



HAL
open science

Contributions à la mécanique numérique pour la modélisation des matériaux hétérogènes

Modesar Shakoor

► **To cite this version:**

Modesar Shakoor. Contributions à la mécanique numérique pour la modélisation des matériaux hétérogènes. Mécanique [physics.med-ph]. Université de Lille; Ecole doctorale SMRE; IMT Nord Europe, 2023. tel-04132414

HAL Id: tel-04132414

<https://hal.science/tel-04132414>

Submitted on 19 Jun 2023

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.



Distributed under a Creative Commons Attribution - NonCommercial - ShareAlike 4.0 International License

Habilitation à Diriger des Recherches

de l'Université de Lille

École doctorale n°104 Sciences de la Matière, du
Rayonnement et de
l'Environnement

Spécialité Mathématiques appliquées
et applications des
mathématiques

Contributions à la mécanique numérique pour la modélisation des matériaux hétérogènes

Soutenue par **Modesar SHAKOOR**
le **14 mars 2023**

Devant un **jury** composé de :

Pierre-Olivier BOUCHARD
Stéphane BORDAS
Luisa SILVA
Julien YVONNET
Marc BERNACKI
Francisco CHINESTA
Chung-Hae PARK

Président
Rapporteur
Rapporteur
Rapporteur
Examineur
Examineur
Garant

Professeur, Mines Paris, Université PSL
Professeur, Université du Luxembourg
Professeur, École centrale de Nantes
Professeur, Université Gustave Eiffel
Professeur, Mines Paris, Université PSL
Professeur, ENSAM
Professeur, IMT Nord Europe



IMT Nord Europe
École Mines-Télécom
IMT-Université de Lille

Préparée au

CERI MP

IMT Nord Europe

Institut Mines-Télécom

I'M TOMORROW

Remerciements

A

Chung-Hae PARK et Patricia KRAWCZAK, j'adresse mes remerciements pour leurs conseils, leur soutien et leur confiance depuis 2018. Je remercie particulièrement Chung-Hae PARK d'avoir assumé son rôle de garant avec sérieux jusqu'au bout. Je dois également beaucoup à mes directeurs de thèse Marc BERNACKI et Pierre-Olivier BOUCHARD, dont le soutien a été sans faille y compris après ma soutenance de doctorat, et qui m'ont fait le plaisir de participer à mon jury d'habilitation. Je n'oublie pas les autres membres du jury, Stéphane BORDAS, Francisco CHINESTA, Luisa SILVA et Julien YVONNET qui m'ont fait l'honneur d'évaluer mon travail. Je remercie en particulier les rapporteurs Stéphane BORDAS, Luisa SILVA et Julien YVONNET pour leur évaluation détaillée et appréciée. Je me dois de souligner l'effort qu'on fait tous les membres du jury pour assister à la soutenance, et ce malgré moult péripéties.

N

orthwestern University was an important step in my career as it opened many doors for me when applying for academic positions. I cannot hence write this page without thanking Wing Kam LIU for this American experience. I am also grateful to all the colleagues I met there: Jiaying GAO, Zeliang LIU, Orion KAFKA, Cheng YU, Zhengtao GAN, Wentao YAN and Jinhui YAN.

D

fficiellement enseignant-chercheur depuis 2018 avec mon arrivée à l'IMT Nord Europe, j'ai pu compter sur des collègues aux personnalités agréables et avec qui les échanges ont été plus que positifs à la fois personnellement et professionnellement, et ce particulièrement pendant la traditionnelle pause-café du matin. J'ai peur de les mentionner nommément ici, au risque d'en oublier certains. Je tiens donc à exprimer ma gratitude à tous les enseignants-chercheurs, ingénieurs, techniciens et assistantes que j'ai pu croiser depuis mon arrivée.

R

assembler tous les éléments nécessaires à cette habilitation m'a fait réaliser l'importance de toutes les expériences d'encadrement que j'ai pu avoir. Cela a commencé avec les stagiaires et les projets de Master, et s'est poursuivi avec des doctorants et des post-doctorants. Les collaborateurs académiques et industriels avec qui j'ai pu travailler ont aussi contribué à mes travaux. Je tiens à leur exprimer à tous ma gratitude, et en particulier à Xiao MA, dont la brillante soutenance de doctorat a permis cette habilitation.

A

u moment où j'écris ces lignes, c'est mes proches et surtout ma famille que j'ai envie de remercier. Traverser la France puis l'Atlantique et travailler sereinement n'aurait pu être possible sans vous. Avec une émotion sincère, je dédie ce rapport à mes parents, mes sœurs, mon neveu et ma nièce, ma femme et ma fille.

