i)}(R) \mathbf{e}_z \otimes \mathbf{E}_r \quad (\text{III.70})$$

et un tenseur de déformation de Cauchy droit

$$\mathbf{C}^{(i)} = \mathbf{I} + (f_{,r}^{(i)}(R))^2 \mathbf{E}_r \otimes \mathbf{E}_r + f_{,r}^{(i)}(R) [\mathbf{E}_r \otimes \mathbf{E}_z + \mathbf{E}_z \otimes \mathbf{E}_r]. \quad (\text{III.71})$$

La condition d'incompressibilité est automatiquement vérifiée. Ainsi, il est impossible de déterminer, pour le moment, la forme du champ de déplacement. L'utilisation de la relation contraintes-déformations donne l'expression du premier tenseur de Piola-Kirchhoff, à savoir

$$\mathbf{P}^{(i)} = [\mu^{(i)} - p^{(i)}] \mathbf{I} + f_{,r}^{(i)}(R) [p^{(i)} \mathbf{e}_r \otimes \mathbf{E}_z + \mu^{(i)} \mathbf{e}_z \otimes \mathbf{E}_r] \quad (\text{III.72})$$

où $p^{(i)}$ désigne la pression hydrostatique. L'équilibre mécanique produit les trois équations suivantes

$$\begin{aligned} p_{,r}^{(i)} &= p_{,z}^{(i)} f_{,r}^{(i)} \\ p_{,\theta}^{(i)} &= 0 \\ p_{,z}^{(i)} &= \mu^{(i)} \left[f_{,rr}^{(i)} + \frac{f_{,r}^{(i)}}{R} \right]. \end{aligned} \quad (\text{III.73})$$

où le doublement de l'indice indique une dérivée seconde. Dans ces équations, on a omis les dépendances de p et de f afin de ne pas les surcharger. Ce système permet de déduire que la pression ne dépend pas de Θ et qu'elle est linéaire en Z . On en sort également la forme de f , à savoir

$$f(R) = \frac{C_1^{(i)} R^2}{4\mu^{(i)}} + C_2^{(i)} \ln(R) + C_3^{(i)} \quad (\text{III.74})$$

où $C_i^{(i)}$ ($i=1..3$) sont des constantes à déterminer. L'introduction de cette relation dans le champ de contraintes conduit à

$$p^{(i)}(R, Z) = C_1^{(i)} Z + \frac{\left(C_1^{(i)} R\right)^2}{4\mu^{(i)}} + C_1^{(i)} C_2^{(i)} \ln(R) + C_4^{(i)} \quad (\text{III.75})$$

où $C_4^{(i)}$ désigne aussi une constante.

La projection du champ de déformation sur l'interface au moyen de l'opérateur $\mathbf{T} = \mathbf{E}_\theta \otimes \mathbf{E}_\theta + \mathbf{E}_z \otimes \mathbf{E}_z$ permet d'obtenir le tenseur surfacique droit de Cauchy sous la forme

$$\mathbf{C}_s = \mathbf{E}_\theta \otimes \mathbf{E}_\theta + \mathbf{E}_z \otimes \mathbf{E}_z. \quad (\text{III.76})$$

qui résulte en un champ de contraintes surfaciques nul :

$$\mathbf{P}_s = \mathbf{0}. \quad (\text{III.77})$$

Ainsi, l'interface n'est pas affectée par la sollicitation.

III.2.4 Sphère sous pression

A présent, on traite le cas d'une sphère creuse composite soumise à une pression interne. La sphère est constituée des deux mêmes matériaux que le cylindre tout comme l'interface. On note R_e le rayon extérieur, R_i le rayon interne et R_m le rayon de l'interface. Dû à la géométrie, on travaille en coordonnées sphériques : un point matériel est caractérisé par ses coordonnées (R, Θ, Φ) dans la configuration de référence et par (R, θ, ϕ) dans la configuration déformée. Les bases associées à chaque configuration sont respectivement notées \mathbf{E}_i et \mathbf{e}_i avec $i = r, \theta, \phi$. Sous ces conditions, le champ de déplacement se réduit à sa composante radiale. Ainsi, on peut établir

$$r = R + f^{(i)}(R) \quad \Theta = \theta \quad \phi = \Phi \quad (\text{III.78})$$

où $f^{(i)}(r)$ désigne une fonction scalaire. La condition d'incompressibilité, appliquée au gradient de déformation, conduit à la relation

$$f_{,r}^{(i)}(R) (f^{(i)}(R))^2 = R^2 \quad (\text{III.79})$$

dont la solution réelle est de la forme

$$f^{(i)}(R) = (R^3 + A_1^{(i)})^{1/3} \quad (\text{III.80})$$

où $A_1^{(i)}$ est une constante à déterminer pour chaque phase. Toutefois, la condition de continuité du déplacement à la traversée de l'interface implique l'égalité de cette constante dans les deux matériaux. Par conséquent, le gradient de déformation s'écrit

$$\mathbf{F} = \frac{R^2}{(R^3 + A_1)^{2/3}} \mathbf{e}_r \otimes \mathbf{E}_r + \frac{(R^3 + A_1)^{1/3}}{R} (\mathbf{e}_\theta \otimes \mathbf{E}_\theta + \mathbf{e}_\phi \otimes \mathbf{E}_\phi). \quad (\text{III.81})$$

L'état de contraintes en découplant est donné par

$$\begin{aligned} \mathbf{P}^{(i)} = & \left(\mu^{(i)} \frac{R^2}{(R^3 + A_1)^{2/3}} - p^{(i)} \frac{(R^3 + A_1)^{2/3}}{R^2} \right) \mathbf{e}_r \otimes \mathbf{E}_r \\ & + \left(\mu^{(i)} \frac{(R^3 + A_1)^{1/3}}{R} - p^{(i)} \frac{R}{(R^3 + A_1)^{1/3}} \right) (\mathbf{e}_\theta \otimes \mathbf{E}_\theta + \mathbf{e}_\phi \otimes \mathbf{E}_\phi) \end{aligned} \quad (\text{III.82})$$

où $p^{(i)}$ désigne la pression hydrostatique de la phase i . L'équilibre mécanique permet de montrer que la pression ne dépend que de R . Plus précisément, celle-ci prend la forme suivante

$$p^{(i)} = -\frac{R(4A_1 + 3R^3)}{2(A_1 + R^3)^{4/3}} + A_2^{(i)} \quad (\text{III.83})$$

où $A_2^{(i)}$ correspond à une constante d'intégration différente pour chaque constituant. À ce stade, il convient d'introduire les conditions de passage à l'interface. Pour cela, on projette la déformation volumique sur le plan tangent à l'aide de l'opérateur $\mathbf{T} = \mathbf{E}_\theta \otimes \mathbf{E}_\theta + \mathbf{E}_\phi \otimes \mathbf{E}_\phi$ de la configuration de référence. On a ainsi

$$\mathbf{C}_s = \frac{(R^3 + A_1)^{2/3}}{R^2} (\mathbf{E}_\theta \otimes \mathbf{E}_\theta + \mathbf{E}_\phi \otimes \mathbf{E}_\phi) \quad (\text{III.84})$$

et

$$\mathbf{P}_s = \frac{R^2(R^3 + A_1)^{2/3}(\mu_s - c_s) + c_s(R^3 + A_1)^{4/3} - \mu_s R^4}{R^3(R^3 + A_1)^{1/3}} (\mathbf{e}_\theta \otimes \mathbf{E}_\theta + \mathbf{e}_\phi \otimes \mathbf{E}_\phi). \quad (\text{III.85})$$

L'utilisation de l'équation de Young-Laplace et des conditions aux limites ne permettent pas de résoudre le problème. Plus précisément, on obtient une équation non linéaire en A_1 que l'on ne donne pas ici par soucis de visibilité. Cette équation ne peut être résolue que numériquement.

III.3 Méthode XFEM pour le traitement des interfaces imparfaites cohérentes en grandes déformations

Cette section est dédiée à la mise en oeuvre numérique de problèmes de modélisation des effets d'interface. Ce travail s'apparente à celui de l'introduction de discontinuités. Dans ce contexte, on privilégie l'utilisation de la méthode des éléments finis étendus [13, 103] combinée à la méthode level-set [116]. Ce choix permet de s'affranchir des difficultés rencontrées lors de la génération du maillage de la microstructure [102, 141, 142]. Il permet également de traiter la contribution surfacique due à la présence des interfaces imparfaites [31, 105, 107, 158–160]. Dans ce qui suit, on rappelle les éléments importants de la méthode en vue d'une implémentation numérique. Le lecteur intéressé par d'avantage de détails peut se référer à [14, 136] ainsi qu'à leurs références.

III.3.1 Méthode level-set

Sans perte de généralité, on reprend l'exemple du solide hétérogène \mathcal{B} constitué uniquement de deux phases. L'interface Γ entre les matériaux est alors décrite par

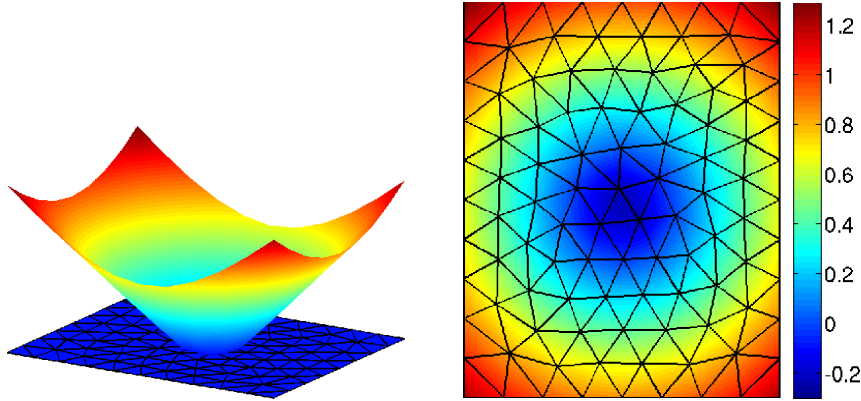


FIG. III.4 – Représentation d’une fonction de niveau en 2D et en 3D

le niveau zéro d’une level-set Φ , soit

$$\Gamma = \{ \mathbf{X} \mid \Phi(\mathbf{X}) = 0 \}. \quad (\text{III.86})$$

Dans le cadre des éléments finis, la fonction Φ est évaluée en chaque noeud du maillage. La valeur attribuée correspond généralement à la distance séparant le noeud de l’interface. Toutefois, afin de distinguer les deux constituants, un signe arbitraire est ajouté de sorte que la fonction prenne une valeur positive pour un point appartenant à la phase 1 et une valeur négative pour un point de la phase 2. Cette fonction peut aussi être calculée en tout point du domaine discrétisé à l’aide des fonctions de forme élément fini, à savoir

$$\Phi^h(\mathbf{X}) = \sum_i N_i(\mathbf{X}) \Phi_i \quad (\text{III.87})$$

où $\Phi_i = \Phi(\mathbf{X}_i)$ représente sa valeur au noeud i définie par

$$\Phi(\mathbf{X}) = \pm \min \|\mathbf{X} - \mathbf{X}_\Gamma\| \quad (\text{III.88})$$

où \mathbf{X}_Γ désigne un point de l’interface. Dans la figure III.4, on représente une fonction de niveau dans le cas bidimensionnel d’une matrice carrée contenant une inclusion circulaire. Dans cet exemple, on a attribué un signe négatif à l’inclusion et un signe positif à la matrice.

La génération de maillage étant arbitraire, il est possible que l’interface passe très près d’un noeud. Dans ce cas, la valeur de la fonction de niveau tend vers zéro, ce qui conduit à des imprécisions numériques. Pour palier à cela, il convient de ramener à

zéro les valeurs de Φ lorsque celles-ci sont en trop proches. Autrement dit, on introduit une tolérance sur Φ afin d'éviter les déconvenues numériques. Dans ce travail, cette tolérance est fixée à 0.01% de la longueur de l'arête coupée par l'interface. Ainsi, on peut définir une boule autour de chaque noeud dans laquelle la level-set est égale à 0 (voir III.5).

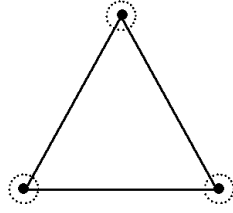


FIG. III.5 – Tolérance pour l'enrichissement.

Outre sa fonction de repérage, la level-set permet d'évaluer la normale à l'interface, à savoir

$$\mathbf{N}(\mathbf{X}_\Gamma) = \frac{\nabla_X \Phi(\mathbf{X}_\Gamma)}{\|\nabla_X \Phi(\mathbf{X}_\Gamma)\|} \quad (\text{III.89})$$

ou, après discrétisation,

$$(\nabla_X \Phi(\mathbf{X}_\Gamma))_j = \sum_i N_{i,j}(\mathbf{X}_\Gamma) \Phi_i. \quad (\text{III.90})$$

Cette approximation sert ensuite à construire les opérateurs de projection définis par l'équation (III.3).

III.3.2 Méthode XFEM

Basée sur la partition de l'unité développée dans [99], cette technique consiste à enrichir l'approximation d'un champ inconnu (déplacement ou pression) afin de prendre en compte la présence de discontinuités. Ainsi, les approximations XFEM du déplacement et de la pression peuvent s'écrire

$$\mathbf{u}^h = \mathbf{u}^{fem} + \mathbf{u}^{enr} \quad \text{et} \quad p^h = p^{fem} + p^{enr} \quad (\text{III.91})$$

où les quantités *fem* représentent les approximations classiques obtenues par la méthode des éléments finis tandis que celles en *enr* représentent les termes d'enrichissement. Après discrétisation, on obtient, pour le déplacement,

$$\mathbf{u}^h(\mathbf{X}) = \sum_i N_i^u(\mathbf{X}) \tilde{\mathbf{u}}_i + \sum_j N_j^{u*}(\mathbf{X}) \Psi^u \mathbf{a}_j \quad (\text{III.92})$$

et, pour la pression,

$$p^h(\mathbf{X}) = \sum_i N_i^p(\mathbf{X}) \tilde{p}_i + \sum_j N_j^{p*}(\mathbf{X}) \Psi^p b_j \quad (\text{III.93})$$

où Ψ désigne une fonction d'enrichissement adaptée au problème traité tandis que $N_i(\mathbf{X})$ et $N_j^*(\mathbf{X})$ représentent des fonctions de forme pas nécessairement identiques. Toutefois, on se limitera dans ce travail au cas où $N_j^*(\mathbf{X}) = N_j(\mathbf{X})$. Les exposants u et p permettent de distinguer les grandeurs associées au déplacement de celles associées à la pression. Les variables \mathbf{a}_j et b_j correspondent aux degrés de liberté introduits par l'enrichissement. Afin de réduire les coûts de calcul, l'enrichissement est localisé autour des discontinuités, ce qui implique la distinction de trois types d'éléments illustrés dans la figure III.6. Parmi eux, on trouve les éléments enrichis et les non-enrichis ainsi que ceux partiellement enrichis. Dans ces derniers, un traitement spécifique doit être utilisé suivant la fonction d'enrichissement choisie [32, 51, 57]. Compte-tenu de l'enrichissement retenu, aucune précaution particulière n'a été adoptée.

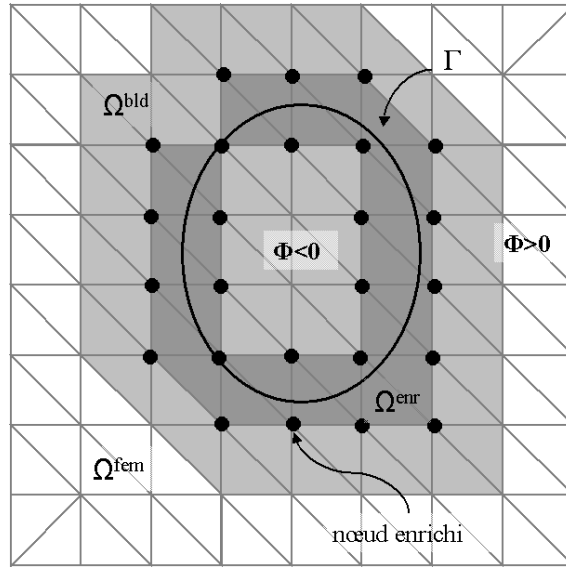


FIG. III.6 – Discrétisation du domaine Ω en 3 zones, l'une enrichie Ω^{enr} , la seconde partiellement enrichie Ω^{bld} et la dernière non enrichie Ω^{fem} .

Le choix de la fonction d'enrichissement est crucial notamment en terme de taux de convergence. Cette fonction doit aussi contenir l'information concernant la

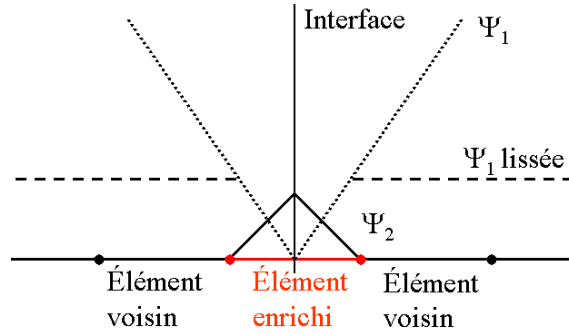


FIG. III.7 – Choix de l’enrichissement pour une discontinuité de déformation.

position de l’interface ainsi que celle portant sur les discontinuités à introduire. Ces informations sont introduites par le biais de fonctions de niveau vues précédemment [116]. Le problème hyperélastique que l’on traite présente a priori deux types de discontinuités dues à la présence d’interfaces. Le premier type concerne la pression tandis que le second porte sur la déformation.

Discontinuité faible

La continuité du champ de déplacement à la traversée de l’interface impose un saut au niveau du champ de déformation. La première fonction d’enrichissement proposée pour représenter ce type de discontinuité correspond à la valeur absolue de la fonction de niveau

$$\Psi_1^u(\mathbf{X}) = |\Phi(\mathbf{X})|. \quad (\text{III.94})$$

Il est aisé de vérifier que cette fonction est continue et que sa première dérivée est discontinue. Cependant, le taux de convergence n’est pas optimal du fait que l’enrichissement continue d’agir loin des éléments interceptés. Un lissage de cette fonction a été proposé afin de limiter l’influence de l’enrichissement sur les éléments voisins. Mais, le taux de convergence reste mauvais [141]. Enfin, on choisit d’utiliser la forme proposée dans [102], à savoir

$$\Psi^u(\mathbf{X}) = \sum_i N_i(\mathbf{X}) |\Phi(\mathbf{X}_i)| - \left| \sum_i N_i(\mathbf{X}) \Phi(\mathbf{X}_i) \right|. \quad (\text{III.95})$$

Cette fonction a l’avantage de s’annuler sur les bords des éléments enrichis. Une illustration des trois fonctions proposées est représentée en 1D dans la figure III.7.

Discontinuité forte

Les solutions analytiques calculées précédemment montrent que le champ de pression est discontinu à la traversée de l'interface. Pour représenter un tel saut, la fonction d'enrichissement proposée est simplement une fonction Heaviside qui vaut 1 dans une des phases et -1 dans l'autre. Une alternative consiste à considérer la fonction signe :

$$\Psi^p(\mathbf{X}) = \text{sign}(\Phi(\mathbf{X})). \quad (\text{III.96})$$

Les deux fonctions proposées présentent l'inconvénient de ne pas s'annuler sur le bord du domaine enrichi, ce qui provoque des déconvenues numériques sur les éléments voisins. Dans [32], une correction est proposée pour favoriser l'imposition des conditions aux limites de Dirichlet de sorte que

$$p^h(\mathbf{X}) = \sum_i N_i^p(\mathbf{X}) \tilde{p}_i + \sum_j N_j(\mathbf{X}) (\Psi^p - \Psi_j^p) b_j \quad (\text{III.97})$$

où Ψ_j^p désigne la fonction d'enrichissement au point j . La figure III.8 illustre l'effet de l'enrichissement sur les fonctions de forme.

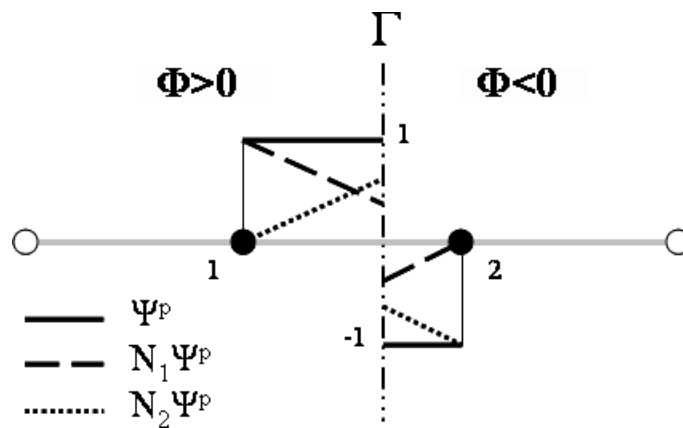


FIG. III.8 – Représentation de la fonction d'enrichissement de la pression en 1D.

Noeuds à enrichir

A présent, il convient de déterminer les noeuds à enrichir. Cette tâche est assurée par le signe de la fonction de niveau. On rappelle que celui-ci est positif dans une des phases et négatif dans l'autre. Ainsi, un noeud est enrichi si le support de sa fonction

de forme, c'est-à-dire les éléments connectés à ce noeud, est coupé par l'interface (voir la figure III.6). En pratique, on s'intéresse à toutes les arêtes du maillage. Si l'une d'elles porte deux noeuds affectés d'une fonction de niveau de signe opposé, alors ces deux noeuds sont enrichis [141].

Malgré la tolérance sur Φ , il est encore possible que l'interface coupe un élément en deux parties dont l'une s'avère être très petite par rapport à l'autre. Dans ce cas, il paraît inutile d'effectuer un enrichissement tant la contribution de la petite zone sera négligeable devant la grande [42].

Intégration

A présent, il convient de s'intéresser à la méthode d'intégration des différents termes apparaissant dans la formulation variationnelle du problème traité. Une quadrature de Gauss est généralement utilisée dans la méthode des éléments finis classiques. Toutefois, cette démarche n'est plus valable en présence de discontinuités. Néanmoins, une méthode proposée dans [42] permet son extension au cas XFEM.

Cette technique consiste à subdiviser les éléments interceptés en sous éléments de même nature de sorte que leurs arêtes coïncident avec la surface de discontinuité. Pour cela, il est nécessaire de déterminer les points d'intersection de l'interface avec les bords des éléments. Considérant une arête interceptée allant de \mathbf{X}_i à \mathbf{X}_j , l'intersection peut s'obtenir par une relation linéaire de la forme

$$\mathbf{X}_p = \mathbf{X}_i - \frac{\Phi(\mathbf{X}_i)}{\Phi(\mathbf{X}_j) - \Phi(\mathbf{X}_i)}(\mathbf{X}_j - \mathbf{X}_i). \quad (\text{III.98})$$

L'interface est alors approximée par un segment en 2D ou un plan en 3D. Cette approximation est satisfaisante si la taille de l'élément n'est pas trop grande vis-à-vis de la courbure de l'interface. Chaque sous-domaine délimité par l'élément et l'interface est ensuite divisé en éléments finis dans lequel la quadrature de Gauss peut s'appliquer. Cette démarche est illustrée en 2D par la figure III.9.

La particularité du problème traité ici réside dans la présence d'un terme, lié au rigidité des interfaces, dans la formulation variationnelle. Afin de l'évaluer, il convient d'ajouter des points d'intégration sur l'approximation de l'interface. Le découpage des éléments interceptés en sous-éléments permet un traitement aisé de cette tâche comme le montre la figure III.9. Toutefois, lorsque l'interface coïncide avec le bord

d'un élément, la méthode XFEM classique ne permet pas de détecter l'interface et il n'est pas possible de calculer le terme surfacique. Ainsi, il est nécessaire d'introduire le cas où tous les sommets d'une face sont attribués d'une valeur de level-set nulle. Les noeuds ne sont pas forcément enrichis.

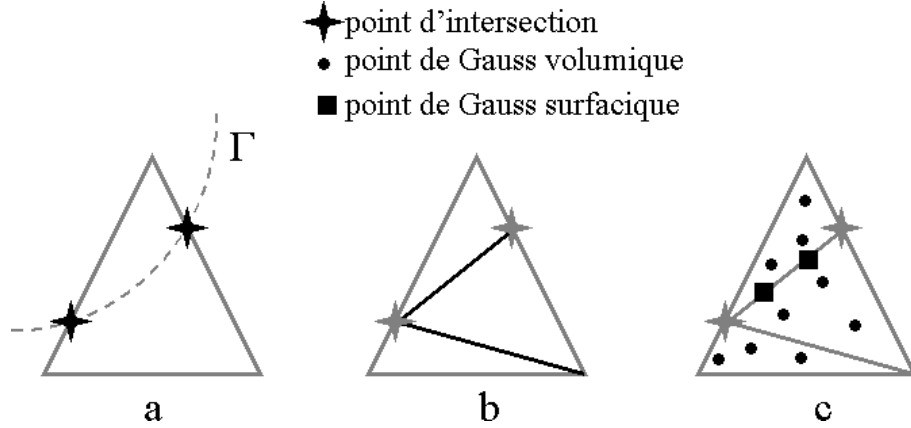


FIG. III.9 – Approximation de l'interface et points d'intégration.

III.3.3 Formulation variationnelle et discrétisation

Au chapitre précédent, on a exprimé la condition de stationnarité de l'énergie du système par la relation

$$D_{\delta \mathbf{v}} W_{int} + D_{\delta \mathbf{v}} W_{ext} = 0 \quad (\text{III.99})$$

où $D_{\delta \mathbf{v}} W_{int}$ et $D_{\delta \mathbf{v}} W_{ext}$ sont définis par les équations (III.39) et (III.40) respectivement. Un équilibre possible pour le solide hétérogène \mathcal{B} s'écrit alors

$$\begin{aligned} &\text{Trouver } \mathbf{u} \in \mathcal{S}(\Omega_0) \text{ tel que } \forall \delta \mathbf{v} \in \mathcal{S}_0(\Omega_0), \\ &\frac{1}{2} \left(\sum_{i=1}^2 \int_{\Omega_0^{(i)}} \mathbf{S}^{(i)} : \delta \mathbf{C} \, dV + \int_{\Gamma} \mathbf{S}_s : \delta \mathbf{C}_s \, dS \right) + D_{\delta \mathbf{v}} W_{ext} = 0 \end{aligned} \quad (\text{III.100})$$

où $\delta \mathbf{C}_s$ est la partie symétrique de $\mathbf{F}_s^T \nabla_{X_s} \delta \mathbf{v}$.

Toutefois, on se restreint par la suite à des densités incompressibles d'énergie volumique puisque la plupart des élastomères présentent un comportement incompressible. Il convient alors d'introduire une formulation mixte en déplacement/pression.

Ainsi, d'après la section I.1.4, on considère des potentiels de la forme

$$W^{(i)}(\mathbf{C}) = \tilde{W}^{(i)}(I_1, I_2) - p(J - 1) - \frac{\epsilon}{2}p^2. \quad (\text{III.101})$$

où le champ p joue le rôle de pression hydrostatique. On adopte dans ce travail une méthode en Lagrangien perturbé [29] qui est relativement simple à implémenter. La fonctionnelle à minimiser prend alors la forme

$$L(\mathbf{u}, p) = \sum_{i=1}^2 \left[\int_{\Omega^{(i)}} \left(\tilde{W}^{(i)}(I_1, I_2) - p(J - 1) - \frac{\epsilon}{2}p^2 \right) dV \right] + \int_{\Gamma} U(\mathbf{C}_s) dS + W_{ext}. \quad (\text{III.102})$$

L'écriture de la stationnarité de cette expression par rapport à ces deux variables donne

$$\begin{aligned} &\text{Trouver } (\mathbf{u}, p) \in \mathcal{S}(\Omega_0) \times L^2(\Omega_0) \text{ tel que } \forall (\delta \mathbf{v}, \delta p) \in \mathcal{S}_0(\Omega_0) \times L^2(\Omega_0), \\ &\frac{1}{2} \left(\sum_{i=1}^2 \int_{\Omega_0^{(i)}} \left(\tilde{\mathbf{S}}^{(i)} - pJ\mathbf{C}^{-1} \right) : \delta \mathbf{C} dV + \int_{\Gamma} \mathbf{S}_s : \delta \mathbf{C}_s dS \right) + D_{\delta \mathbf{v}} W_{ext} = 0 \end{aligned} \quad (\text{III.103})$$

$$\int_{\Omega_0} (J - 1 + \epsilon p) \delta p dV = 0 \quad (\text{III.104})$$

avec

$$\tilde{\mathbf{S}}^{(i)} = 2 \frac{\partial \tilde{W}^{(i)}}{\partial \mathbf{C}} = 2 \left(\frac{\partial \tilde{W}^{(i)}}{\partial I_1} + I_1 \frac{\partial \tilde{W}^{(i)}}{\partial I_2} \right) \mathbf{I} - 2 \frac{\partial \tilde{W}^{(i)}}{\partial I_2} \mathbf{C}. \quad (\text{III.105})$$

Une relation similaire est obtenue pour \mathbf{S}_s tandis que $D_{\delta \mathbf{v}} W_{ext}$ est défini par (III.40).

En vue d'une résolution numérique par un algorithme de Newton-Raphson, il convient de linéariser cette formulation variationnelle. Par soucis de simplicité, on note l'opérateur tangent associé sous la forme matricielle suivante :

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K}_{uu} & \mathbf{K}_{up} \\ \mathbf{K}_{pu} & \mathbf{K}_{pp} \end{bmatrix} \quad (\text{III.106})$$

avec

$$\begin{aligned}
\mathbf{K}_{uu} &= \sum_{i=1}^2 \int_{\Omega_0^{(i)}} \mathbf{F}^T \nabla_X \delta \mathbf{v} : \left(\tilde{\mathbf{C}}^{(i)} - pJ(\mathbf{C}^{-1} \otimes \mathbf{C}^{-1} - 2\mathbf{C}^{-1} \underline{\otimes} \mathbf{C}^{-1}) \right) : \mathbf{F}^T \nabla_X \Delta \mathbf{u} dV \\
&+ \sum_{i=1}^2 \int_{\Omega_0^{(i)}} \nabla_X \delta \mathbf{v} \left(\tilde{\mathbf{S}}^{(i)} - pJ\mathbf{C}^{-1} \right) : \nabla_X \Delta \mathbf{u} dV \\
&+ \int_{\Gamma} \mathbf{F}_s^T \nabla_{X_s} \delta \mathbf{v} : \mathbb{C}_s : \mathbf{F}_s^T \nabla_{X_s} \Delta \mathbf{u} dS \\
&+ \int_{\Gamma} \nabla_{X_s} \delta \mathbf{v} \mathbf{S}_s : \nabla_{X_s} \Delta \mathbf{u} dS,
\end{aligned} \tag{III.107}$$

$$\mathbf{K}_{up} = - \sum_{i=1}^2 \int_{\Omega_0^{(i)}} \mathbf{F}^T \nabla_X \delta \mathbf{u} J \mathbf{C}^{-1} \Delta p dV, \tag{III.108}$$

$$\mathbf{K}_{pu} = - \sum_{i=1}^2 \int_{\Omega_0^{(i)}} \delta p J \mathbf{C}^{-1} \mathbf{F}^T \nabla_X \Delta \mathbf{u} dV, \tag{III.109}$$

$$\mathbf{K}_{pp} = \sum_{i=1}^2 \int_{\Omega_0^{(i)}} \delta p \epsilon \Delta p dV. \tag{III.110}$$

où les tenseurs $\tilde{\mathbf{C}}^{(i)}$ et \mathbb{C}_s représentent les tenseurs d'élasticité d'ordre 4 associés respectivement aux deux phases et à l'interface. Ils sont donnés par

$$\tilde{\mathbf{C}}^{(i)} = 4 \frac{\partial \tilde{W}^{(i)}}{\partial \mathbf{C} \partial \mathbf{C}} \quad \text{et} \quad \mathbb{C}_s = 4 \frac{\partial U}{\partial \mathbf{C}_s \partial \mathbf{C}_s}. \tag{III.111}$$

La formulation mixte développée ci-dessus ne suffit pas à éviter le phénomène de verrouillage numérique lors de la résolution du problème par la méthode des éléments finis. Ainsi, il est nécessaire d'utiliser des espaces d'éléments finis compatibles avec la condition de Ladyzenskaya-Babuska-Brezzi dite aussi inf-sup [23, 24]. La vérification de cette condition est loin d'être triviale. De plus, un élément vérifiant la condition inf-sup en petites déformations ne la vérifie pas forcément en grandes déformations [117, 154]. En élasticité non linéaire, peu d'éléments satisfont cette condition : l'un des plus stables est l'élément hexaédrique à 27 noeuds. Toutefois, toutes les géométries ne peuvent pas être maillées à l'aide de cet élément. Pour s'affranchir de cette condition, de nombreuses techniques de stabilisation ont été développées [82, 161]. Dans ce travail, on choisit d'utiliser des éléments tétraédriques en 3D et triangulaires en 2D dont le degré d'interpolation est quadratique pour le déplacement et linéaire pour la pression. S'appuyant sur l'étude de stabilité faite en élasticité linéaire 2D [90], on choisit le même ordre d'interpolation pour les

degrés de liberté associés à l'enrichissement. N'ayant pas constaté de blocage lors des simulations, aucun test de validation n'a été conduit.

A présent, on se propose de discrétiser les opérateurs surfaciques par la méthode des éléments finis afin de faciliter leur implémentation. Ainsi, le gradient surfacique est donné en un noeud I par

$$\nabla_{X_s} \mathbf{u} \equiv [B_{sI}] \{u_I\} \quad (\text{III.112})$$

où la matrice $[B_{sI}]$ s'écrit

$$\begin{bmatrix} T_{11}N_{I,1} + T_{12}N_{I,2} + T_{13}N_{I,3} & 0 & 0 \\ T_{12}N_{I,1} + T_{22}N_{I,2} + T_{23}N_{I,3} & 0 & 0 \\ T_{13}N_{I,1} + T_{23}N_{I,2} + T_{33}N_{I,3} & 0 & 0 \\ 0 & T_{11}N_{I,1} + T_{12}N_{I,2} + T_{13}N_{I,3} & 0 \\ 0 & T_{12}N_{I,1} + T_{22}N_{I,2} + T_{23}N_{I,3} & 0 \\ 0 & T_{13}N_{I,1} + T_{23}N_{I,2} + T_{33}N_{I,3} & 0 \\ 0 & 0 & T_{11}N_{I,1} + T_{12}N_{I,2} + T_{13}N_{I,3} \\ 0 & 0 & T_{12}N_{I,1} + T_{22}N_{I,2} + T_{23}N_{I,3} \\ 0 & 0 & T_{13}N_{I,1} + T_{23}N_{I,2} + T_{33}N_{I,3} \end{bmatrix}$$

Cette écriture tient compte de la symétrie de l'opérateur de projection. L'autre opérateur à discrétiser est associé à la partie symétrique de $\mathbf{F}_s^T \nabla_{X_s}$. Son expression matricielle au point I est

$$\mathbf{F}_s^T \nabla_{X_s} \mathbf{u} \equiv [\tilde{B}_{sI}] \{u_I\} \quad (\text{III.113})$$

où la matrice $[\tilde{B}_{sI}]$ est donnée ci-après.

En vue d'une implémentation numérique, on donne l'allure des matrices associées au problème. Par la méthode des éléments finis étendus, de nouvelles inconnues nodales apparaissent de sorte que le système s'écrit

$$\begin{bmatrix} [K_{uu}] & [K_{ua}] & [K_{up}] & [K_{ub}] \\ [K_{au}] & [K_{aa}] & [K_{ap}] & [K_{ab}] \\ [K_{pu}] & [K_{pa}] & [K_{pp}] & [K_{pb}] \\ [K_{bu}] & [K_{ba}] & [K_{bp}] & [K_{bb}] \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \{\Delta u\} \\ \{\Delta a\} \\ \{\Delta p\} \\ \{\Delta b\} \end{Bmatrix} = - \begin{Bmatrix} \{R_u\} \\ \{R_a\} \\ \{R_p\} \\ \{R_b\} \end{Bmatrix}. \quad (\text{III.114})$$

III.4 Exemples numériques

A présent, on incorpore la méthode des éléments finis étendus au logiciel développé précédemment. Dans cette section, on cherche tout d'abord à valider l'implémentation de la méthode prenant en compte les effets d'interfaces. Puis, on l'applique au problème d'homogénéisation non linéaire avec présence d'interfaces imparfaites.

III.4.1 Sphère composite sous pression

Dans ce premier exemple, on considère une sphère creuse composite de rayon externe $R_e = 2m$ et de rayon interne $R_i = 1m$. Cette sphère est constituée de deux matériaux hyperélastiques dont le comportement dérive d'un potentiel incompressible de type néo-hookéen. Les modules de cisaillement sont pris arbitrairement égaux à $2 \cdot 10^5$ et $5 \cdot 10^5$. L'interface séparant les deux matériaux se situe en $R = 1.5m$. Elle obéit également à une loi néo-hookéenne. Toutefois, afin de comparer la solution numérique à celle établie analytiquement, il convient de la considérer compressible. Son module de cisaillement vaut $10 \cdot 10^5$ tandis que sa constante volumique c_s est égale à $5.238 \cdot 10^5$.

Compte-tenu de la géométrie présentée par le problème traité, on privilégie une approche axisymétrique. Ainsi, le maillage utilisé est bidimensionnel. Il est constitué de 1864 noeuds et de 889 éléments triangulaires. L'interface ne coïncidant pas avec le bord des éléments, 65 noeuds répartis sur 58 éléments sont enrichis. La géométrie utilisée est présentée en figure III.10. Les éléments interceptés y sont colorés en rouge alors que les noeuds enrichis sont représentés par des ronds bleus. Par la suite, cette coloration sera conservée dans les différentes images.

La pression interne est augmentée progressivement. Les résultats numériques pour le déplacement, la pression ainsi que les contraintes sont comparées à la solution analytique établie en III.2.4 en figure III.12, III.13 et III.14 respectivement. Une bonne concordance est observée : l'erreur relative, calculée par (II.36), reste inférieure à 1%. Malgré une légère oscillation sur le champ de pression à la traversée de l'interface, le taux de convergence reste proche du taux optimal comme le montre la figure III.11.