Table des matières

Introduction	7
Curriculum Vitæ	11
Activités d'enseignement	13
Activités de recherche	19
Autres activités	25
Production scientifique	26
1 Modélisation des écoulements biphasés par fonction de niveau et éléments finis adaptatifs	37
Introduction	38
1.1 Génération et adaptation de maillage	41
1.1.1 Méthode d'adaptation de maillage	41
1.1.2 Méthode de génération de maillage	46
1.1.3 Applications	47
1.2 Simulation des écoulements biphasés	60
1.2.1 Modèle	60
1.2.2 Méthode numérique	61
1.2.3 Résultats	62
1.3 Génie logiciel et calcul parallèle	75
Conclusion	77
2 Modélisation de la rupture par champ de phase et transformée de Fourier rapide	79
Introduction	80
2.1 Principe de la méthode	83
2.1.1 Méthode	83
2.1.2 Exemple démonstratif	85
2.2 Causes des oscillations parasites et solutions	89
2.2.1 Analyse et solutions générales	90
2.2.2 Solutions pour les interfaces	93
2.3 Approche champ de phase pour la rupture	95
2.3.1 Modèle de Miehe	95
2.3.2 Modèle de Wu	104
Conclusion	110
3 Réduction de modèle basée sur les données	111
Introduction	112
3.1 Analyse partitionnée auto-cohérente	115
3.1.1 Méthode	115
3.1.2 Résultats	119
3.2 Apprentissage profond	125
3.2.1 Compression	125
3.2.2 Prédiction	128
3.2.3 Résultats	130
Conclusion	142

4 Modélisation multi-échelle	143
Introduction	144
4.1 Rupture	146
4.1.1 Méthode	146
4.1.2 Résultats	149
4.2 Écoulements	152
4.2.1 Modèle multi-échelle	152
4.2.2 Méthode numérique	154
4.2.3 Résultats	155
Conclusion	159
Conclusions et perspectives	161
Écoulements	164
Rupture	165
Jumeau numérique	166
Bibliographie	167

Nomenclature

Abbréviation	Description
nD	n Dimension(s)
APA	Analyse Partitionnée Auto-cohérente
AMD	Analyse Mécanique Dynamique
CERI MP	Centre d'Enseignement Recherche et Innovation Matériaux & Procédés
CFL	Courant–Friedrichs–Lewy
DOP	Décomposition Orthogonale aux valeurs Propres
EF	Éléments Finis
FDN	Fonction De Niveau
IMT	Institut Mines-Télécom
IMT Nord Europe	École nationale supérieure Mines-Télécom Lille-Douai
MOC	Modèle d'Ordre Complet
MOR	Modèle d'Ordre Réduit
PMPV	Principe Multi-échelle des Puissances Virtuelles
RMSE	Erreur moyenne en norme L2
RNA	Réseau de Neurones Artificiel
RNC	Réseau de Neurones à Convolution
RSP	Récupération Superconvergente par Patches
TFR	Transformée de Fourier Rapide
VER	Volume Élémentaire Représentatif
VMEBR	Variationnelle Multi-Échelle Basée sur les Résidus

Introduction

Comme détaillé dans mon Curriculum Vitæ, je suis devenu jeune chercheur en 2013 avec le démarrage de ma thèse de doctorat, et enseignant-chercheur en 2018 avec mon recrutement à l'IMT Nord Europe.

Mes activités d'enseignement concernent principalement la mécanique et en particulier le calcul de structures avec la méthode des éléments finis. Ces enseignements peuvent prendre la forme de cours, de TP ou de projets orientés recherche ou ingénierie.

Mes activités de recherche concernent la modélisation des phénomènes mécaniques non linéaires dans les matériaux et domaines hétérogènes. Le point commun à tous mes travaux est le rapport important entre la taille de la structure ou du domaine étudié et la taille caractéristique de l'hétérogénéité. Par exemple, une structure composite de plusieurs mètres comme une pâle d'éolienne contient des fibres d'un diamètre de l'ordre du micromètre.

La vidéo de la Référence [1] illustre assez bien les différentes étapes de la fabrication d'une structure composite. Un renfort composé de plusieurs plis en fibres longues qui peuvent être tissées (Figure 1(a)) est placé dans un moule (Figure 1(b)). Une résine polymère est ensuite injectée dans le moule (Figure 1(c,d)) pour former la structure composite finale (Figure 1(e)). Si on veut optimiser les cadences de production tout en garantissant une bonne qualité, il est essentiel de bien comprendre et contrôler l'imprégnation, c'est-à-dire le remplissage du moule par la résine et ce malgré la résistance à l'écoulement due à la présence du renfort.

Comme montré dans la Figure 2(a), le renfort en fibres longues tissées est composé de mèches dont le diamètre est de l'ordre de $100\ \mu\text{m}$, elles-mêmes composées de fibres dont le diamètre est de l'ordre de $1\ \mu\text{m}$. L'écoulement de la résine se fait donc à la fois entre les mèches et entre les fibres. Comme illustré dans la Figure 2(b-e), le front de propagation de la résine développe une morphologie complexe, ce qui peut mener à la formation de bulles ou porosités à l'intérieur des mèches ou entre les mèches. La taille de ces porosités peut aller de $1\ \mu\text{m}$ à $100\ \mu\text{m}$.

Un exemple d'image acquise par tomographie d'une structure composite est montré dans la Figure 3. On y voit clairement les porosités de différentes tailles à l'intérieur des mèches et entre les mèches, ainsi que des porosités plus étirées qui peuvent se former entre les plis. Toutes ces porosités jouent un rôle significatif en ce qui concerne la tenue en service des structures composites. Elles affectent notamment les propriétés mécaniques comme la résistance à la rupture et à la fatigue [3].

Ces structures composites fournissent une très bonne application pour mes travaux de recherche. Des phénomènes mécaniques non linéaires jouent un rôle clé pendant leur fabrication et leur tenue en service. Ces phénomènes sont fortement influencés par l'hétérogénéité due aux fibres, aux mèches et aux porosités. Dans ce cadre, mes travaux de recherche se sont progressivement élargis :

- Au développement de méthodes numériques avancées permettant de modéliser les inter-

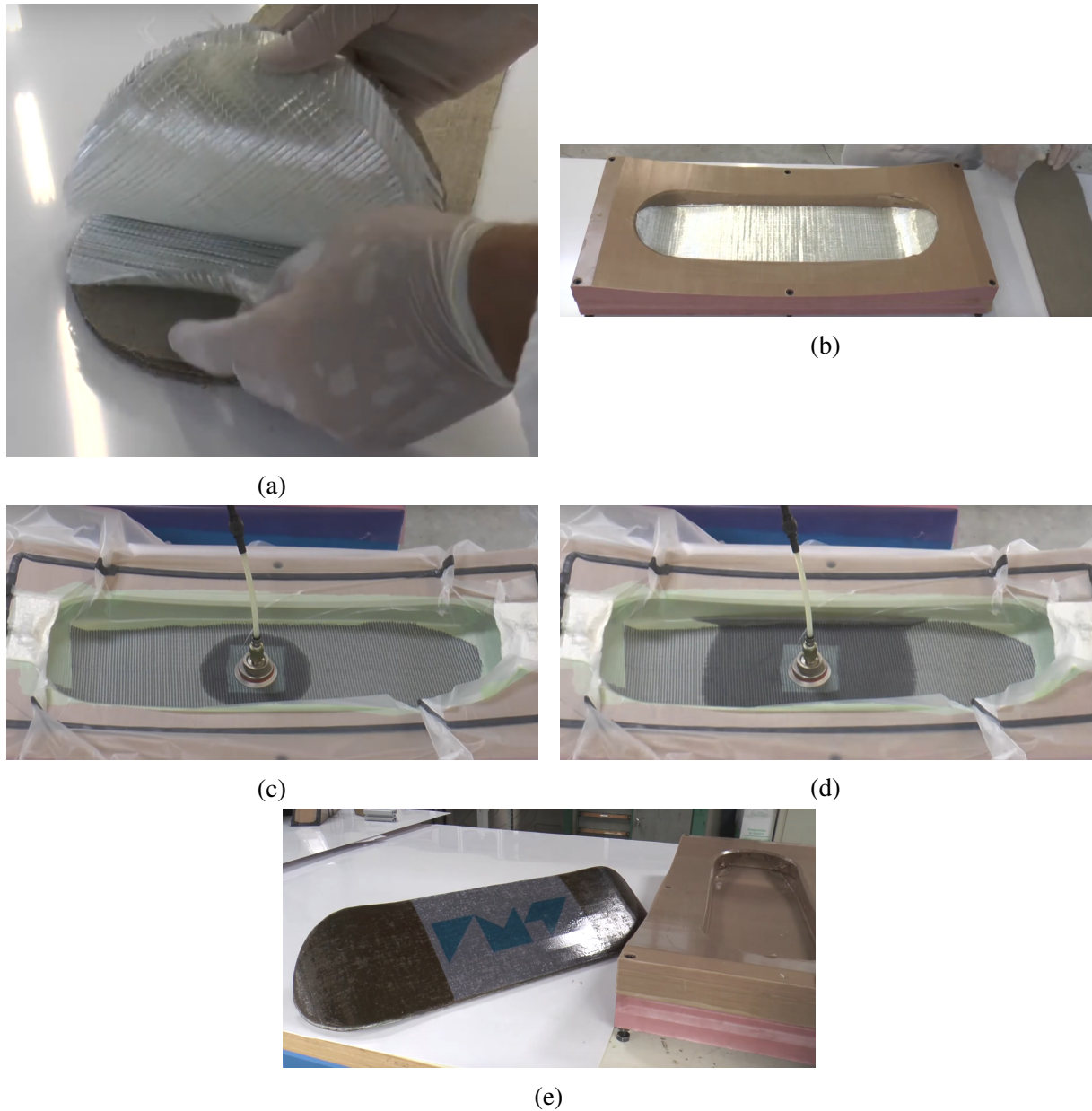


FIGURE 1 – Fabrication d’une planche à roulettes en composite par infusion sous vide : (a) préforme composée de plis en fibres de lin (marron) et de verre (blanc), (b) dépose de la préforme dans le moule, (c,d) infusion de la résine sous vide, (e) structure composite finale. Image(s) issue(s) de la Référence [1].