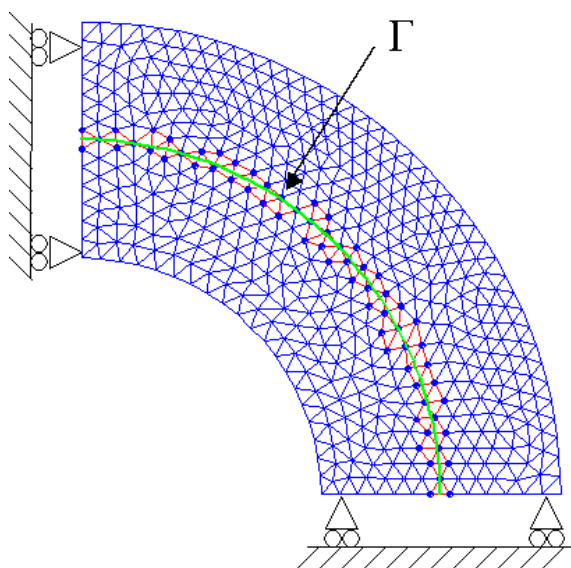


FIG. III.10 – Maillage de la sphère composite.

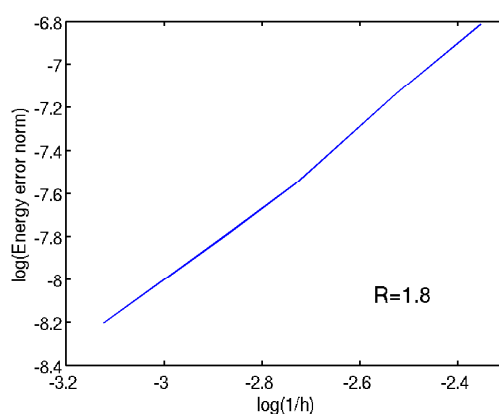


FIG. III.11 – Convergence de la méthode XFEM/Level-set pour le problème de la sphère.

III.4.2 Extension d'un cylindre composite

Ce deuxième exemple consiste à étirer une matrice cylindrique renforcée par une fibre de section circulaire dont l'orientation coïncide à celle de la matrice. On considère ainsi un cylindre de rayon 2 m et de hauteur 5 m. Le rayon de la fibre est égal à 1 m. Les matériaux constituant les deux phases sont identiques aux précédents. Il en est de même pour l'interface les séparant. Là-encore, compte-tenu de la symétrie de la géométrie et du chargement, une formulation axisymétrique est utilisée. Le

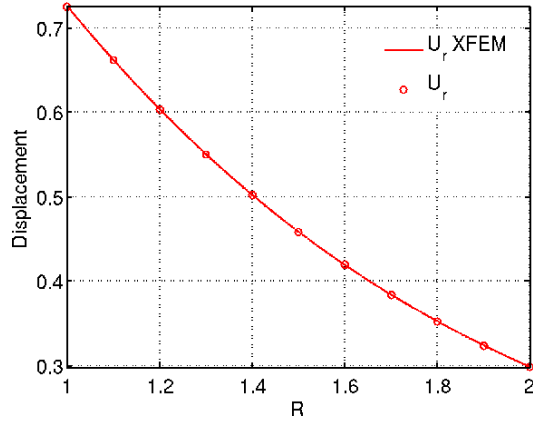


FIG. III.12 – Comparaison du champ de déplacement dans la sphère composite avec présence d'interface imparfaite.

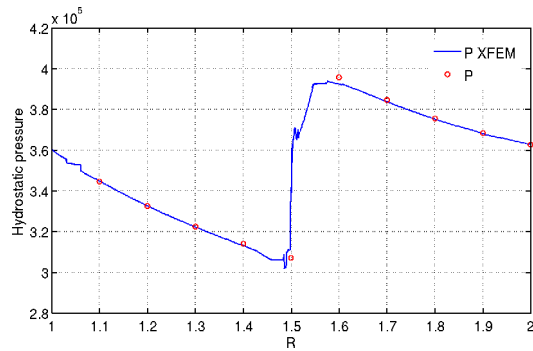


FIG. III.13 – Comparaison du champ de pression dans la sphère composite avec présence d'interface imparfaite.

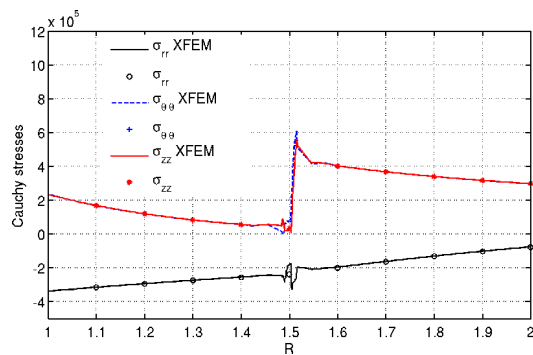


FIG. III.14 – Comparaison du champ de contraintes dans la sphère composite avec présence d'interface imparfaite.

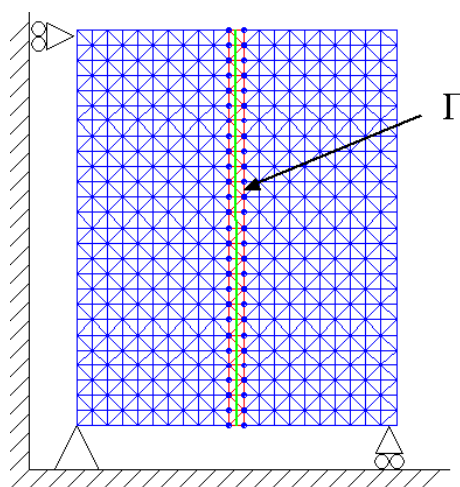


FIG. III.15 – Maillage du cylindre composite.

maillage employé pour cette simulation et représenté dans la figure III.15 comporte 4567 noeuds dont 54 enrichis et 2216 éléments triangulaires dont 52 interceptés.

Afin de réduire le calcul, seul une moitié du cylindre est utilisée. La base est alors restreinte à se déformer latéralement. Sur la face supérieure, un déplacement vertical est imposé. Une solution analytique de ce problème a été calculée précédemment. Les résultats numériques pour le déplacement, la pression ainsi que les contraintes sont comparées à la solution III.2.1 en figure III.16, III.17 et III.18 respectivement. Une bonne concordance est observée : l'erreur relative, calculée par (II.36), reste inférieure à 1%. On observe nettement le saut de contraintes à la traversée de l'interface.

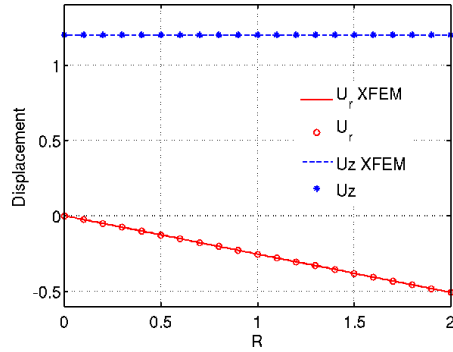


FIG. III.16 – Comparaison du champ de déplacement dans le cylindre composite avec présence d'interface imparfaite.

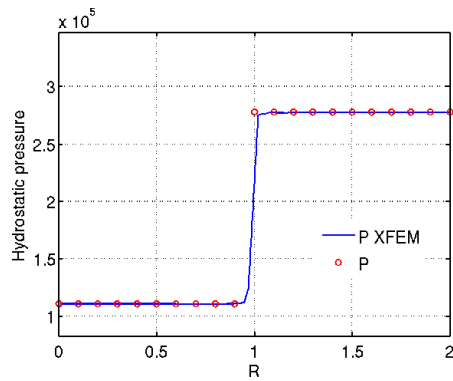


FIG. III.17 – Comparaison du champ de pression dans le cylindre composite avec présence d'interface imparfaite.

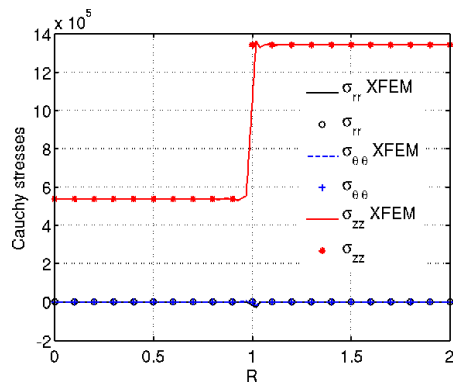


FIG. III.18 – Comparaison du champ de contraintes dans le cylindre composite avec présence d'interface imparfaite.

III.4.3 Torsion d'un cylindre composite

Cet exemple complète la série de trois servant à comparer les solutions analytiques établies et les résultats obtenus par la méthode développée ici. Cet exemple porte sur la torsion d'un cylindre composite. On considère le même cylindre que celui utilisé dans l'exemple précédent. Toutefois, en raison du chargement imposé, on en fait ici une représentation tridimensionnelle qui se limite au quart de la géométrie. Le maillage est constitué de 15919 noeuds et de 10721 éléments tétraédriques y compris les 414 noeuds enrichis et les 1044 éléments interceptés.

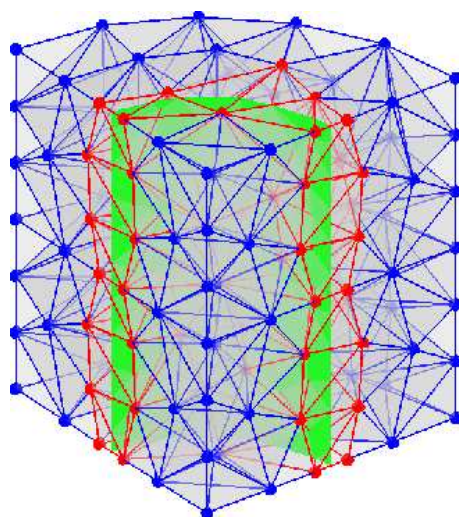


FIG. III.19 – Maillage du cylindre composite.

Les résultats numériques pour le déplacement, la pression ainsi que les contraintes sont comparées à la solution analytique III.2.2 en figure III.16, III.17 et III.18 respectivement. Une bonne concordance est observée : l'erreur relative, calculée par (II.36), reste inférieure à 1%. On observe nettement le saut de contraintes à la traversée de l'interface.

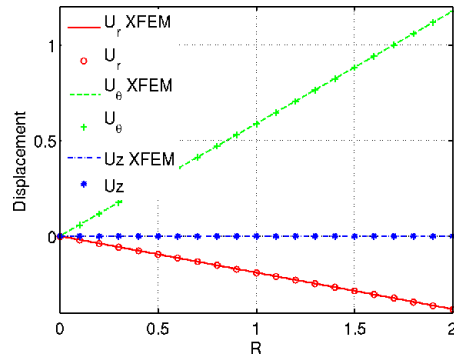


FIG. III.20 – Comparaison du champ de déplacement dans le cylindre composite avec présence d'interface imparfaite.

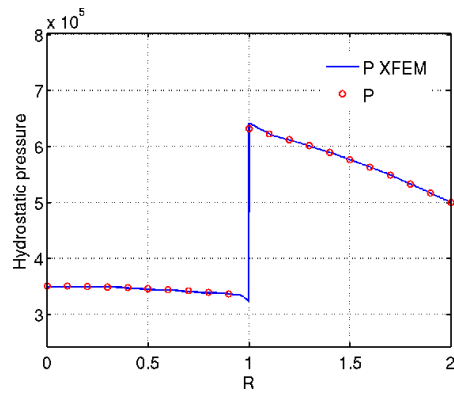


FIG. III.21 – Comparaison du champ de pression dans le cylindre composite avec présence d'interface imparfaite.

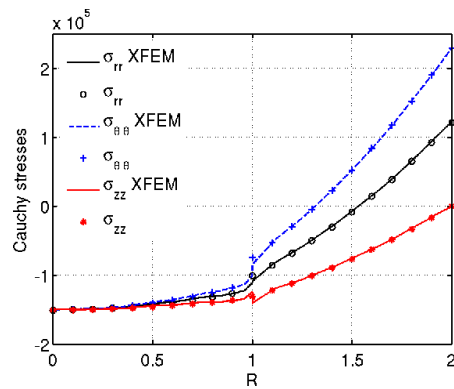


FIG. III.22 – Comparaison du champ de contraintes dans le cylindre composite avec présence d'interface imparfaite.

III.4.4 Combinaison de l'approche multi-échelle avec le traitement des interfaces imparfaites

A présent, il s'agit de combiner la méthode d'homogénéisation multi-échelle avec réduction de modèle à la méthode des éléments finis étendus. Dans cet exemple, on sollicite en cisaillement simple une plaque de côté 1m. Celle-ci est constituée d'un matériau hétérogène dont le volume élémentaire représentatif, illustré dans la figure III.23, s'apparente à une microstructure cellulaire. Les inclusions comme la matrice suivent des lois incompressibles de type néo-hookéen dont les constantes sont égales à $1 \cdot 10^7$ et $1 \cdot 10^6$ respectivement. La fraction volumique des inclusions vaut 0.39. On suppose que les interfaces sont imparfaites et qu'elles obéissent aux mêmes lois de comportement que celles des exemples précédents.

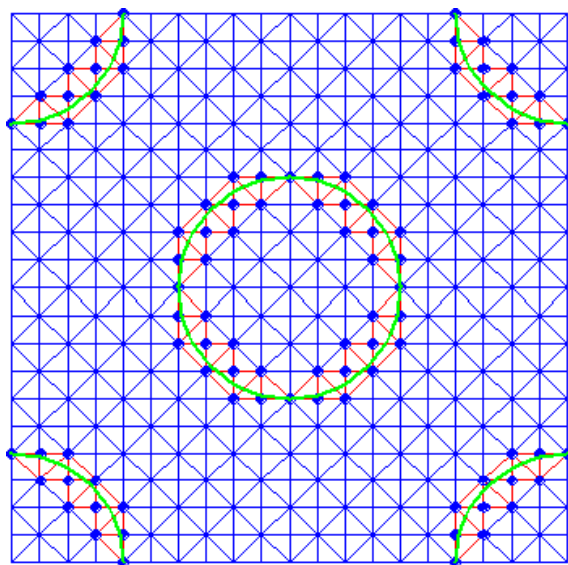


FIG. III.23 – Volume élémentaire représentatif.

Afin de déterminer la base réduite, on procède à des calculs préliminaires sur le VER constitué de 441 noeuds dont 92 enrichis et 800 éléments dont 80 interceptés par une interface. Des conditions aux limites spécifiques sont imposées sur tout le bord, à savoir

$$\mathbf{u} = (\mathbf{F}^* - \mathbf{I})\mathbf{X} \quad (\text{III.115})$$

avec

$$\mathbf{F}^* = \begin{bmatrix} \gamma_1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \mathbf{F}^* = \begin{bmatrix} 0 & \gamma_2 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \mathbf{F}^* = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ \gamma_3 & 1 \end{bmatrix}, \mathbf{F}^* = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \gamma_4 \end{bmatrix} \text{ et } \mathbf{F}^* = \begin{bmatrix} 1 & \gamma_2 \\ \gamma_3 & 1 \end{bmatrix} \quad (\text{III.116})$$

où γ_i ($i=1,2,3,4$) désignent les paramètres de chargement. Les valeurs de ces paramètres sont prises dans un intervalle défini par un calcul macroscopique sur une structure homogène soumise au même chargement. Le critère de sélection, fixé à 10^{-6} , permet de retenir 18 modes. Ainsi, le nombre d'inconnues passe de 1066 à 18. On procède alors à une série de 6 simulations dans lesquelles la déformation maximale atteinte est illustrée en figure III.24.

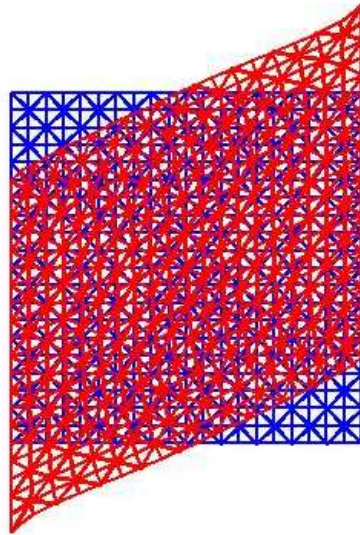


FIG. III.24 – Déformation de la structure macroscopique.

La première simulation est un calcul par éléments finis multi niveau avec réduction de modèle et interfaces imparfaites. La seconde, servant de référence, est similaire à la première excepté que l'on enlève la réduction de modèle. Les interfaces sont supposées parfaites dans les deux suivantes, l'une en FE^2 et l'autre en R3M. Enfin, les deux dernières servent de bornes, c'est-à-dire que l'on suppose que le domaine macroscopique est homogène soit à la matrice, soit aux inclusions. On compare, sur la figure III.25, la force exercée à l'échelle macroscopique pour déformer le domaine. Les estimations macroscopiques dans le cas hétérogène sont bien

bornées par celles obtenues dans le cas homogène. On remarque aussi que la présence d'interfaces imparfaites augmente la force nécessaire pour déformer le solide. Enfin, on constate une bonne concordance entre l'approche réduite et celle non réduite.

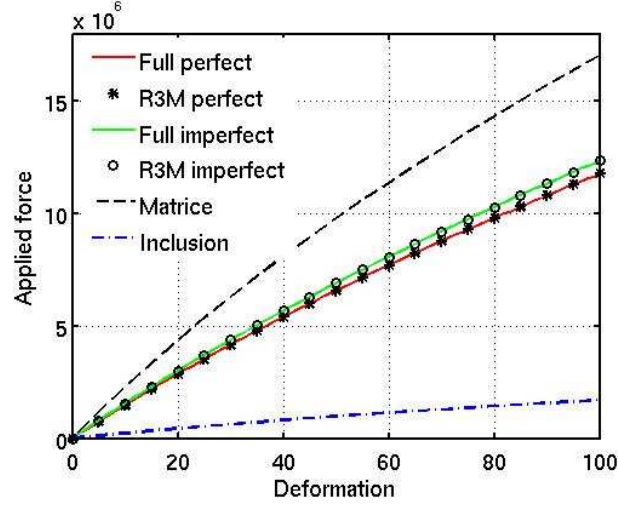


FIG. III.25 – Comparaison des forces appliquées pour atteindre un certain niveau de déformation macroscopique.

III.4.5 Effet de taille

Ce dernier exemple est consacré aux effets de taille. On considère un cube unité dans lequel se trouve une inclusion sphérique centrée dont la fraction volumique est 0.125. Ce cube est soumis à un chargement de traction sur l'une de ces faces et à un encastrement sur la face opposée. La matrice, l'inclusion et l'interface sont constituées de matériaux dont la relation contraintes-déformations dérive d'un potentiel de Gent-Levinson de la forme

$$W^{(i)} = \frac{\mu^{(i)}}{2} \left[d^{(i)}(J^2 - 1) - 2(d^{(i)} + 1)(J - 1) - J_m^{(i)} \ln \left(\frac{J_m^{(i)} - I_1 + d_r}{J_m^{(i)}} \right) \right] \quad (\text{III.117})$$

où $\mu^{(i)}$, $d^{(i)}$ et $J_m^{(i)}$ sont des constantes. Le paramètre d_r est égal à 3 pour les densités d'énergie volumique et à 2 pour l'interface. Les valeurs des différentes constantes sont données dans le tableau III.1. On compare, dans la figure III.26, l'évolution de l'énergie du cube avec celle d'un même cube sans énergie de surface. On constate bien la contribution de l'interface. Ensuite, on fait varier la taille de l'inclusion en

conservant une fraction volumique constante. On compare en figure III.27 l'énergie volumique du composite tout au long de la déformation pour différentes tailles d'inclusions caractérisées par le paramètre r . On observe que plus r diminue, plus l'énergie de surface devient prépondérante. A l'inverse, à partir d'une valeur critique, l'effet de l'énergie de l'interface disparaît.

	μ	d	J_m
Matrice	357	5	100
Inclusion	714	5	100
Interface	28.56	5	100

TAB. III.1 – Propriétés des matériaux

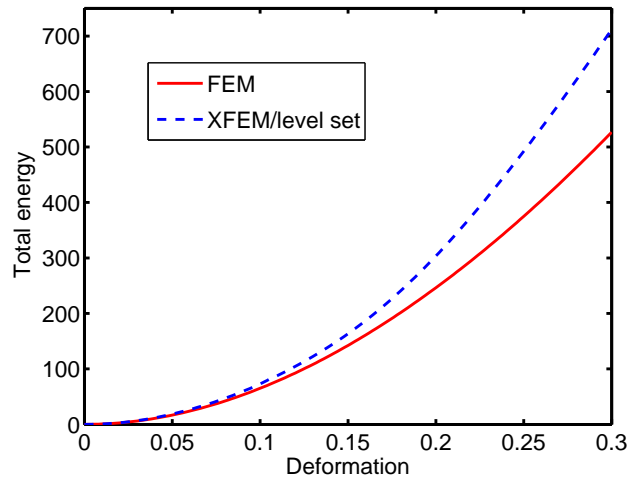


FIG. III.26 – Comparaison de l'évolution de l'énergie en fonction de la déformation avec et sans énergie de surface.

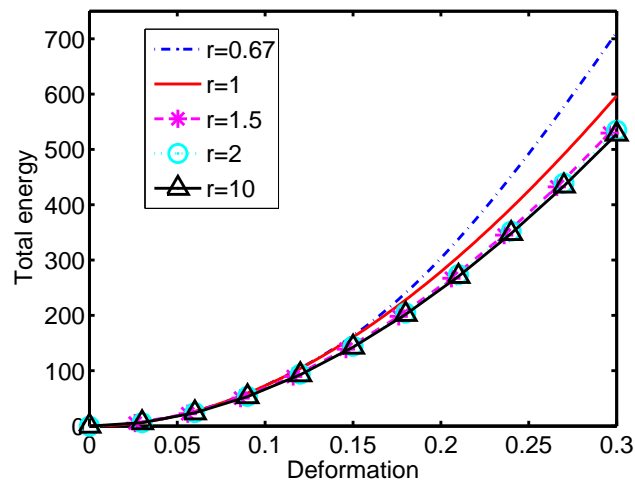


FIG. III.27 – Evolution de l'énergie en fonction de la taille du système.

III.5 Conclusion

Ce chapitre a proposé une méthode numérique pour modéliser les effets d'interface dans les nanocomposites non linéaires. Cette technique combine à la fois la méthode des éléments finis étendus et la méthode level-set. Elle permet la modélisation de microstructures complexes sans l'inconvénient de la génération de maillage. Elle a été validée à l'aide de solutions analytiques impliquant des interfaces imparfaites de type cohérent développées dans ce chapitre. Une application à l'homogénéisation non linéaire a également été menée. Enfin, une simulation montre l'effet de taille dans les structures nanométriques.

Chapitre IV

Etude de l'étalement de cellules animales vivantes

A présent, on se tourne vers un tout autre problème, à savoir celui de l'étude de l'étalement d'une cellule animale sur un substrat. Ce phénomène est crucial dans de nombreux processus biologiques comme, par exemple, lors du développement cellulaire [28]. Ce projet biomécanique, proposé par A. Asnacios de l'université Paris Diderot, est à l'origine des développements précédents. En effet, l'homogénéisation apparaît comme un outil efficace pour modéliser la complexité de la structure interne qui peut être approchée, dans un premier temps, par un modèle hyperélastique. De plus, les premières simulations du phénomène ont conduit à un certain nombre de difficultés numériques notamment de remaillage. Une alternative consiste à introduire la méthode des éléments finis étendus combinée à une méthode de level-set dynamique.

Ce chapitre constitue donc un premier pas vers l'étude de l'étalement d'une cellule [10, 126, 150, 152] qui ne peut pas être apparenté à un phénomène de mouillage. Contrairement à une goutte d'eau, la cellule est un matériau vivant capable de s'adapter à son environnement en modifiant, partiellement ou totalement, son organisation. Cette réorganisation bouleverse les propriétés mécaniques [148, 153] et rend la modélisation plus difficile. Ainsi, dans ce travail, on se limite à prédire le caractère passif de la cellule en incorporant ses propriétés actives dans la modélisation ou la simulation au travers des conditions aux limites notamment.

Ce chapitre se décompose en deux parties. Tout d'abord, on rappelle quelques aspects biologiques et mécaniques de la cellule. On explicite, entre autres, les éléments les plus importants de sa structure en vue d'une modélisation. On évoque également les techniques expérimentales employées pour déterminer ses propriétés mécaniques. Les résultats expérimentaux, fournis par l'équipe de Physique du vivant du Laboratoire Matière et Systèmes Complexes de Paris VII, y sont détaillés brièvement. La seconde partie est consacrée à la modélisation et simulation de l'étalement de la cellule entre deux microplaques maintenues fixes.

IV.1 Aspects biomécaniques

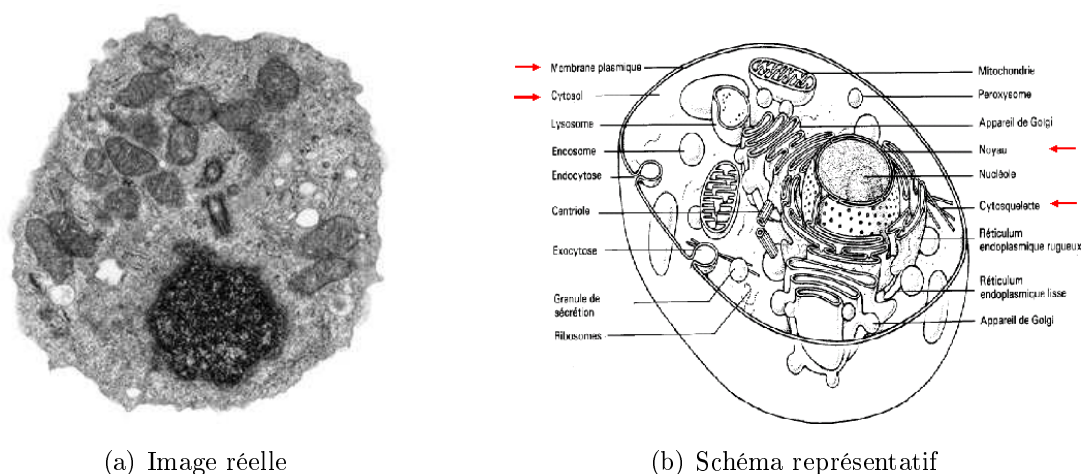


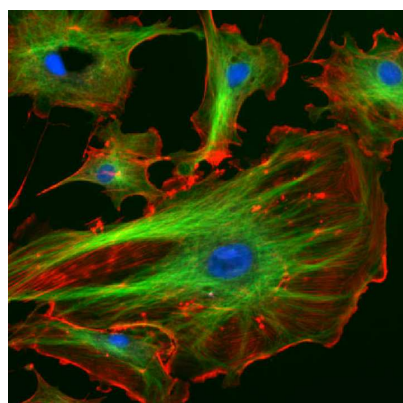
FIG. IV.1 – Architecture cellulaire

Les cellules, unités de base de la vie, se classent en deux catégories, à savoir les cellules procaryotes dépourvues de noyau et les cellules eucaryotes à noyau. Ces dernières s'associent entre elles pour former des organes ou des tissus organisés alors que les premières restent généralement isolées. Les cellules eucaryotes, objet de cette étude, mesurent une dizaine de microns et sont délimitées par une bicouche de phospholipides couramment appelée membrane plasmique. A l'intérieur, on distingue une multitude de sous-compartiments appelés organites. Parmi eux, on trouve les mitochondries, les vésicules de Golgi ou encore le noyau contenant l'ADN. Ces organites baignent dans un fluide protéique, appelé cytosol, dans lequel se trouve un grand nombre de molécules. L'architecture de l'ensemble est maintenue par un réseau de

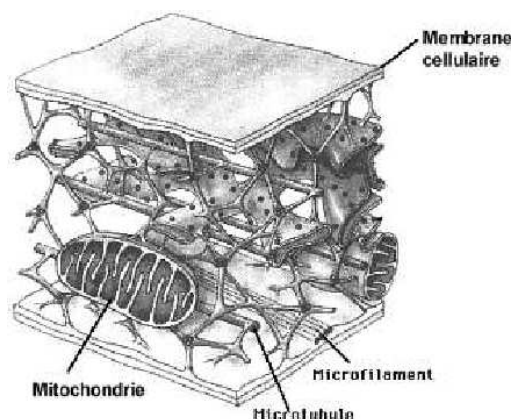
polymères appelé cytosquelette [1].

IV.1.1 Le cytosquelette

Le cytosquelette est un réseau complexe et dynamique de filaments tendus à travers la cellule. Il assure le maintien mécanique de la cellule tout en permettant les mouvements cellulaires et intracellulaires. Il est constitué de trois types de filaments, à savoir les filaments d'actine, les filaments intermédiaires et les microtubules [1].



(a) Image réelle [7]



(b) Schéma représentatif [8]

FIG. IV.2 – Cytosquelette

Les microtubules

Un microtubule est une structure polarisée en forme de tubes creux de 25 nm de diamètre, formée de protéines dimériques appelées tubuline. Il présente une grande rigidité à la flexion et a une longueur de persistance d'environ 6 mm. Toutefois, il s'agit d'une structure peu stable puisqu'il est en perpétuel polymérisation et dépolymérisation. La croissance de ses extrémités ne s'effectue pas à la même vitesse : l'une est plus rapide que l'autre. On peut remarquer que le réseau de microtubules (en vert sur la figure IV.2(a)) croît à partir d'un point d'accroche situé près du noyau (en bleu) : il assure ainsi le mouvement des organites dans la cellule [104, 125].

Les filaments d'actine (ou microfilaments)

Les filaments d'actine, de 9 nm de diamètre, résultent de l'assemblage hélicoïdale de monomères d'actine qui est une protéine abondante dans la cellule. Contrairement aux microtubules, ces microfilaments sont semiflexibles et ont une longueur de persistance de 15 μm environ. Leur polymérisation est asymétrique et dépend fortement de la concentration en ions calcium et magnésium. La figure IV.2(a) montre que l'actine (en rouge) est principalement située sous la membrane plasmique. Ainsi, ce sont eux qui réagissent aux forces extérieures [104, 125].

Les filaments intermédiaires

Les filaments intermédiaires regroupent une grande variété de protéines (kératine, vimentine ...). Ils s'organisent en bâtonnets pour former un cylindre creux de 10 nm de diamètre dont la longueur de persistance tourne autour du micronmètre. Leur rôle est secondaire : ils assurent l'intégrité mécanique de la cellule en renforçant les éléments précédents [104, 125].

Autres protéines

Aux trois principaux éléments décrits ci-dessus, il convient d'ajouter la présence de protéines de liaison et de molécules d'adhérence. Ces dernières, présentes à la surface des cellules, sont capables d'assurer une adhésion sélective entre deux cellules ou entre la cellule et la matrice extracellulaire. Elles sont, pour la plupart, raccordées au cortex d'actine présent sous la membrane plasmique.

IV.1.2 Techniques expérimentales dédiées à l'étude de la cellule

Il est reconnu que le cytosquelette joue un rôle prépondérant dans la réponse mécanique de la cellule. Toutefois, le lien exact entre les propriétés mécaniques de ces éléments et le comportement effectif de la cellule n'est pas défini. Ainsi, un nombre important de techniques expérimentales ont été développées pour étudier la mécanique cellulaire. Ces méthodes peuvent se classer selon différents critères, à savoir celles qui sollicitent une seule cellule ou un groupe de cellule, ou encore celles qui font des mesures locales ou globales. Par la suite, on se limite à une

présentation de quelques techniques. Pour d'autres techniques, le lecteur peut se référer à [93, 125, 151].

L'aspiration par micropipette

Cette technique consiste à aspirer une portion de cellule à l'aide d'une micropipette de quelques microns de diamètre. Une relation entre la déformation observée et la dépression imposée peut être établie suivant le modèle mécanique adopté. Ainsi, on peut mesurer le module d'élasticité ou la viscosité de la cellule. Elle permet aussi d'estimer la tension de la membrane plasmique. Cette mesure peut être locale ou globale suivant le diamètre de la micropipette [73].

La magnéto-cytométrie

Cette méthode consiste à déposer des micro billes magnétiques sur la cellule et de leur appliquer un champ magnétique. Ces billes peuvent être déplacées ou mises en rotation. Cette méthode permet de déterminer les propriétés viscoélastiques locales [12].

Le microscope à force atomique

Cet outil sert à l'indentation d'une cellule dans laquelle il joue deux rôles cruciaux. D'une part, il permet de visualiser en haute définition la surface de contact entre la cellule et la pointe servant à l'indentation. D'autre part, il assure le rôle de capteur de force avec une précision de l'ordre du piconewton. Les courbes de force en fonction de l'indentation permet de déduire une rigidité effective [97]. Il est également possible de déterminer les modules locaux de stockage et de perte G' et G'' [2].

Les micro plaques

Dans ce dispositif, la cellule est collée à deux micro plaques dont l'une se comporte comme un ressort calibré. Ainsi, le mouvement d'une lamelle permet de solliciter la cellule en traction-compression et de recueillir la force exercée. Il est également possible d'observer la relaxation de la force au cours du temps [148]. Un schéma de principe, proposé dans [52], est fourni en figure IV.1.2.

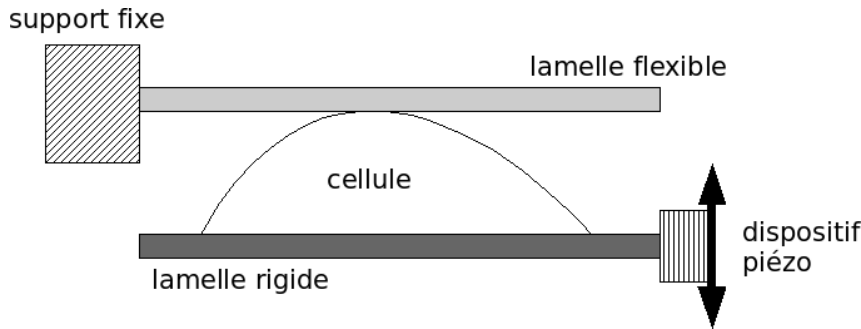


FIG. IV.3 – Schéma d'un rhéomètre à microplaques [52].

IV.1.3 Modèles mécaniques

Cette disparité de techniques expérimentales conduit nécessairement à un grand nombre de modèles mécaniques [94, 125] et, par extension, à des propriétés mécaniques disparates. Les modèles proposés se classent en deux catégories, à savoir les modèles continus et les modèles microstructuraux. Dans les premiers, la cellule est considérée comme un milieu homogène élastique, viscoélastique ou poroviscoélastique. D'autres l'ont vue comme un matériau vitreux mou. Les seconds, quant-à-eux, considèrent la cellule comme un assemblage discret de poutres et de câbles. Le plus connu est le modèle de tenségrité [27, 139].

IV.1.4 Résultats expérimentaux

Une fois ce petit inventaire dressé, il convient de donner les résultats expérimentaux que l'on va chercher à reproduire. Le dispositif employé consiste en un rhéomètre à cellule unique constitué de deux microplaques parallèles : l'une rigide et l'autre flexible. La lamelle flexible est calibrée afin d'être utilisée comme capteur de force dont le champ d'application est de l'ordre de quelques dizaines de nanonewtons. Les lamelles sont asservies par des dispositifs piézoélectriques qui permettent d'ajuster en temps réel la position de la lamelle rigide et/ou la déflexion de la lamelle souple [38]. Cette technique permet d'appliquer des contraintes ou des déformations constantes à la cellule : on peut ainsi réaliser des expériences de fluage ou des expériences de relaxation [39]. Par ailleurs, comme on le verra par la suite, cette technique permet également de mesurer la force développée par une cellule en étalement entre les lamelles [101].

L'objet de cette étude est un myoblaste issu d'une lignée de C2 dérivant du muscle squelettique d'une souris adulte. Cette cellule est cultivée dans un milieu complet placé dans un incubateur maintenu à une température constante de 37° . Avant de réaliser l'expérience, il convient de détacher la cellule de la boîte de culture par trypsination : il s'agit de dégrader les liaisons peptidiques des protéines d'adhésion à l'aide d'une enzyme appelée trypsine. Une fois détachée, un délai de deux heures est nécessaire afin que la cellule régénère des protéines d'adhésion afin d'adhérer aux lamelles de l'expérience. Ces lamelles sont traitées à la fibronectine pour favoriser l'adhésion et l'étalement.

L'expérience consiste à laisser une cellule s'étaler librement entre les deux lamelles du rhéomètre en régulant la déflexion de la lamelle souple de sorte que la distance entre lamelles soit maintenue constante malgré la traction cellulaire. Lors de cet étalement, on remarque que l'aire de contact augmente de façon symétrique : elle croît à la même vitesse sur les deux lamelles. Cette évolution est illustrée en figure IV.4.

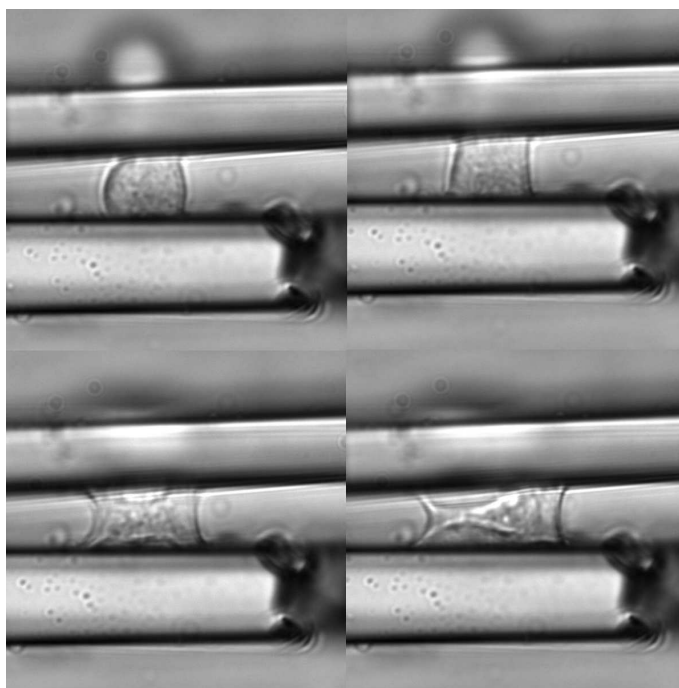


FIG. IV.4 – Etalement de la cellule.

On constate également que l'expansion cellulaire et la déflexion de la lamelle

souple (traduisant l'augmentation de la force de traction) sont concomitantes. On peut, toutefois, distinguer deux régimes durant les quatre premières minutes. Dans le premier qui dure environ deux minutes, la cellule passe progressivement d'une forme convexe à une forme concave sans que le dispositif ne détecte de force notable. Dans le second régime, une force de traction apparaît et s'accroît en même temps que le volume et la surface de la cellule. La force varie linéairement avec le diamètre central. Ces résultats expérimentaux sont détaillés et commentés dans [101].