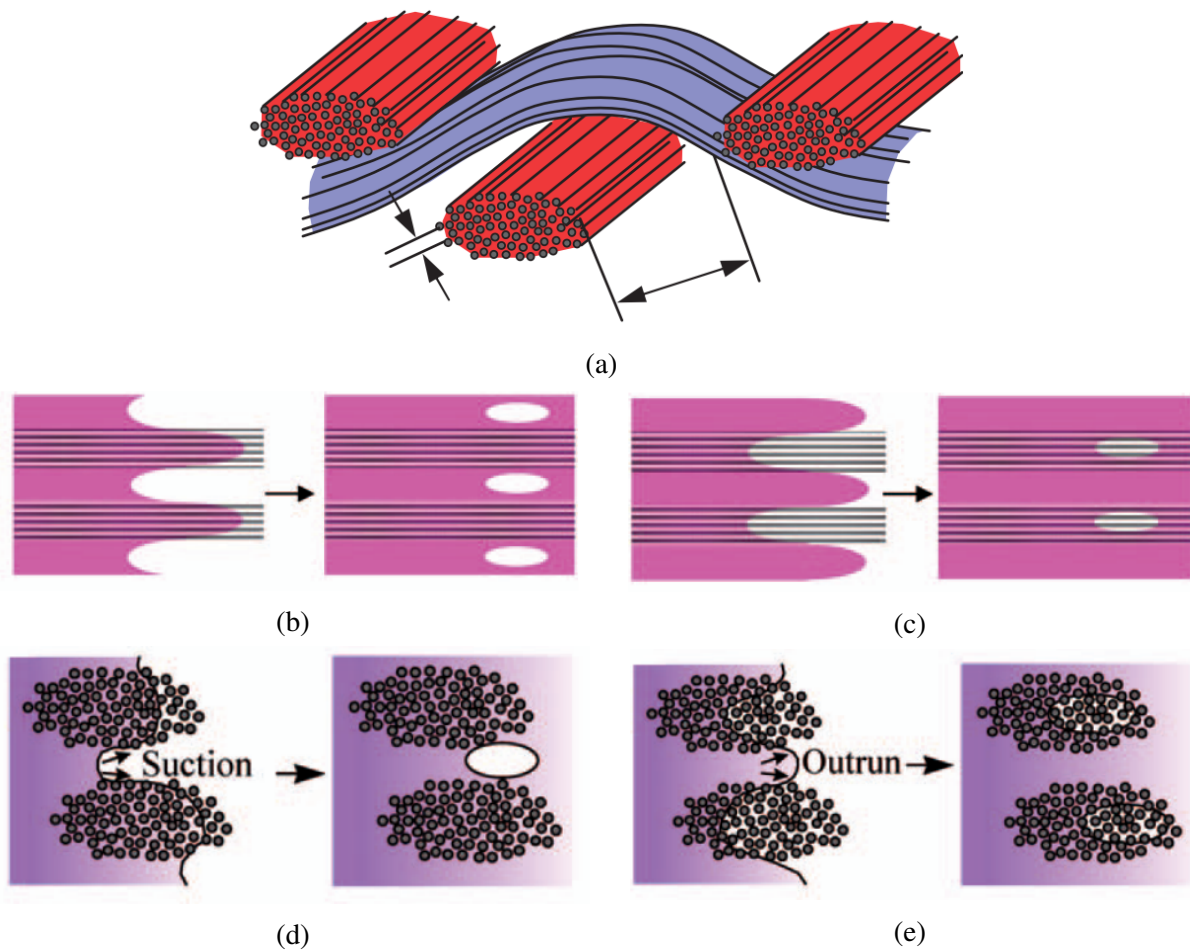


FIGURE 2 – Composite textile (a) et formation de porosités pendant l’avancée de la résine : (a) porosités inter-mèches avec écoulement le long des mèches, (b) porosités intra-mèches avec écoulement le long des mèches, (c) porosités inter-mèches avec écoulement à travers les mèches, (d) porosités intra-mèches avec écoulement à travers les mèches. Image(s) issue(s) de la Référence [2].

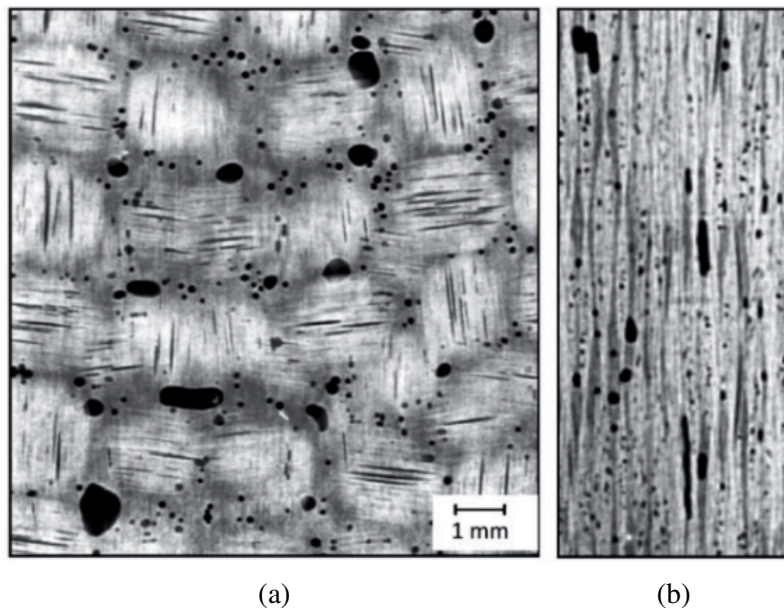


FIGURE 3 – Images acquises par tomographie d’un composite textile : (a) vue le long à la direction d’empilement (a) vue transverse à la direction d’empilement. Image(s) issue(s) de la Référence [4].