Ces observations laissent penser que l'évolution de la forme de la cellule est corrélée à la force générée. Ainsi, avant l'inversion de courbure, la cellule s'étalerait sans générer de force et en conservant son volume constant : aucune force, perceptible par le dispositif, ne serait nécessaire à son étalement. Après l'inversion de courbure, une force serait nécessaire pour continuer l'étalement.

IV.2 Modélisation et simulation

La section précédente a fourni une vision globale de la mécanique cellulaire et des techniques employées pour l'étude des propriétés de la cellule. Des résultats expérimentaux ont également été décrits. A présent, on cherche à établir un modèle numérique capable de reproduire les résultats expérimentaux en termes de corrélation entre étalement cellulaire et génération de force de traction.

IV.2.1 Modélisation

La cellule est une structure complexe comme le montre la première partie de ce chapitre. Modéliser chaque élément s'avère alors être une tâche délicate et inutile puisque leurs propriétés mécaniques ne sont pas bien déterminées. Un modèle simpliste consiste à considérer la cellule comme une membrane élastique remplie de fluide. Ainsi, on se focalise sur deux constituants de la cellule, à savoir son enveloppe et le reste. Dans l'enveloppe, on prend en compte la membrane plasmique et le cortex d'actine situé juste au-dessous. Son épaisseur est de quelques dizaines de nanomètres. Le reste de la cellule comprend le cytosol et les différents organites qui y baignent. Malgré leur hétérogénéité, chaque partie est considérée homogène et isotrope. De plus, aucune restriction n'est faite sur le comportement de l'enveloppe :

celle-ci n'est approximée ni par une membrane, ni par une coque mais par un modèle volumique. Afin d'inclure le processus d'échange de fluide entre la cellule et le milieu extracellulaire, on considère que chaque phase est compressible.

Les clichés dont on dispose ne permettent pas de définir clairement la géométrie initiale dans les trois directions. Sur la phase visible, elle prend la forme d'un tonneau de hauteur $11.7 \mu m$, de diamètre de contact $12 \mu m$ et de diamètre central $17 \mu m$. On suppose qu'il en est de même dans les autres directions. La cellule est alors considérée comme un solide de révolution dont le volume et la surface coïncident avec ceux observés expérimentalement. La génératrice est alors approximée à l'aide de la fonction quadratique suivante :

$$f_0(x) = -0.073x^2 + 8.5 \quad x \in [-5.85; 5.85]. \quad (\text{IV.1})$$

Cette approximation permet de construire le maillage de la cellule représentée dans la figure IV.5. On propose, dans ce travail, d'élaborer deux modèles : l'un purement élastique et l'autre biphasique.

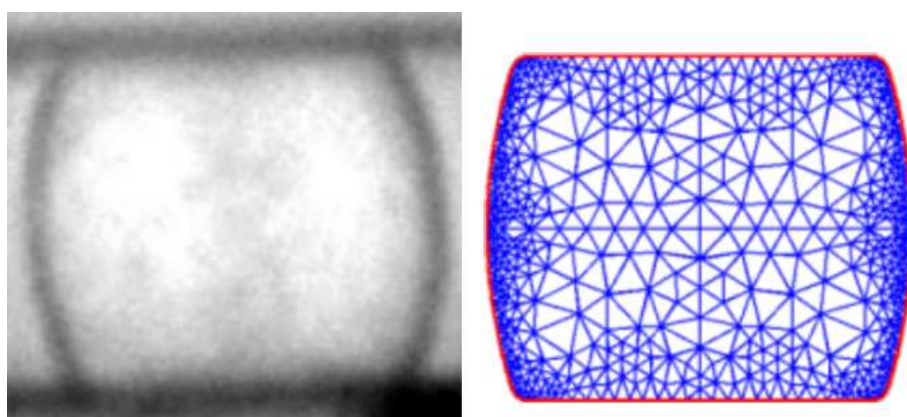


FIG. IV.5 – Maillage de la cellule.

Modèle purement élastique

Compte-tenu des importants déplacements observés lors de l'expérience, chaque constituant retenu est supposé hyperélastique et une approche de type Lagrangien actualisé est adoptée. Dans ce contexte, la configuration de référence n'est plus la

configuration initiale mais la configuration déformée. Ainsi, l'équilibre mécanique s'écrit en terme de contraintes de Cauchy, à savoir

$$\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0} \quad \text{dans } \Omega, \quad (\text{IV.2})$$

puisque les effets d'inertie et les forces volumiques peuvent être négligés [104]. Pour un matériau hyperélastique isotrope, la contrainte de Cauchy dérive d'un potentiel élastique de sorte que

$$\boldsymbol{\sigma} = 2J^{-1} \mathbf{F} \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{C}} \mathbf{F}^T. \quad (\text{IV.3})$$

Le choix de celui-ci est crucial dans la modélisation [112, 115]. Afin de prendre en compte la rigidification observée expérimentalement [34, 153], on choisit de décrire chaque phase à l'aide d'un potentiel de Gent-Levinson qui a été introduit initialement pour caractériser la rigidification des polymères [55, 77, 91]. Son expression est

$$\Psi(I_1, J) = \frac{\mu}{2} \left[d(J^2 - 1) - 2(d+1)(J-1) - J_m \ln \left(1 - \frac{I_1 - 3}{J_m} \right) \right], \quad (\text{IV.4})$$

où μ désigne le module de cisaillement et d un autre paramètre du matériau. La dernière constante J_m apparaît comme la limite de $I_1 - 3$. La consistance de ce modèle avec l'élasticité linéaire conduit à la relation

$$d = \frac{2}{3} \frac{1 + \nu}{1 - 2\nu} + \frac{1}{3} - \frac{2}{J_m} \quad (\text{IV.5})$$

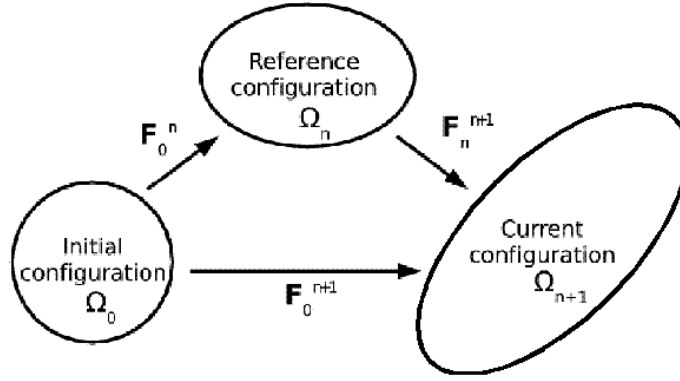
où ν désigne le coefficient de Poisson. On notera également que ce potentiel vérifie la condition de normalisation, ce qui implique qu'aucune précontrainte n'est introduite dans la configuration initiale. Cette hypothèse va à l'encontre du modèle précontraint proposé dans [34, 139, 153].

La relation contrainte-déformation, qui s'écrit

$$\boldsymbol{\sigma} = \mu \left(\frac{J_m}{J_m - I_1 + 3} J^{-1} \mathbf{B} + (dJ - d - 1) \mathbf{I} \right) \quad (\text{IV.6})$$

dépend du gradient de déformation au travers de \mathbf{B} . Celui-ci doit traduire la déformation depuis la configuration initiale. Ainsi, une décomposition multiplicative du gradient de la transformation est utilisée, à savoir

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_{n-1}^n \mathbf{F}_0^{n-1} \quad (\text{IV.7})$$


 FIG. IV.6 – Schéma de calcul de \mathbf{F} en Lagrangien actualisé.

où \mathbf{F}_0^{n-1} désigne le gradient de déformation qu'il existe entre la configuration de référence et l'initiale tandis que \mathbf{F}_{n-1}^n correspond au gradient de déformation entre la configuration déformée et la configuration de référence comme l'illustre la figure IV.6.

En vue d'une implémentation numérique, on construit la formulation faible associée. Celle-ci s'écrit classiquement

$$\begin{aligned} &\text{Trouver } \mathbf{u} \in \mathcal{S}(\Omega) \text{ tel que } \forall \delta \mathbf{v} \in \mathcal{S}_0(\Omega), \\ &\int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma} : \nabla \delta \mathbf{v} \, dv - \int_{\partial \Omega^t} \bar{\mathbf{t}} \, \delta \mathbf{v} \, ds = \mathbf{0} \end{aligned} \quad (\text{IV.8})$$

où $\bar{\mathbf{t}}$ décrit les conditions aux limites imposées. Une attention particulière doit être portée à cette équation puisque $\boldsymbol{\sigma}$ dépend non linéairement du déplacement. Il convient alors de la linéariser à l'aide de l'opérateur de Gâteaux. En réécrivant cette relation sous une forme plus compacte, à savoir $R(\mathbf{u})$, la linéarisation donne

$$D_{\Delta u} \mathcal{R}(\mathbf{u}) = \int_{\Omega} \nabla \delta \mathbf{v} : \nabla \Delta \mathbf{u} \boldsymbol{\sigma} \, dv + \int_{\Omega} \nabla \delta \mathbf{v} : \mathbb{L} : \nabla \Delta \mathbf{u} \, dv \quad (\text{IV.9})$$

où \mathbb{L} désigne le tenseur d'élasticité dans la configuration courante. Celui-ci se déduit de \mathbb{E} par la relation [75, 114]

$$L_{ijkl} = J^{-1} F_{im} F_{jn} F_{kp} F_{lq} E_{mnpq}. \quad (\text{IV.10})$$

Modèle biphasique

Le second modèle numérique que l'on propose est un modèle biphasique. Plus précisément, l'enveloppe reste décrite par un matériau hyperélastique tandis que le

reste de la cellule est considéré comme un fluide visqueux newtonien. Ainsi, l'état de contraintes dans le fluide s'écrit en fonction du taux de déformation \mathbf{D} , à savoir

$$\boldsymbol{\sigma}_f = -p \mathbf{I} + 2\eta \mathbf{D} \quad (\text{IV.11})$$

où η désigne la viscosité de cisaillement et p la pression hydrostatique. En supposant le fluide faiblement compressible, on peut approximer la pression à partir du déplacement par la relation

$$p = -\lambda \operatorname{div} \mathbf{D} \quad (\text{IV.12})$$

où λ est un paramètre. Cette approximation reste valide tant que $\mu \ll \lambda$ [82]. Par analogie au solide, on exprime λ en fonction d'un coefficient de Poisson ν :

$$\lambda = \frac{2\nu\eta}{1-2\nu}. \quad (\text{IV.13})$$

Sous l'hypothèse de déformation quasi-statique, l'équation d'équilibre ainsi que la forme faible associée sont similaires aux précédentes dans lesquelles on remplace le champ de déplacement par un champ de vitesse \mathbf{v}_f .

Il ne reste plus qu'à définir les conditions à l'interface fluide-structure notée Γ_f . On suppose ici que le vecteur de contraintes \mathbf{y} est continu et que le fluide adhère au solide, soit

$$\mathbf{v}_f = \dot{\mathbf{u}} = \mathbf{0} \quad \text{sur } \Gamma_f, \quad (\text{IV.14})$$

$$[\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}_f] \mathbf{n} = \mathbf{0} \quad \text{sur } \Gamma_f \quad (\text{IV.15})$$

où \mathbf{n} désigne la normale unitaire extérieure à la structure.

IV.2.2 Simulations

L'objectif de cette étude consiste à reproduire l'étalement de la cellule le long de deux lamelles fixes. Avant de le simuler, il convient de préciser certains aspects de l'implémentation notamment les conditions aux limites imposées à la cellule et l'algorithme retenu pour le traitement de l'interaction fluide-structure.

Conditions aux limites

Les expériences montrent que l'étalement semble similaire sur les deux lamelles. On privilégie donc une approche axisymétrique et on se réduit à des simulations

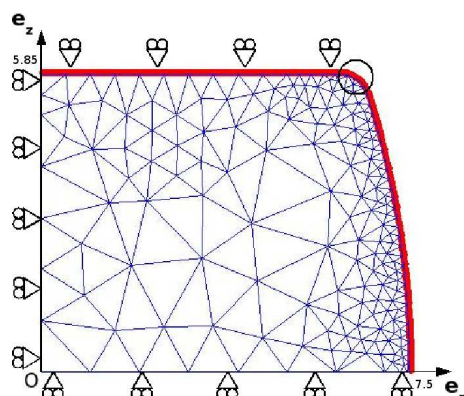


FIG. IV.7 – Conditions aux limites imposées.

sur un quart de cellule avec des conditions aux limites spécifiques représentées en figure IV.7. Le contact entre la cellule et la lamelle est supposé glissant. Les raisons de cet étalement n'étant pas encore identifiées, il convient de proposer un modèle décrivant le phénomène. On suggère ici une procédure d'agrafage dont le but est d'augmenter la surface de contact avec la même cinématique que celle observée expérimentalement. Dans cette procédure schématisée en figure IV.8, on impose un mouvement de rotation aux trois noeuds du maillage les plus proches de la lamelle appartenant au bord libre. Cette technique assure une bonne concordance entre les évolutions des surfaces de contact expérimentale et numérique comme le montre la figure IV.9.

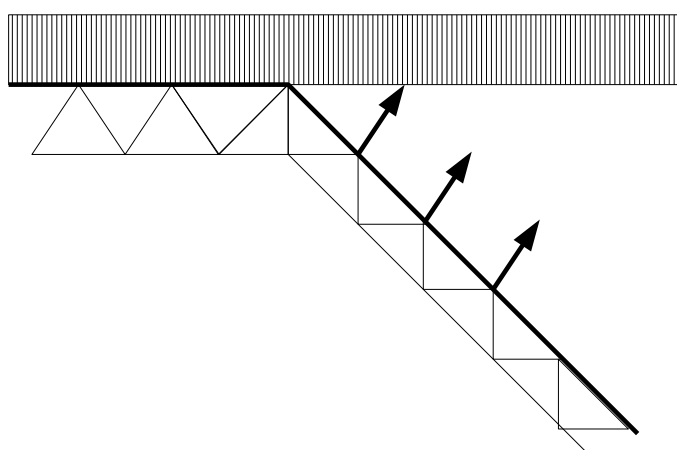


FIG. IV.8 – Schématisation de la procédure d'agrafage.

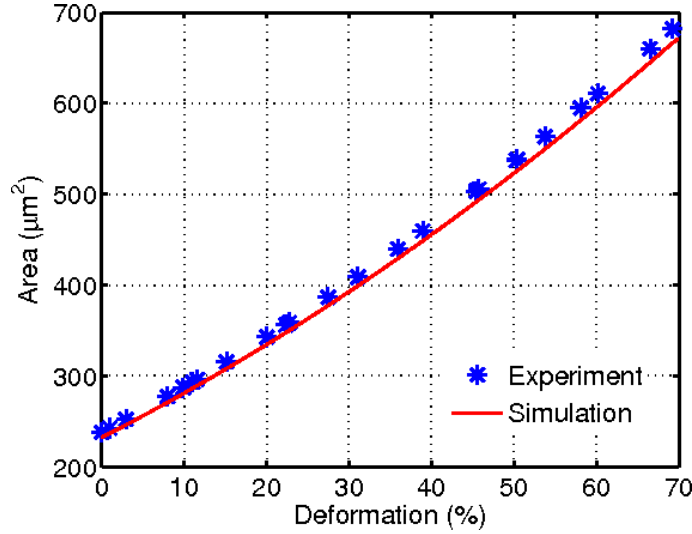


FIG. IV.9 – Evolution de la surface de contact.

Interaction fluide-structure

Dans le modèle biphasique, les inconnues du problème sont le champ de déplacement dans l'enveloppe \mathbf{u} et le champ de vitesse dans le fluide \mathbf{v}_f . Il est donc nécessaire de résoudre à la fois un problème de structure et un problème de fluide. Deux approches peuvent être employées, à savoir une approche simultanée et une approche décalée. Dans la première, les équations des deux systèmes sont résolus en même temps alors que, dans la seconde, elles le sont l'une après l'autre par des solveurs différents. Dans ce travail, on utilise un algorithme décalé dans lequel l'interaction est prise en compte via les conditions à l'interface.

Cet algorithme se décline de la façon suivante. Etant donné un état d'équilibre entièrement connu, on prédit le déplacement de la structure \mathbf{u}^{pred} en supposant que les forces exercées par le fluide à l'interface \mathbf{t}_f^{pred} sont égales à celles du pas d'avant. On convertit ensuite le champ de déplacement solution en un champ de vitesse afin de l'imposer en conditions aux limites au problème de fluide. Une fois le problème fluide résolu, on extrait de la solution le champ de contraintes à l'interface \mathbf{t}_f de sorte à l'appliquer en conditions limites au problème de structure. Enfin, on résout le problème de structure et on compare le nouveau champ de déplacement \mathbf{u} à celui qui avait été prédit. On compare également les forces visqueuses, à savoir

$$\|\mathbf{u} - \mathbf{u}^{pred}\| < \epsilon_u \quad \text{et} \quad \|\mathbf{t}_f - \mathbf{t}_f^{pred}\| < \epsilon_t, \quad (\text{IV.16})$$

où ϵ_u et ϵ_t désignent les paramètres de tolérance sur le déplacement et les forces visqueuses respectivement. Si l'erreur est acceptable, alors la solution est retenue et on passe au pas suivant. Dans le cas contraire, on réitère la démarche avec les nouvelles forces visqueuses et ce jusqu'à convergence. Un schéma de principe est donné en figure IV.10

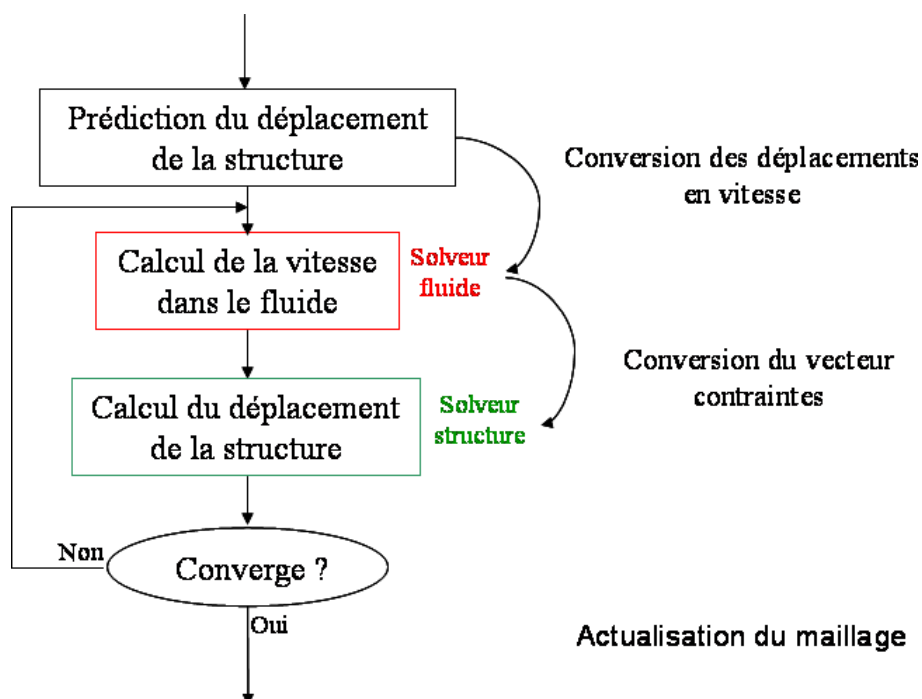


FIG. IV.10 – Algorithme de résolution de l'interaction fluide-structure.