faces dues à l’hétérogénéité. Mes premiers travaux dans ce domaine concernent la méthode des éléments finis avec une modélisation des interfaces par génération et adaptation du maillage, et utilisation de fonctions de distance signée. L’objectif pour ces premiers travaux était de modéliser les écoulements biphasés avec des obstacles.

- À la modélisation de la rupture par une approche champ de phase implémentée avec la méthode numérique basée sur la transformée de Fourier rapide.
- À l’accélération de ces calculs de mécanique des fluides ou des matériaux avec des approches basées sur les données et la réduction de modèle. Mes travaux dans ce domaine explorent notamment les méthodes de partitionnement des données et l’apprentissage profond avec les réseaux de neurones à convolution.
- À la modélisation des phénomènes d’écoulement et de rupture pour de grandes structures, et ce avec des approches multi-échelles. Dans ce cadre, la réduction de modèle est particulièrement pertinente puisqu’elle permet d’exploiter la redondance des calculs.

Curriculum Vitæ

Situation et coordonnées

Nom : Shakoor

Prénom : Modesar

Âge : 32 ans

Adresse postale : IMT Nord Europe, 941 rue Charles Bourseul, CS 10838, 59508 Douai Cedex, France

Site personnel : momods.free.fr

IdHAL : [modesar-shakoor](https://idhal.inria.fr/modesar-shakoor)

ORCID : [0000-0001-6802-6176](https://orcid.org/0000-0001-6802-6176)

Google Scholar : [GrBsf6EAAAAJ](https://scholar.google.com/citations?user=GrBsf6EAAAAJ)

LinkedIn : [modesar](https://www.linkedin.com/company/modesar)

ResearcherId : [AAJ-5898-2021](https://pubs.rsos.royalsocietypublishing.org/author/AAJ-5898-2021)

IdRef : [220830118](https://www.idref.fr/220830118)

Expérience professionnelle après doctorat

Centre d'Enseignement de Recherche et d'Innovation Matériaux & Procédés (CERI MP) – IMT Nord Europe

2018–Présent

Maître-Assistant

Douai, France

- Mécanique numérique, éléments finis, méthode numérique basée sur la transformée de Fourier rapide
- Méthode des fonctions de niveau, modélisation par champ de phase
- Maillage de microstructures, génération et adaptation de maillage
- Méthodes multiéchelles, réduction de modèle, intelligence artificielle pour la mécanique
- Écoulements pendant la mise en œuvre des composites
- Endommagement et rupture des composites

Le CERI MP a été créé début 2019 suite à la fusion des départements Technologie des Polymères et Composites & Ingénierie Mécanique (TPCIM) et Génie Civil et Environnement (GCE). L'IMT Nord Europe a été créée à la rentrée 2021 suite au changement d'appellation de l'IMT Lille Douai, elle-même née de la fusion de Mines Douai et Télécom Lille début 2017.

Department of Mechanical Engineering – Northwestern University

2016–2018

Chercheur Post-doctoral

*Evanston, Illinois,
États-Unis*

- Modélisation de la déformation et rupture multi-échelle de matériaux complexes et/ou architecturés dont des alliages métalliques issus de la fabrication additive, des polymères composites unidirectionnels ou tissés à renforts de fibres, et des caoutchoucs chargés
- Modélisation et prédiction de relations procédé-(micro)structure-propriétés mécaniques
- Direction par Pr. Wing Kam Liu

Formation après baccalauréat

Centre de Mise en Forme des matériaux (CEMEF) – Mines ParisTech

2013–2016

Doctorat en Mécanique Numérique & Science des Matériaux

Sophia-Antipolis, France

- Thèse sur la modélisation numérique tridimensionnelle des mécanismes de la rupture ductile à l'échelle microscopique
- Financement par l'Institut CARNOT M.I.N.E.S et l'Agence Nationale de la Recherche
- Jury de soutenance composé de Pr. Nicolas Moës (Président), Pr. R.H.J. Peerlings et Pr. Jean-François Remacle (Rapporteurs), et Pr. François Hild et Dr. HDR Thilo Morgeneyer (Examineurs)
- Direction par Pr. Pierre-Olivier Bouchard et Pr. Marc Bernacki

École Internationale des Sciences du Traitement de l'Information (EISTI)

2008–2013

Diplôme d'Ingénieur Mathématiques et Informatique

Cergy, France

- Spécialisation en simulation numérique hautes performances
- Projet de fin d'études sur la simulation du trafic routier avec des méthodes de Galerkin discontinues d'ordre élevé et de discrétisations Runge-Kutta sur GPU
- Stage de M2 sur la modélisation des écoulements biphasés en milieux poreux à l'Institut Français du Pétrole et des Énergies nouvelles (IFPEN), Rueil-Malmaison, France
- Stage de M1 sur le calcul d'inter-visibilité entre radars et objets volants, et la visualisation et le calcul de trajectoires d'objets volants en trois dimensions à MBDA Missile Systems, Le Plessis-Robinson, France
- Direction en option par Dr. Fikri Hafid

L'EISTI a fusionné avec l'Université de Cergy-Pontoise début 2019 pour former CY Cergy Paris Université, qui comporte l'école CY Tech.

Université de Cergy-Pontoise

2008–2013

Cursus Licence-Master Sciences, Technologies, Santé

Cergy-Pontoise, France

- Master Mathématiques, Physique et Applications, Spécialité mathématiques, Mention bien
- Licence Mathématiques, Mention très bien
- Licence Informatique, Mention très bien

L'EISTI a fusionné avec l'Université de Cergy-Pontoise début 2019 pour former CY Cergy Paris Université, qui comporte l'école CY Tech.

Activités d'enseignement

L'essentiel de mes activités d'enseignement se sont déroulées dans le cadre de mon poste actuel à l'IMT Nord Europe. En avant-propos de cette partie, il convient d'expliquer le fonctionnement des cursus de l'école.

L'école suit le cadre Licence-Master-Doctorat, mais étant donné qu'il s'agit d'une école d'ingénieur généraliste, la logique est découpée en trois morceaux : L1-L2, L3, et M1-M2.

Il est possible d'intégrer l'IMT Nord Europe en L1 juste après le baccalauréat ou en L3 par le Concours Mines-Télécom après deux années de classes préparatoires aux grandes écoles. Ainsi, en L3, la moitié des étudiants provient du cycle L1-L2 intégré à l'école, et l'autre moitié est admise à travers le Concours Mines-Télécom. Il y a en plus des admissions parallèles mais qui restent marginales.

La quasi-totalité des enseignements de L1, L2 et L3 relèvent du tronc commun. Il y a quelques modules électifs qui permettent aux étudiants de découvrir les domaines de formation de l'école. Ceux-ci correspondent aux différents centres de recherche de l'école. C'est en M1-M2 que les étudiants peuvent vraiment plonger dans les domaines de formation. Ils doivent choisir une unité d'enseignement pour chaque période de quatre semaines de l'année scolaire. Cela fait six unités à suivre en M1 et cinq en M2. Une de ces unités doit nécessairement être dédiée à un projet de recherche ou d'ingénierie en groupe.

Par ailleurs, les étudiants doivent effectuer un stage de découverte de l'entreprise en L3, un stage d'ingénieur-adjoint en M1 et un stage d'ingénieur en M2.

Dans ce cadre, mes activités d'enseignement ont consisté principalement en :

- Responsabilité d'unités d'enseignement : 2 par an
- Jury de stage : 22 en Licence 3, 12 en Master 1 et 17 en Master 2 au total
- Enseignement au niveau Master 2 / Doctorat : 6h Cours et 6h TP par an
- Enseignement au niveau Master 2 : 18h Cours et 34h TP par an
- Enseignement au niveau Master 1 : 10h Cours, 30h TP et 12h Projet par an
- Enseignement au niveau Licence 2 : 5h Projet par an

En complément de ces activités d'enseignement classiques, j'ai pu participer à d'autres activités liées à l'enseignement. J'ai ainsi été membre d'un groupe de travail dédié à la refonte du domaine de formation de mon centre de recherche en 2021, et j'ai également participé à des activités collectives comme l'accueil des étudiants et parents pour la rentrée L1 en 2021.

Responsabilité

À l'IMT Nord Europe, le responsable d'unité d'enseignement est en charge d'à peu près tout. Il définit les objectifs pédagogiques, les compétences à développer et le contenu. Il choisit et interagit avec les intervenants internes et externes pour établir l'emploi du temps et garantir la bonne tenue des enseignements. Il s'assure que les évaluations se déroulent dans les bonnes conditions et collecte les notes finales.

Modélisation des matériaux pour l'industrie et le génie civil

Unité d'enseignement de Master 2

2021–Présent

IMT Nord Europe

- Cette unité orientée recherche concentre tous les enseignements en modélisation du comportement non linéaire des matériaux (hyper-élasticité, plasticité, endommagement, etc.).

- L'objectif est de faire découvrir ces différentes lois de comportement et les matériaux et situations auxquelles elles s'appliquent. Des essais expérimentaux mettant en évidence chaque comportement sont réalisés devant les étudiants. L'implémentation numérique des lois et leur utilisation dans des logiciels commerciaux sont abordées.
- Presque la moitié du volume horaire est consacré à un projet électif encadré par différents intervenants que j'organise en tant que responsable de l'unité.
- J'enseigne le cours de plasticité.