A chaque pas, il est nécessaire d'actualiser le maillage du fluide afin qu'il reste en contact permanent avec celui de la structure. Ainsi, une procédure de remaillage, impliquant un mailleur externe [133], est utilisée. Cette procédure, détaillée ci-après, est également employée dans le modèle purement élastique afin d'éviter les distorsions trop importantes de certains éléments dues aux grandes déformations.

Remaillage et transport

A chaque incrément de Newton-Raphson, on génère un nouveau maillage dont les bords coïncident avec ceux de l'ancien. Il est alors nécessaire de transporter les données de l'ancienne configuration vers la nouvelle. On distingue deux types de

variables, à savoir les variables nodales et les variables stockées aux points d'intégration. Le traitement de ces variables n'est pas le même. Pour les premières, le transport s'effectue par une simple interpolation à l'aide des fonctions de forme de l'ancien maillage. Pour les secondes, on commence par les extrapoler aux noeuds de l'ancien maillage au moyen de la méthode des moindres carrés [161]. Puis, elles sont transportées comme les précédentes, à savoir par interpolation. Il est important de souligner que l'extrapolation engendre une diffusion numérique supplémentaire.

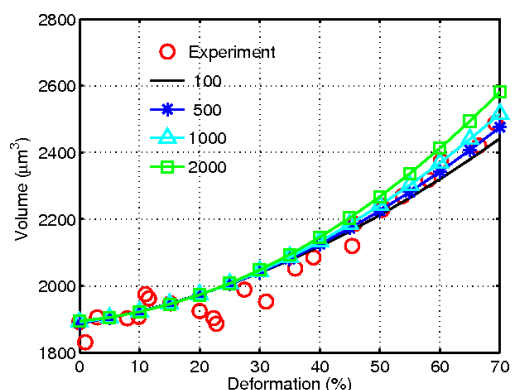
Identification des paramètres

A présent, il est possible de procéder aux simulations de l'étalement. Il convient toutefois d'identifier les meilleurs paramètres de chaque modèle qui ajustent le mieux les résultats numériques aux résultats expérimentaux. Une procédure d'optimisation est alors lancée sur les différents paramètres des deux modèles. La comparaison porte sur l'évolution du volume et de la force générée par la cellule sur la lamelle. Les coefficients optimaux sont donnés en table IV.1 en terme de module d'Young et de coefficient de Poisson puisque $\mu = E/2(1 + \nu)$. Ces valeurs appartiennent aux plages de valeurs rencontrées dans la littérature.

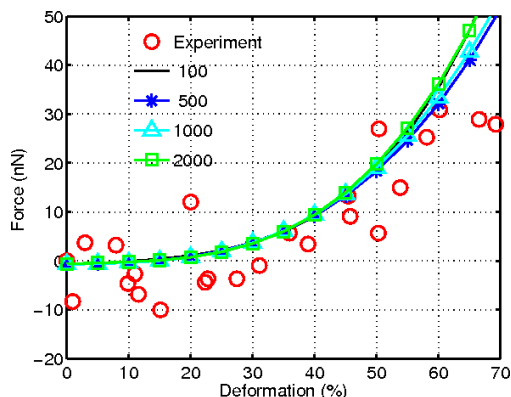
Modèle	Constituant	E (Pa)	ν	Jm	η (Pa.s)
Hyperélastique	Enveloppe	1000	0.4	100	
	Intérieur	100	0.4	100	
Biphasique	Enveloppe	1000	0.4	100	
	Intérieur		0.46		1000

TAB. IV.1 – Propriétés mécaniques optimales des deux modèles

A présent, on s'intéresse à la sensibilité de chaque modèle vis-à-vis de leurs paramètres. Ainsi, partant des paramètres optimaux, on fait varier un à un les coefficients afin de déterminer leur influence sur la réponse globale.

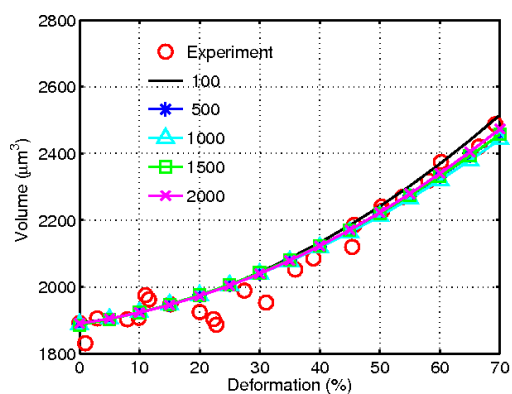


(a) Evolution du volume en fonction de la déformation

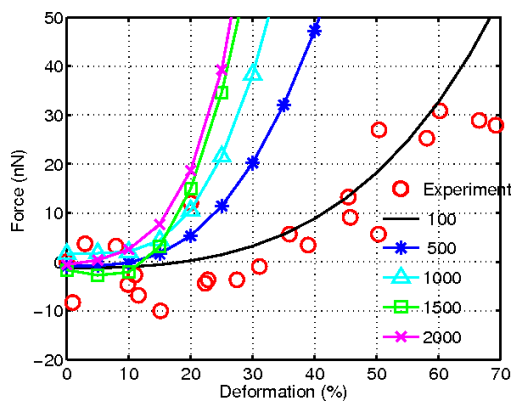


(b) Evolution de la force en fonction de la déformation

FIG. IV.11 – Influence du module d'Young de l'enveloppe



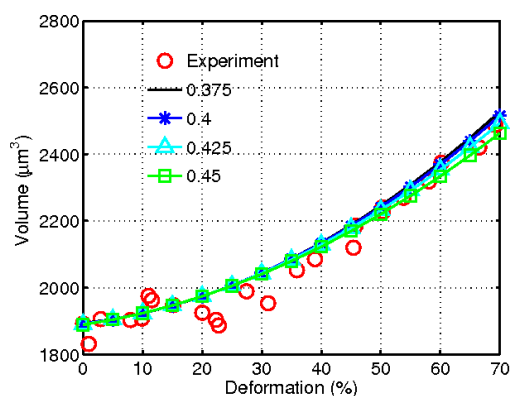
(a) Evolution du volume en fonction de la déformation



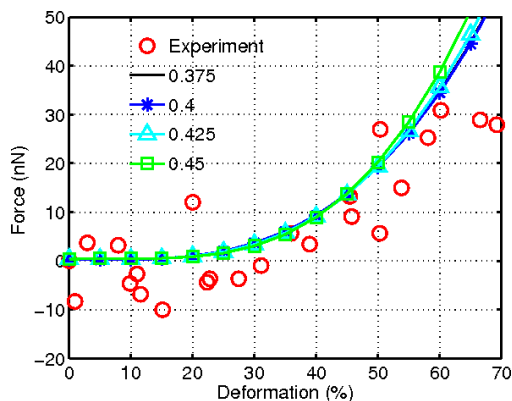
(b) Evolution de la force en fonction de la déformation

FIG. IV.12 – Influence du module d'Young de l'intérieur

Pour le modèle élastique, on commence par faire varier le module d'Young de chaque constituant. On observe que celui de l'enveloppe influe très peu sur la réponse totale tandis que celui de l'intérieur joue un rôle prépondérant sur la force générée. Plus précisément, son augmentation conduit à une explosion de la force générée.

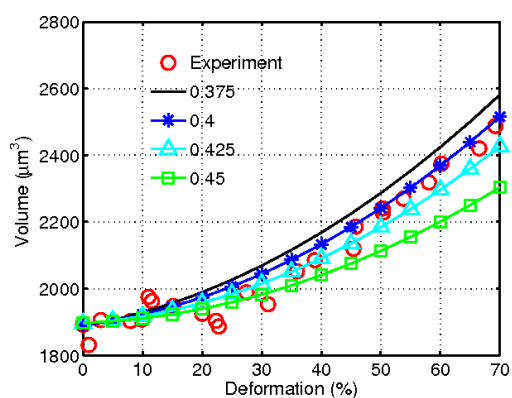


(a) Evolution du volume en fonction de la déformation

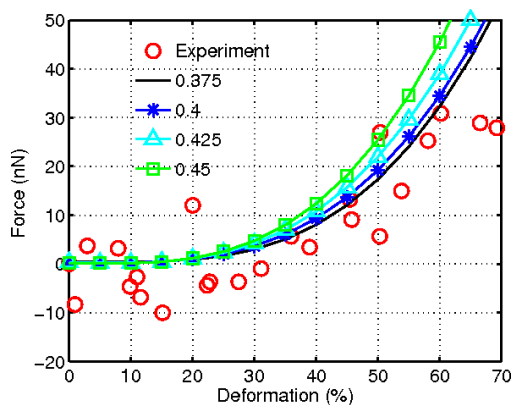


(b) Evolution de la force en fonction de la déformation

FIG. IV.13 – Influence du coefficient de Poisson de l'enveloppe



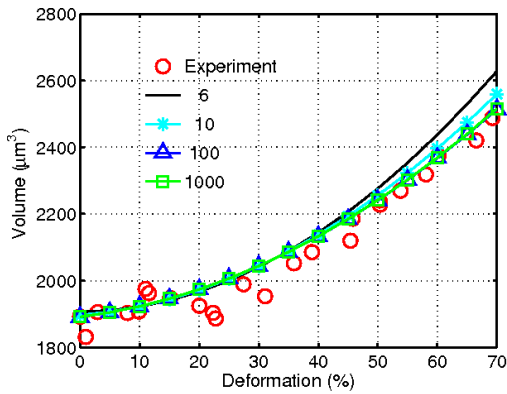
(a) Evolution du volume en fonction de la déformation



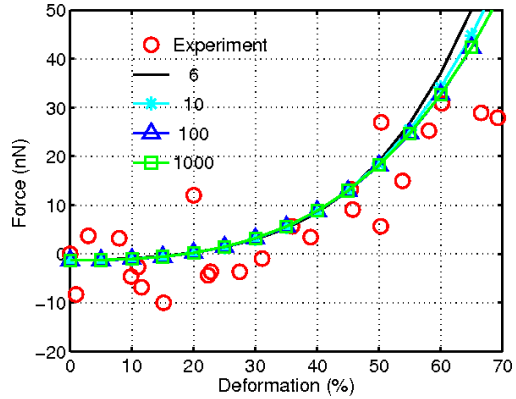
(b) Evolution de la force en fonction de la déformation

FIG. IV.14 – Influence du coefficient de Poisson de l'intérieur

À présent, on fait varier le coefficient de Poisson de chaque phase pour le même modèle. On s'aperçoit que celui de l'enveloppe ne joue aucun rôle alors que celui de l'intérieur a une influence notable sur l'évolution du volume. Son augmentation réduit la prise de volume.

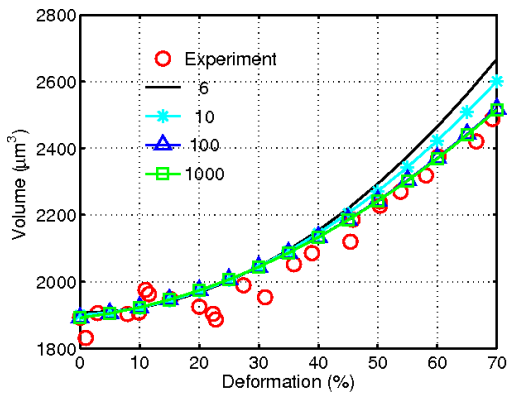


(a) Evolution du volume en fonction de la déformation

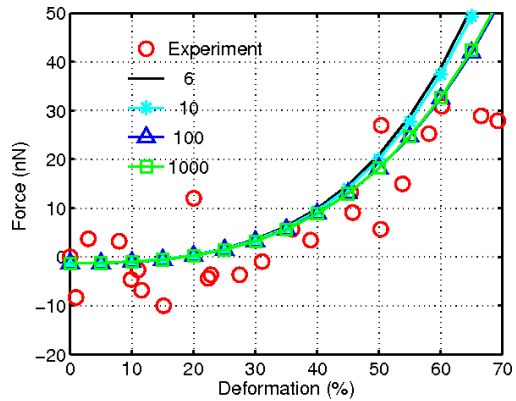


(b) Evolution de la force en fonction de la déformation

FIG. IV.15 – Influence du coefficient J_m de l'enveloppe



(a) Evolution du volume en fonction de la déformation



(b) Evolution de la force en fonction de la déformation

FIG. IV.16 – Influence du coefficient J_m de l'intérieur

Le dernier paramètre à étudier est J_m . On rappelle qu'il reflète la limite d'extensibilité des chaînes moléculaires des polymères. On constate qu'il n'a que peu d'influence dans les simulations : il agit essentiellement sur le volume aux grandes déformations. On remarque aussi que son influence n'évolue plus à partir d'une certaine valeur critique estimée à 100. Ci-dessous, on donne le profil des contraintes en milieu et fin d'étalement. Celles-ci se concentrent en périphérie de la cellule.

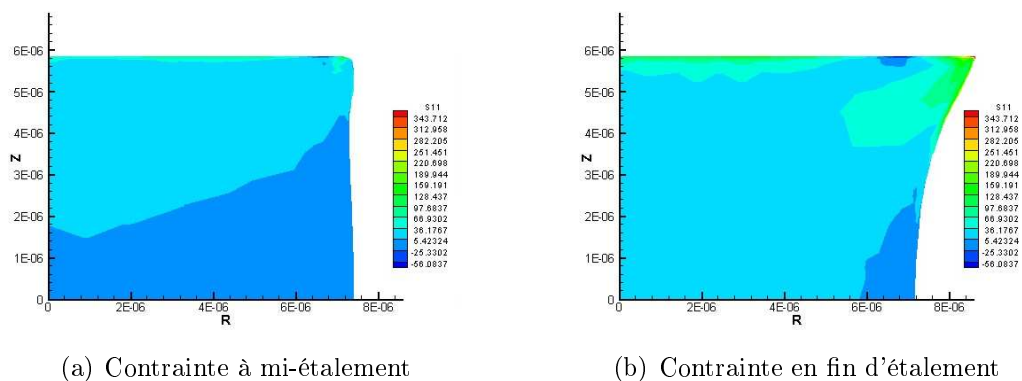


FIG. IV.17 – Contrainte de Cauchy radiale

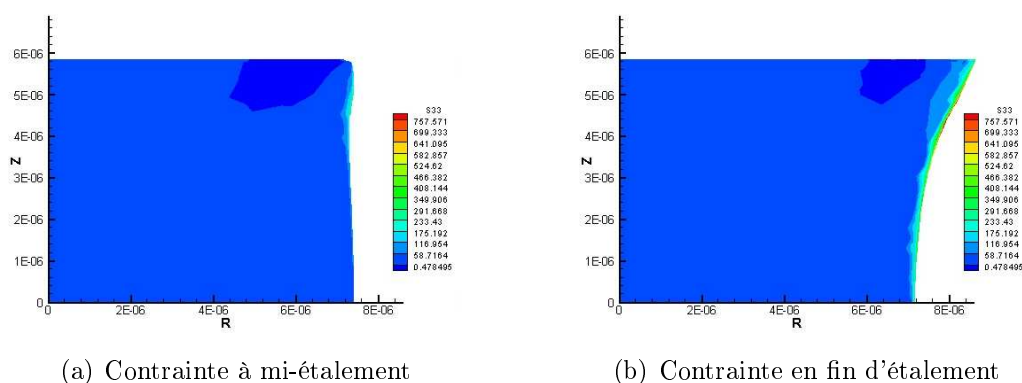


FIG. IV.18 – Contrainte de Cauchy axiale

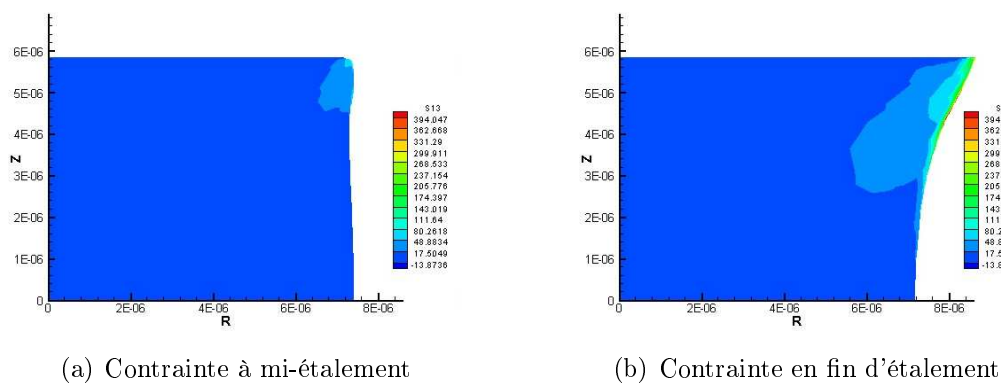
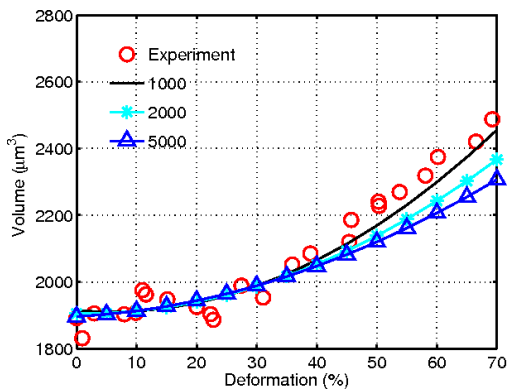
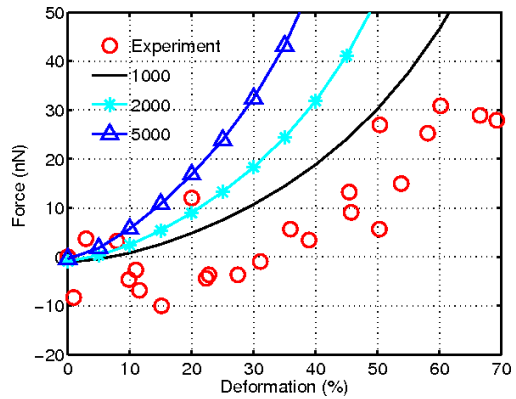


FIG. IV.19 – Contrainte de Cauchy de cisaillement

Pour le modèle biphasique, on constate que les propriétés de l'enveloppe joue un rôle plus important. Toutefois, leurs contributions restent modestes face à celle des paramètres du fluide. Ainsi, on ne présente ici que l'influence des coefficients liés au fluide. On commence par faire varier la viscosité de cisaillement : elle agit à la fois sur l'évolution du volume et sur celle de la force. Plus elle augmente, plus la force croît alors que le volume décroît. Une observation similaire est faite pour le coefficient de Poisson.