Conception numérique avancée
Unité d'enseignement de Master 2

2020–2021
IMT Nord Europe

- Cette unité était orientée ingénierie et dédiée à la conception numérique avec un logiciel de calcul éléments finis.
- Elle intégrait notamment des enseignements sur les structures fines (plaques et coques) et la modélisation de phénomènes non linéaires comme les grandes déformations et le contact avec un logiciel éléments finis commercial.
- J'y enseignais le cours sur les éléments finis non linéaires.
- Cette unité a été fusionnée avec une autre en 2021.

Sensibilisation aux matériaux
Unité d'enseignement de Licence 2

2020–Présent
IMT Nord Europe

- Cette unité est élective et permet aux étudiants de L2 de découvrir le domaine de formation de mon centre de recherche.
- L'objectif est de leur donner une idée des différentes catégories de matériaux et de leurs caractéristiques, et de faire le lien avec la conception de structures. Des thématiques attractives et récemment popularisées comme les matériaux bio-sourcés ou le recyclage et la valorisation sont également abordées.
- J'encadre un projet d'introduction à la conception.

Jury

Jury de 17 stages de Master 2

2018–Présent

Abdeladime B (2018), Peng Q (2019), Vincent S-L (2019), Arnaud F (2019), Badr G (2019), Léon S (2020), Souhail A (2020), Khalil J (2020), Younes B (2020), Ayoub K (2020), Julien D (2020), Thierry P (2020), Nice T (2021), Agathe K (2021), Coralien P (2021), Dorian M (2022), Mathis P (2022)

IMT Nord Europe

Jury de 12 stages de Master 1

2018–Présent

Mathieu C (2018), Badr G (2018), Kevin L (2018), Peng Q (2018), Youssef I B (2018), Emma F (2019), Souhail A (2019), Thierry P (2019), Laurent S (2019), Thomas B (2021), Ronan D (2022), Fares S (2022)

IMT Nord Europe

Jury de 22 stages de Licence 3*2018–Présent*

Clément M (2019), Romain S (2019), Reda A (2019), Daryl L (2019), Hamidou D (2019), Auguste B (2020), Nadège F (2020), Leila F (2020), Mathis J (2020), Ellen O (2021), Eloi G (2021), Lucie D (2021), Hélène B (2021), Guerric C (2021), Bertan O (2022), Didier T (2022), Clément B (2022), Ninon P-S (2022), Sacha R (2022), Maxence B (2022), Angélique M (2022), Nolwenn R (2022)

*IMT Nord Europe***Jury aux oraux du Concours Mines-Télécom***2019,2021***Épreuve d'entretien***IMT Nord Europe***Enseignement de Master 2 / Doctorat**

Les enseignements dans cette partie visaient/visent des étudiants de Master 2 ou Mastère Spécialisé et étaient/sont également ouverts à des doctorants.

Introduction à la méthode Level-Set*2018–2019 et 2020–2021***Volume annuel : 3h Cours et 3h TP***Mines ParisTech*

- L'objectif de cet enseignement est d'aborder une méthode numérique avancée, en l'occurrence la méthode des fonctions de niveau (Level-Set en anglais), et ce de la théorie à la mise en œuvre dans un code de calcul.
- Le cours introduit la méthode, décrit les principes fondamentaux et les algorithmes qu'elle implique et mentionne quelques applications. Cela démarre par une classe inversée où les étudiants doivent chacun se plonger dans un article scientifique différent.
- Le TP consiste à implémenter numériquement la méthode dans un code Python et à conduire quelques expériences numériques.
- Il est délivré en anglais.

Introduction aux méthodes basées sur la transformée de Fourier rapide*2020–2021***Volume annuel : 3h Cours et 3h TP***Mines ParisTech*

- L'objectif de cet enseignement est d'aborder une méthode numérique avancée, en l'occurrence la méthode numérique basée sur la transformée de Fourier rapide, et ce de la théorie à la mise en œuvre dans un code de calcul.
- Le cours introduit la méthode, décrit les principes fondamentaux et les algorithmes qu'elle implique et mentionne quelques applications. Cela démarre par une classe inversée où les étudiants doivent chacun se plonger dans un article scientifique différent.
- Le TP consiste à implémenter numériquement la méthode dans un code Python et à conduire quelques expériences numériques.
- Il est délivré en anglais.

Associations originales des éléments finis avec la science des matériaux et la science des données

2017–2018

8h Cours

Northwestern University

- L'objectif de cet enseignement était de faire découvrir des applications de la science des données à la mécanique pour des étudiants plutôt orientés calcul de structures. L'association de certaines méthodes comme l'analyse en composantes principales ou les réseaux de neurones avec les éléments finis était au centre de ce cours.
- Le cours était complété par un projet où les étudiants devaient mettre en œuvre une méthode d'apprentissage pour modéliser des données que j'avais générées avec un code de calcul éléments finis.

Introduction au formalisme arbitraire Lagrangien Eulérien

2016–2017

1h20 Cours

Northwestern University

- Ce cours introductif avait pour objectif de présenter le formalisme arbitraire Lagrangien Eulérien, ses applications, et les algorithmes qu'il implique.