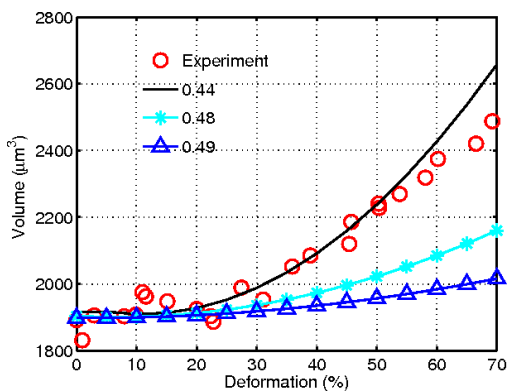


(a) Evolution du volume en fonction de la déformation

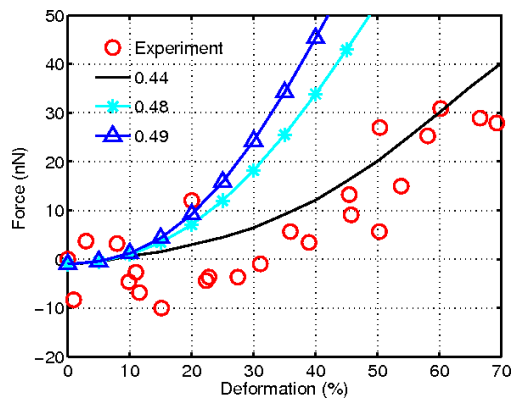


(b) Evolution de la force en fonction de la déformation

FIG. IV.20 – Influence du coefficient η du fluide

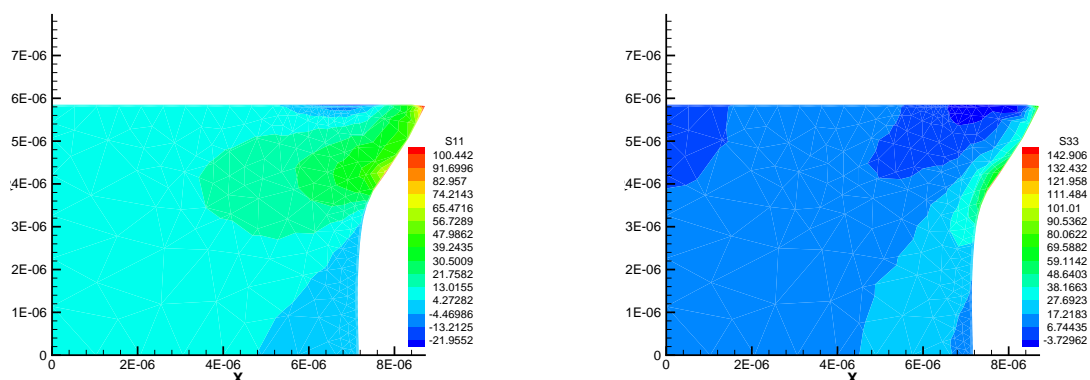


(a) Evolution du volume en fonction de la déformation



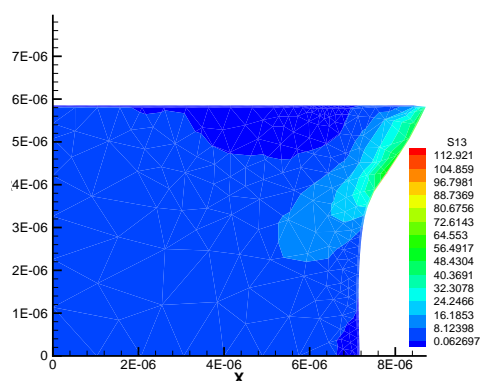
(b) Evolution de la force en fonction de la déformation

FIG. IV.21 – Influence du coefficient de Poisson du fluide



(a) Contrainte radiale

(b) Contrainte axiale



(c) Contrainte de cisaillement

FIG. IV.22 – Etat de contraintes en fin d'étalement.

IV.3 Conclusion

Ce chapitre a porté sur la modélisation et simulation de l'étalement d'une cellule vivante entre deux lamelles fixes. Une attention particulière a été portée au rôle de la membrane plasmique associée au cortex d'actine. Ainsi, les deux modèles proposés ne comportent que deux parties, à savoir une membrane élastique et le reste de la cellule. Le premier modèle est entièrement élastique tandis que, dans le second, on distingue une phase élastique et une phase fluide. Bien que simplistes, ces deux modèles ont permis de reproduire les résultats expérimentaux en terme de force générée et d'évolution de volume.

Conclusions et Perspectives

Ce travail de thèse contribue aux développements de méthodes numériques pour le traitement des discontinuités et des non linéarités dans les matériaux hétérogènes. Dans ce contexte, la méthode d'éléments finis multi échelle apparaît comme un outil puissant permettant la détermination du comportement effectif à partir des propriétés de la microstructure. Impliquant des calculs simultanés aux deux échelles, cette approche reste coûteuse. Afin d'alléger ces coûts, une technique combinant une méthode de réduction de modèle de type POD et le calcul parallèle a été proposée. Cette technique consiste à projeter les équations de l'échelle la plus petite sur une base réduite, ce qui diminue le nombre de degrés de liberté et, par extension, les temps de calculs. Cette approche a été validée par des exemples et des comparaisons avec des calculs de référence.

Ensuite, une généralisation des interfaces imparfaites cohérentes a été réalisée dans le cadre de l'élasticité non linéaire et une formulation énergétique a été proposée. Dans ce modèle, le champ de déplacement reste continu alors que le vecteur de contraintes nominales subit un saut à la traversée de l'interface. Ceci correspond à une extension de l'équation de Young-Laplace au cas des transformations finies. L'avantage principal de ce modèle réside dans le fait qu'aucun système de coordonnées curvilignes n'a été introduit et qu'il est compatible avec la méthode numérique level-set. Des solutions exactes ont été établies pour des géométries particulières constituées d'élastomères isotropes.

Puis, les effets de ces interfaces ont été pris en compte, d'un point de vue numérique, par une approche mêlant la méthode des éléments finis étendus et la méthode de level-set. Cette alliance permet à la fois une gestion simple de microstructures complexes et le calcul des termes liés aux énergies de surface sans ajout d'élément de surface. Cette technique, validée par les résultats exacts trouvés, a été couplée à la procédure d'homogénéisation numérique afin de prédire le comportement global d'une structure hétérogène en présence d'interphases. Cette combinaison a égale-

ment permis d'observer les effets de taille à l'échelle nanométrique.

Enfin, deux modèles continus (l'un élastique, l'autre biphasique) ont été proposés pour modéliser le comportement passif d'une cellule lors de son étalement entre deux lamelles fixes. Ces modèles mettent en avant deux parties, à savoir le cortex d'actine associé à la membrane plasmique et le reste de la cellule. Bien que simplistes, ces deux modèles ont permis de reproduire les résultats expérimentaux en terme de force générée et d'évolution de volume. Les paramètres matériaux retenus concordent bien avec ceux trouvés dans la littérature.

En perspective de ce travail, on envisage l'introduction de la méthode XFEM/level-set dans le problème biomécanique afin de représenter l'enveloppe de la cellule et d'éviter le remaillage. Pour cela, il convient d'étendre la méthodologie proposée à une formulation en Lagrangien actualisé. Un point clé réside dans la mise à jour de la fonction de niveau et dans le transfert des degrés de liberté additionnels.

Il est également envisagé une modélisation plus complète de la cellule qui tiendrait compte de son caractère actif. Ce nouveau modèle devra permettre de reproduire l'étalement de la cellule mais aussi d'autres expériences comme le fluage de la cellule, sa relaxation ou encore sa réponse à des essais de traction-compression. De là, on pourrait approcher le comportement des tissus par une méthode éléments finis multi niveau.

Dans la partie mécanique, on a souligné que la méthode de réduction de modèle permet de réduire significativement les temps de calculs de l'approche multi échelles. Toutefois, ce comparatif ne tient pas compte du temps mis à déterminer la base réduite. Or, celui-ci est relativement important. De plus, il n'est pas certain que l'échantillonnage réalisé pour la construction de cette base soit le meilleur, ce qui conduirait à une mauvaise convergence de l'algorithme de Newton-Raphson. Une technique possible pour pallier ces deux inconvénients serait de constituer la base en parallèle du calcul souhaité [129, 130].

De plus, la méthode XFEM/level-set présenté ici souffre de quelques désagréments comme par exemple les oscillations constatées près de l'interface. N'étant pas clairement définie, leur cause doit fait l'objet d'une analyse approfondie. Les pistes envisagées se tournent vers les éléments partiellement enrichis, le traitement de l'incompressibilité et les conditions aux limites de Dirichlet.

Il est également concevable d'introduire des effets dynamiques dans le problème d'interfaces imparfaites. On pourrait alors étudier l'influence de celles-ci dans la pro-

pagation d'ondes. Différents modèles d'interfaces seraient susceptible d'être utilisés.

Bibliographie

- [1] B. Alberts, A. Johnson, J. Lewis, M. Raff, K. Roberts, and P. Walter. *Molecular biology of the cell*. Garland, 2002.
- [2] J. Alcaraz, L. Buscemi, M. Grabulosa, X. Trepas, B. Fabry, R. Farré, and D. Navajas. Microrheology of human lung epithelial cells measured by atomic force microscopy. *Biophysical Journal*, 84 :2071–2079, 2003.
- [3] T. Arima, S. Yamasaki, K. Yamahira, K. Idemitsu, Y. Inagaki, and K. Degueudre. Evaluation of thermal conductivity of zirconia-based inert matrix fuel by molecular dynamics simulation. *Journal of Nuclear Materials*, 352 :309–317, 2006.
- [4] A.A. Atai and Steigmann D.J. Coupled deformations of elastic curves and surfaces. *International Journal of Solids and Structures*, 35 :1915–1952, 1997.
- [5] R.J. Atkin and N. Fox. *An introduction to the theory of elasticity*. Dover, 2005.
- [6] J.A. Atwell and B.B. King. Proper orthogonal decomposition for reduced basis feedback controllers for parabolic equations. *Mathematical and Computer Modelling*, 33 :1–19, 2001.
- [7] Unknown author. <http://rsb.info.nih.gov/ij/images/FluorescentCells.jpg>, 2009.
- [8] Unknown author. <http://www.cegep-ste-foy.qc.ca/profs/gbourbonnais/pascal/fya/chimcell/notesmolecules/proteines3.htm>, 2009.
- [9] J.M. Ball. Convexity conditions and existence theorems in nonlinear elasticity. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 63 :337–403, 1977.
- [10] W.G. Bardsley and J.D. Aplin. Kinetic analysis of cell spreading. *Journal of Cell Science*, 61 :365–373, 1983.

- [11] R. Barea, M. Belmonte, M.I. Osendi, and P. Miranzo. Thermal conductivity of al_2o_3/sic platelet composites. *Journal of the European Ceramic Society*, 23 :1773–1778, 2003.
- [12] A.R. Bausch, F. Ziemann, A.A. Boulbitch, K. Jacobson, and E. Sackmann. Local measurements of viscoelastic parameters of adherent cell surfaces by magnetic bead microrheometry. *Biophysical Journal*, 75 :2038–2049, 1998.
- [13] T. Belytschko and T. Black. Elastic crack growth in finite elements with minimal remeshing. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 45 :601–620, 1999.
- [14] T. Belytschko, R. Gracie, and G. Ventura. A review of extended/generalized finite element methods for material modeling. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 17 :043001, 2009.
- [15] T. Belytschko, W.K. Liu, and B. Moran. *Nonlinear finite elements for continua and structures*. Wiley, 2000.
- [16] T. Belytschko, C. Parimi, N. Moës, N. Sukumar, and S. Usui. Structured extended finite element method for solids defined by implicit surfaces. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 56 :609–635, 2003.
- [17] Y. Benveniste. A general interface model for a three-dimensional curved thin anisotropic interphase between two anisotropic media. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 54 :708–734, 2006.
- [18] Y. Benveniste and T. Miloh. Imperfect soft and stiff interfaces in two-dimensional elasticity. *Mechanics of Materials*, 33 :309–323, 2001.
- [19] Y. Benveniste and T. Miloh. Soft neutral elastic inhomogeneities with membrane-type interface conditions. *Journal of Elasticity*, 88 :87–111, 2007.
- [20] R. Blumenfeld and D.J. Bergman. Strongly nonlinear composite dielectrics : a perturbation method for finding the potential field and bulk effective properties. *Physical Review B*, 44 :7378–7386, 1991.
- [21] D. Boal. *Mechanics of the cell*. Cambridge University Press, 2002.
- [22] M. Bornert, T. Brethau, and P. Gilormini. *Homogénéisation en mécanique des matériaux*. Hermes Science Publications, 2001.
- [23] F. Brezzi and K.J. Bathe. A discourse on the stability conditions for mixed finite element formulations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 82 :27–57, 1990.

- [24] F. Brezzi and M. Fortin. *Mixed and hybrid finite element methods*. Springer, 1991.
- [25] N. Caille, O. Thoumine, Y. Tardy, and J.J. Meister. Contribution of the nucleus to the mechanical properties of endothelial cells. *Journal of Biomechanics*, 35 :177–187, 2002.
- [26] R.C. Cammarata. Surface and interface stress effects on interfacial and nanostructured materials. *Materials Science and Engineering A*, 237 :180–184, 1997.
- [27] P. Canãdas, V.M. Laurent, C. Oddou, D. Isabey, and S. Wendling. A cellular tensegrity model to analyse the structural viscoelasticity of the cytoskeleton. *Journal of Theoretical Biology*, 218 :155–173, 2002.
- [28] C.S. Chen, M. Mrksich, S. Huang, G.M. Whitesides, and D.E. Ingber. Geometric control of cell life and death. *Science*, 276 :1425–1428, 1997.
- [29] J.S. Chen, W. Han, C.T. Wu, and W. Duan. On the perturbed lagrangian formulation for nearly incompressible and incompressible hyperelasticity. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 142 :335–351, 1997.
- [30] T. Chen, G.J. Dvorak, and C.C. Yu. Size-dependent elastic properties of unidirectional nano-composites with interface stresses. *Acta Mechanica*, 188 :39–54, 2007.
- [31] J. Chessa and T. Belytschko. An enriched finite element method and level sets for axisymmetric two-phases flow with surface tension. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 58 :2041–2064, 2003.
- [32] J. Chessa, H. Wang, and T. Belytschko. On the construction of blending elements for local partition of unity enriched finite elements. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 57 :1015–1038, 2003.
- [33] P.G. Ciarlet. *Mathematical elasticity*. North-Holland, 1988.
- [34] D. Coughlin, M.F. and Stamenović. A tensegrity model of the cytoskeleton in spread and round cells. *Journal of Biomechanical Engineering-Transactions of the ASME*, 120 :770–777, 1998.
- [35] S. Cuenot, C. Frétygny, S. Demoustier-Champagne, and B. Nysten. Surface tension effect on the mechanical properties of nanomaterials measured by atomic force microscopy. *Physical Review B*, 69 :165410, 2004.

- [36] B. Dacorogna. *Direct methods in the calculus of variations*. Oxford University Press, 1989.
- [37] G. De Botton, I. Hariton, and E.A. Socolsky. Neo-hookean fiber-reinforced composites in finite elasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 54 :533–559, 2006.
- [38] N. Desprat, A. Guiroy, and A. Asnacios. Microplates-based rheometer for a single living cell. *Review of scientific instruments*, 77, 2006. 055111.
- [39] N. Desprat, A. Richert, J. Simeon, and A. Asnacios. Creep function of a single living cell. *Biophysical Journal*, 88 :2224–2233, 2005.
- [40] J.K. Diao, K. Gall, and M.L. Dunn. Atomistic simulation of the structure and elastic properties of gold nanowires. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 52 :1935–1962, 2004.
- [41] M.P. Do Carmo. *Differential geometry of curves and surfaces*. Prentice-Hall, 1976.
- [42] J.E. Dolbow. *An extended finite element method with discontinuous enrichment for applied mechanics*. PhD thesis, Northwestern University, 1999.
- [43] J.E. Dolbow and A. Devan. Enrichment of enhanced assumed strain approximations for representing strong discontinuities : addressing volumetric incompressibility and the discontinuous patch test. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 59 :47–67, 2004.
- [44] H.L. Duan, J. Wang, Z.P. Huang, and Karihaloo B.L. Eshelby formalism for nano-inhomogeneities. *Proceedings of the Royal Society of London series A*, 461 :3335–3353, 2005.
- [45] H.L. Duan, J. Wang, Z.P. Huang, and Karihaloo B.L. Size-dependent effective elastic constants of solids containing nano-inhomogeneities with interface stress. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 53 :1574–1596, 2005.
- [46] C.A. Duarte, I. Babuska, and J.T. Oden. Generalized finite element methods for three-dimensional structural mechanics problems. *Computers and Structures*, 77 :215–232, 2004.
- [47] F. Feyel. Multiscale fe² elastoviscoplastic analysis of composite structures. *Computational Materials Science*, 16 :344–354, 1999.

-
- [48] F. Feyel. A multilevel finite element method (fe²) to describe the response of highly non-linear structures using generalized continua. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 192 :3233–3244, 2003.
- [49] F. Feyel and J.L Chaboche. Fe² multiscale approach for modelling the elastoviscoplastic behaviour of long fibre sic/ti composite materials. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 183 :309–330, 2000.
- [50] P.J. Flory. Thermodynamic relations for high elastic materials. *Transaction of the Faraday Society*, 57 :829–838, 1961.
- [51] T.-P. Fries. A corrected xfm approximation without problems in blending elements. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 75 :503–532, 2008.
- [52] T. Frisch and O. Thoumine. Predicting the kinetics of cell spreading. *Journal of Biomechanics*, 35 :1137–1141, 2002.
- [53] Y.C. Fung. *Biomechanics : material properties of living tissues*. Springer, 1993.
- [54] W. Gao, S. Yu, and G. Huang. Finite element characterization of the size-dependent mechanical behaviour in nanosystems. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 17 :1118–1122, 2007.
- [55] A.N. Gent. A new constitutive relation for rubber. *Rubber Chemistry and Technology*, 69 :59–61, 1996.
- [56] S. Ghosh, K. Lee, and Raghavan P. A multilevel computational model for multi-scale damage analysis in composite and porous media. *International Journal of Solids and Structures*, 38 :2335–2385, 2001.
- [57] R. Gracie, H. Wang, and T. Belytschko. Blending in the extended finite element method by discontinuous galerkin and assumed strain methods. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 74 :1645–1669, 2008.
- [58] S.-T. Gu. *Contributions à la modélisation des interfaces imparfaites et à l’homogénéisation des matériaux hétérogènes*. PhD thesis, Université Paris-Est, 2008.
- [59] M.E. Gurtin and A.I. Murdoch. A continuum theory of elastic material surfaces. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 57 :291–323, 1975.

- [60] M.E. Gurtin, J. Weissmuller, and F. Larché. A general theory of curved deformable interfaces in solids at equilibrium. *Philosophical Magazine A*, 78 :1093–1109, 1998.
- [61] A. Hansbo and P. Hansbo. An unfitted finite element method, based on nitsche’s method, forelliptic interface problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 191 :5537–5552, 2002.
- [62] S. Hartmann and P. Neff. Polyconvexity of generalized polynomial-type hyperelastic strain energy functions for near-incompressibility. *International Journal of Solids and Structures*, 40 :2767–2791, 2003.
- [63] Z. Hashin. Thermoelastic properties of fiber composites with imperfect interface. *Mechanics of Materials*, 8 :333–348, 1990.
- [64] Z. Hashin. Thin interphase/imperfect interface in elasticity with application to coated fiber. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 50 :2509–2537, 2002.
- [65] Q.-C. He. Mécanique des interfaces. Cours de Master Recherche, Université Paris-Est Marne-La-Vallée.
- [66] Q.-C. He and B. Bary. Exact relations for the effective properties of nonlinearly elastic inhomogeneous materials. *International Journal of Multiscale Computational Engineering*, 2 :69–83, 2004.
- [67] Q.-C. He, H. Le Quang, and Z.-Q. Feng. Exact results for the homogenization of elastic fiber-reinforced solids at finite strain. *Journal of Elasticity*, 83 :153–177, 2006.
- [68] S.R. Heidemann, S. Kaech, R.E. Buxbaum, and A. Matus. Direct observations of the mechanical behaviors of the cytoskeleton in living fibroblasts. *Journal of Cell Biology*, 145 :109–122, 1999.
- [69] R. Hill. Discontinuity relations in mechanics of solids. *Progress in Solid Mechanics*, 2 :246–276, 1961.
- [70] R. Hill. Continuum micro-mechanics of elastoplastic polycrystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 13 :89–101, 1965.
- [71] R. Hill. On constitutive macro-variables for heterogeneous solids at finite strain. *Proceedings of the Royal Society of London series A*, 326 :131–147, 1972.

-
- [72] R. Hill. Interfacial operators in the mechanics of composite media. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 31 :347–357, 1983.
- [73] R.M. Hochmuth. Micropipette aspiration of living cells. *Journal of Biomechanics*, 33 :15–22, 2000.
- [74] P. Holmes, J.L. Lumley, and G. Berkooz. *Turbulence, coherent structures, dynamical systems and symmetry*. Cambridge, 1996.
- [75] G.A. Holzapfel. *Nonlinear solid mechanics*. Wiley, 2001.
- [76] C.O. Horgan and G. Saccomandi. Simple torsion of isotropic, hyperelastic, incompressible materials with limiting chain extensibility. *Journal of Elasticity*, 56 :159–170, 1999.
- [77] C.O. Horgan and G. Saccomandi. Constitutive models for compressible nonlinearly elastic materials with limiting chain extensibility. *Journal of Elasticity*, 77 :123–138, 2004.
- [78] C.O. Horgan and G. Saccomandi. A new constitutive theory for fiber-reinforced incompressible nonlinearly elastic solids. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 53 :1985–2015, 2005.
- [79] T. Hou and X.-H. Wu. A multiscale finite element method for elliptic problems in composites materials and porous media. *Journal of Computational Physics*, 134 :169–189, 1997.
- [80] L. Huang, Z. P. and Sun. Size-dependent effective properties of a heterogeneous material with interface energy effect : from finite deformation theory to infinitesimal strain analysis. *Acta Mechanica*, 190 :151–163, 2007.
- [81] Z. P. Huang and J. Wang. A theory of hyperelasticity of multi-phase media with surface/interface energy effect. *Acta Mechanica*, 182 :195–210, 2006.
- [82] T.J.R. Hughes. *The Finite Element Method Linear Static and Dynamic Finite Element Analysis*. Prentice-Hall, 1987.
- [83] P. Kanouté, D.P. Boso, J.L. Chaboche, and B.A. Schrefler. Multiscale methods for composites : a review. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 16 :31–75, 2009.
- [84] G. Kerschen, J.-C. Golinval, A.F. Vakakis, and L.A. Bergman. The method of proper orthogonal decomposition for dynamical characterization and order reduction of mechanical systems : an overview. *Nonlinear dynamics*, 41 :147–169, 2005.

- [85] V.G. Kouznetsova, M.G.D. Geers, and W.A.M. Brekelmans. Multi-scale second order computational homogenization of multi-phase materials : a nested finite element solution strategy. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 193 :5525–5550, 2004.
- [86] P. Krysl, S. Lall, and J.E. Marsden. Dimensional model reduction in nonlinear finite element dynamics of solids and structures. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 51 :479–504, 2001.
- [87] E. Kunisch and S. Volkwein. Galerkin proper orthogonal decomposition methods for parabolic problems. *Numerische Mathematik*, 90 :117–148, 2001.
- [88] N. Lahellec, F. Mazerolle, and J.C. Michel. Second-order estimate of the macroscopic behavior of periodic hyperelastic composites : theory and experimental validation. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 52 :27–49, 2004.
- [89] H. Le Quang and Q.-C. He. Variational principles and bounds for elastic inhomogeneous materials with coherent imperfect interfaces. *Mechanics of Materials*, 40 :865–884, 2008.
- [90] G. Legrain, N. Moës, and A. Huerta. Stability of incompressible formulations enriched with x-fem. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 197 :1835–1849, 2008.
- [91] M. Levinson and I.W. Burgess. A comparison of some simple constitutive relations for slightly compressible rubber-like materials. *International Journal of Mechanical Sciences*, 13 :563–572, 1971.
- [92] Y.C. Liang, H.P. Lee, S.P. Lim, W.Z. Lin, and K.H. Lee. Proper orthogonal decomposition and its applications-part i : theory. *Journal of Sound and Vibration*, 252 :527–544, 2002.
- [93] C.T. Lim, E.H. Zhou, A. Li, S.R.K. Vedula, and H.X. Fu. Experimental techniques for single cell and single molecule biomechanics. *Materials Science and Engineering C*, 26 :1278–1288, 2006.
- [94] C.T. Lim, E.H. Zhou, and S.T. Quek. Mechanical models for living cells-a review. *Journal of Biomechanics*, 39 :195–216, 2006.
- [95] O. Lopez-Pamies. *On the effective behavior, microstructure evolution, and macroscopic stability of elastomeric composites*. PhD thesis, Ecole Polytechnique, 2006.

-
- [96] O. Lopez-Pamies and P. Ponte Castañeda. On the overall behavior, microstructure evolution, and macroscopic stability in reinforced rubbers at large deformations :1-theory. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 54 :807–830, 2006.
- [97] V. Lulevich, T. Zink, H.-Y. Chen, F.-T. Liu, and G.-Y. Liu. Cell mechanics using atomic force microscopy-based single-cell compression. *Langmuir*, 22 :8151–8155, 2006.
- [98] K. Matsui, K. Terada, and K. Yuge. Two-scale finite element analysis of heterogeneous solids with periodic microstructures. *Computers and Structures*, 82 :593–606, 2004.
- [99] J.M. Melenk and I. Babüska. The partition of unity finite element method : basic theory and applications. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 136 :289–314, 1996.
- [100] J. Mergheim and P. Steinmann. A geometrically nonlinear fe approach for the simulation of strong and weak discontinuities. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 195 :5037–5052, 2006.
- [101] D. Mitrossilis, J. Fouchard, N. Guiroy, A. Desprat, N. Rodriguez, B. Fabry, and A. Asnacios. Single-cell response to stiffness exhibits muscle-like behavior. *Proceedins of the National Academy of Sciences*, 106 :18243–18248, 2009.
- [102] N. Moës, M. Cloirec, P. Cartraud, and J.-F. Remacle. A computational approach to handle complex microstructure geometries. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 192 :3163–3177, 2003.
- [103] N. Moës, J. Dolbow, and T. Belytschko. A finite element method for crack growth without remeshing. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 46 :131–156, 1999.
- [104] M.R.K. Mofrad and R.D. Kamm. *Cytoskeletal mechanics*. Cambridge University Press, 2006.
- [105] E. Monteiro, Q.-C. He, and J. Yvonnet. Analytical and numerical solutions for finite elastic deformation problems involving imperfect interfaces. *1st International Conference on Material Modelling*, Dortmund, Germany, September 2009.
- [106] E. Monteiro, J. Yvonnet, and Q.-C. He. Computational homogenization for nonlinear conduction in heterogeneous materials using model reduction. *Computational Materials Science*, 42 :704–712, 2008.

- [107] E. Monteiro, J. Yvonnet, and Q.-C. He. Modeling imperfect interfaces at finite strains using x-fem. *International Conference on Extended Finite Element Methods*, Aachen, Germany, September 2009.
- [108] A.I. Murdoch. Some fundamental aspects of surface modelling. *Journal of Elasticity*, 80 :33–52, 2005.
- [109] J.A. Nairn. Numerical implementation of imperfect interfaces. *Computational Materials Science*, 40 :525–536, 2007.
- [110] S. Nemat-Nasser. Averaging theorems in finite deformation plasticity. *Mechanics of Materials*, 31 :493–523, 1999.
- [111] J.T. Oden and J.N. Reddy. *The Mathematical Theory of Finite Elements*. Wiley, 1976.
- [112] R.W. Ogden. Large deformation isotropic elasticity - on the correlation of theory and experiment for incompressible rubberlike solids. *Proceedings of the Royal Society of London series A*, 326 :565–584, 1972.
- [113] R.W. Ogden. Extremum principles in non-linear elasticity and their application to composites -1 theory. *International Journal of Solids and Structures*, 14 :265–282, 1978.
- [114] R.W. Ogden. *Nonlinear elastic deformations*. Ellis Horwood, 1984.
- [115] R.W. Ogden, G. Saccomandi, and I. Sgura. Fitting hyperelastic models to experimental data. *Computational Mechanics*, 34 :484–502, 2004.
- [116] S. Osher and J.A. Sethian. Fronts propagating with curvature dependent speed : algorithms based on hamilton-jacobi formulations. *Journal of Computational Physics*, 79 :12–49, 1988.
- [117] D. Pantuso and K.J. Bathe. On the stability of mixed finite elements in large strain analysis of incompressible solids. *Finite Elements in Analysis and Design*, 28 :83–104, 1997.
- [118] A.C. Pipkin. Convexity conditions for strain-dependent energy functions for membranes. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 121 :361–376, 1993.
- [119] A. Placzek, D.-M. Tran, and R. Ohayon. Hybrid proper orthogonal decomposition formulation for linear structural dynamics. *Journal of Sound and Vibration*, 318 :943–964, 2008.

- [120] P. Ponte Castañeda. The overall constitutive behaviour of nonlinearly elastic composites. *Proceedings of the Royal Society of London series A*, 422 :147–171, 1989.
- [121] P. Ponte Castañeda. Bounds and estimates for the properties of nonlinear heterogeneous systems. *Philosophical Transaction of the Royal Society of London series A*, 340 :531–567, 1992.
- [122] P. Ponte Castañeda. Second-order homogenization estimates for nonlinear composites incorporating field fluctuations : I-theory. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 50 :737–757, 2002.
- [123] P. Ponte Castañeda and M. Kailasam. Nonlinear electrical conductivity in heterogeneous media. *Proceedings of the Royal Society of London series A*, 453 :793–816, 1997.
- [124] P. Ponte Castañeda and E. Tiberio. A second-order homogenization method in finite elasticity and applications to black-filled elastomers. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 48 :1389–1411, 2000.
- [125] P.A. Pullarkat, P.A. Fernández, and A. Ott. Rheological properties of the eukaryotic cell cytoskeleton. *Physics Reports*, 449 :29–53, 2007.
- [126] C.A. Reinhart-King, M. Dembo, and D.A. Hammer. The dynamics and mechanics of endothelial cell spreading. *Biophysical Journal*, 89 :676–689, 2005.
- [127] J. Renard. Modélisation de la dégradation d’une pièce composite par une simulation numérique à deux échelles. *La recherche aérospatiale*, 1 :57–66, 1990.
- [128] R.S. Rivlin and D.W. Saunders. Large elastic deformations of isotropic materials vii. experiments on the deformation of rubber. *Philosophical Transaction of the Royal Society of London series A*, 243 :251–288, 1951.
- [129] D. Ryckelynck. A priori hyperreduction method : an adaptive approach. *Journal of Computational Physics*, 202 :346–366, 2005.
- [130] D. Ryckelynck, F. Chinesta, E. Cueto, and A. Ammar. On the a priori model reduction : overview and recent developments. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 13 :91–128, 2006.
- [131] Y. Saad and M.H. Schultz. Gmres : a generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 7 :856–869, 1986.

- [132] J. Schröder and P. Neff. Invariant formulation of hyperelastic transverse isotropy based on polyconvex free energy functions. *International Journal of Solids and Structures*, 40 :401–445, 2003.
- [133] J.R. Shewchuk. Triangle : A two-dimensional quality mesh generator and delaunay triangulator. <http://www.cs.cmu.edu/quake/triangle.html>.
- [134] L. Sirovich. Turbulence and the dynamics of coherent structures part i : Coherent structures. *Quartil of Applied Mathematics*, 45 :561–571, 1987.
- [135] R.J.M. Smit, W.A.M. Brekelmans, and H.E.H. Meijer. Prediction of the mechanical behavior of nonlinear heterogeneous systems by multi-level finite element modeling. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 155 :181–192, 1998.
- [136] M. Soheil. *Extended finite element method : for fracture analysis of structures*. Wiley, 2008.
- [137] A.J.M. Spencer. *Continuum theory of the mechanics of fibres-reinforced composites*. Springer, 1984.
- [138] K.R. Srinivasan, K. Matous, and P.H. Geubelle. Generalized finite element method for modeling nearly incompressible bimaterial hyperelastic solids. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 197 :4882–4893, 2008.
- [139] D. Stamenović, J.J. Fredberg, N. Wang, J.P. Butler, and D.E. Ingber. A microstructural approach to cytoskeletal mechanics based on tensegrity. *Journal of Theoretical Biology*, 181 :125–136, 1996.
- [140] D.J. Steigmann and R.W. Ogden. Elastic surface-substrate interactions. *Proceedings of the Royal Society of London series A*, 455 :437–474, 1999.
- [141] N. Sukumar, D.L. Chopp, N. Moës, and T. Belytschko. Modeling holes and inclusions by level sets in the extended finite-element method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 190 :6183–6200, 2001.
- [142] N. Sukumar, Z.Y. Huang, J.H. Prevost, and Z. Suo. Partition of unity enrichment for bimaterial interface cracks. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 59 :1075–1102, 2004.
- [143] P. Suquet. *Effective properties of nonlinear composites in continuum micromechanics*. Springer, 1997.

- [144] D.R.S. Talbot and Willis J.R. Upper and lower bounds for the overall properties of a nonlinear composite dielectric. 1. random microgeometry. *Proceedings : Mathematical and Physical Sciences*, 447 :365–384, 1994.
- [145] D.R.S. Talbot and Willis J.R. Upper and lower bounds for the overall properties of a nonlinear composite dielectric. 2. periodic microgeometry. *Proceedings : Mathematical and Physical Sciences*, 447 :385–396, 1994.
- [146] M. Tanaka, T. Matsumoto, and S. Takakuwa. Dual reciprocity bem for time-stepping approach to the transient heat conduction problem in nonlinear materials. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 195 :4953–4961, 2006.
- [147] K. Terada and N. Kikuchi. A class of general algorithms for multi-scale analysis of heterogeneous media. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 190 :5427–5464, 2001.
- [148] O. Thoumine, O. Cardoso, and J.J. Meister. Changes in the mechanical properties of fibroblasts during spreading : a micromanipulation study. *European Biophysics Journal*, 28 :222–234, 1999.
- [149] S. Torquato. *Random heterogeneous materials : microstructure and macroscopic properties*. Springer, 2001.
- [150] N. Tymchenko, J. Wallentin, S. Petronis, L.M. Bjursten, B. Kasemo, and J. Gold. A novel cell force sensor for quantification of traction during cell spreading and contact guidance. *Biophysical Journal*, 93 :335–345, 2007.
- [151] K.J. Van Vliet, G. Bao, and S. Suresh. The biomechanics toolbox : experimental approaches for living cells and biomolecules. *Acta Materialia*, 51 :5881–5905, 2003.
- [152] T. Wakatsuki, R.B. Wysolmerski, and E.L. Elson. Mechanics of cell spreading : role of myosin ii. *Journal of the Cell Science*, 116 :1617–1625, 2003.
- [153] N. Wang and D.E. Ingber. Control of cytoskeletal mechanics by extracellular matrix, cell shape, and mechanical tension. *Biophysical Journal*, 66 :2181–2189, 1994.
- [154] P. Wriggers and S. Reese. A note on enhanced strain methods for large deformations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 135 :201–209, 1996.

- [155] S. Yamada, D. Wirtz, and S.C. Kuo. Mechanics of living cells measured by laser tracking microrheology. *Biophysical Journal*, 78 :1736–1747, 2000.
- [156] J. Yvonnet and Q.-C. He. The reduced model multiscale method (r3m) for the nonlinear homogenization of hyperelastic media at finite strain. *Journal of Computational Physics*, 223 :341–368, 2007.
- [157] J. Yvonnet, Q.-C. He, and E. Monteiro. On the use of model reduction for computational homogenization of non-linear micro and nano composites. *Computational Modeling and Experiments of the Composites Materials with Micro and Nano structures*, Liptovsky Mikulas, Slovakia, May 2007.
- [158] J. Yvonnet, Q.-C. He, and C. Toulemonde. Numerical modelling of the effective conductivities of composites with arbitrarily shaped inclusions and highly conducting interface. *Composites Science and Technology*, 68 :2825–2828, 2008.
- [159] J. Yvonnet, H. Le Quang, and Q.-C. He. An xfem/level set approach to modelling surface/interface effects and to computing the size-dependent effective properties of nanocomposites. *Computational Mechanics*, 42 :119–131, 2008.
- [160] J. Yvonnet, E. Monteiro, H. Le Quang, and Q.-C. He. Thermo-mechanical numerical modelling of nano-inclusions with arbitrary shapes. *IUTAM Symposium on Modelling Nanomaterials and Nanosystems*, Aalborg, Denmark, May 2008.
- [161] O.C. Zienkiewicz and R.L. Taylor. *The finite element method*. Butterworth-Heinemann, 2000.

TITRE

Contributions aux méthodes numériques pour traiter les non linéarités et les discontinuités dans les matériaux hétérogènes

RÉSUMÉ

Motivé par l'étude de tissus biologiques, ce travail contribue aux développements d'outils numériques permettant de prédire la réponse mécanique de matériaux hétérogènes non linéaires dans lesquels les énergies d'interfaces deviennent prépondérantes. Ainsi, une méthode d'homogénéisation multi échelle combinée à une technique de réduction de modèle basée sur la décomposition orthogonale aux valeurs propres est proposée dans un cadre thermique et hyperélastique. Les énergies d'interfaces entre les différentes phases des composites sont décrites par un modèle d'interface cohérent et prises en compte numériquement par une approche liant la méthode des éléments finis étendus et la méthode level-set. Une étude de l'étalement d'une cellule vivante entre deux lamelles fixes est ensuite réalisée. Les deux modèles proposés permettent une bonne concordance des résultats numériques et expérimentaux en terme d'évolution de géométrie et de force générée.

MOTS-CLÉS :

Homogénéisation non linéaire, Grandes déformations, Méthode multi-échelle, Réduction de modèle, Interfaces imparfaites, XFEM/Level-set, Etalement de cellule.

TITLE

Contributions to numerical methods to treat non-linearities and discontinuities in heterogeneous materials

ABSTRACT

Motivated by the study of biological tissues, this work contributes to developing numerical tools to predict the mechanical response of nonlinear heterogeneous materials in which the energies of interfaces can no longer be ignored. First, a computational homogenization strategy combined with a model reduction technique based on the proper orthogonal decomposition is implemented in the cases of large elastic deformations and highly nonlinear conduction. The interfaces between the different phases of a composite are described by means of a coherent interface model and taken into account numerically by an extended finite element method in tandem with a level-set technique. Finally, experimental results of single cell spreading between two fixed parallel microplates are exploited through finite element modelling. Our two models are optimized to match the simulation closely with the experiment.

KEYWORDS:

Nonlinear homogenization, Large deformations, Multi-scale method, Model reduction, Imperfect interfaces, XFEM/Level-set, Cell spreading.