Mécanique de l'endommagement

2014–2015

6h Cours

Mines ParisTech

- Ce cours avait pour objectif de présenter l'endommagement ductile, sa modélisation et les problématiques qu'il implique, notamment pour des applications à la mise en forme des métaux.
- Plusieurs modèles d'endommagement étaient présentés. Le cours allait jusqu'à la problématique de la dépendance au maillage et sa résolution avec une régularisation non locale.

Méthodes de génération de maillage

2014–2015

3h Cours et 6h TP

Mines ParisTech

- L'objectif de cet enseignement était d'aborder la notion de génération de maillages éléments finis, avec les problématiques de respect de la géométrie et de critères de taille et de qualité.
- Le cours présentait les méthodes brièvement, à l'exception de la triangulation de Delaunay qui était présentée plus en détail. Le TP se concentrait sur cette dernière, et consistait à l'implémenter dans un code Python, Matlab ou Scilab et à conduire quelques expériences numériques.

Programmation C/C++

2014–2015

4h Cours et 5h TP

Mines ParisTech

- Cet enseignement visait à préparer des étudiants à la programmation C/C++ dans l'objectif de leur permettre d'ajouter des fonctionnalités à un code de calcul éléments finis.
- Le cours se restreignait aux paradigmes C++ utilisés dans le code de calcul éléments finis du laboratoire. Le TP consistait à développer différentes fonctionnalités au sein de ce code.

Enseignement de Master 2

Plasticité

2019–Présent

Volume annuel : 8h Cours et 8h TP

IMT Nord Europe

- L'objectif de cet enseignement est de présenter la plasticité du point de vue matériau, expérimental et modélisation. La plasticité étant un phénomène survenant en général pour de grandes déformations, la problématique de l'objectivité est également traitée, ainsi que les lois d'hypoélasto-plasticité.
- Le cours décrit complètement le critère de plasticité de von Mises ainsi que l'érouissage isotrope et cinématique. L'implémentation numérique de cette loi matériau dans un code Python est abordée en TP, ainsi que l'identification des types d'érouissage et des principales propriétés matériaux à partir de courbes expérimentales. Le TP finit par l'utilisation d'un modèle de plasticité dans un logiciel éléments finis commercial.

Éléments finis non linéaires

2018–Présent

Volume annuel : 10h Cours et 26h TP

IMT Nord Europe

- L'objectif de cet enseignement est d'aller au delà de la méthode des éléments finis linéaires et d'aborder deux notions essentielles pour l'ingénieur calcul : la modélisation du contact et des phénomènes dynamiques.
- La partie cours sur le contact concerne les détails mathématiques en petite ou en grande déformation et en Lagrangien réactualisé ou total. Pour la dynamique, les schémas implicites et explicites sont tous deux abordés.
- Les TPs reposent essentiellement sur un logiciel commercial de calcul de structures avec la méthode des éléments finis, bien que l'implémentation dans un code Python d'un algorithme de contact soit également abordée.
- Ce cours intègre un questionnaire à choix multiple où certaines réponses sont à trouver dans la documentation du logiciel commercial, et d'autres sont à déterminer par des calculs éléments finis.

Programmation C/C++

2012–2013

5h Cours et 10h TP

EISTI

- Cet enseignement visait à introduire des bases de programmation C/C++ à des étudiants orientés vers l'ingénierie financière.

Enseignement de Master 1

Conception mécanique sur ordinateur

2018–Présent

Volume annuel : 10h TP et 12h Projet

IMT Nord Europe

- Cet enseignement est le volet pratique de l'enseignement sur les éléments finis linéaires. Il s'agit de former les étudiants à résoudre des problèmes d'ingénierie et à concevoir des structures avec un logiciel éléments finis commercial.
- Après une formation à l'utilisation du logiciel, les étudiants sont lancés sur un projet de conception. Une grille de critères d'évaluation leur est fournie dès le départ pour les guider.

Éléments finis linéaires*2018–Présent***Volume annuel : 10h Cours et 20h TP***IMT Nord Europe*

- L'objectif de cet enseignement est d'aborder la méthode des éléments finis linéaires pour le calcul de structures tant du point de vue théorique qu'en ce qui concerne la mise en œuvre.
- Le cours se veut volontairement très mathématique plutôt que mécanique, car il s'agit d'un point fort des étudiants dû au recrutement par la voie des classes préparatoires.
- Un code de calcul de structures 2D est développé en Python afin que les étudiants aient une idée de ce qui se cache derrière les logiciels commerciaux.
- Les TP s'appuient sur une plateforme en ligne d'auto-évaluation permettant aux étudiants de tester leurs codes et me permettant à moi de suivre leur avancement.

Enseignement de Licence 2**Sensibilisation aux matériaux***2019–Présent***Volume annuel : 5h Projet***IMT Nord Europe*

- Mon intervention dans cet enseignement concerne un projet d'introduction à la conception de structures.
- Un calepin Jupyter interactif est proposé aux étudiants afin de découvrir des éléments de mécanique des milieux continus et les propriétés matériau.
- L'objectif du projet est de dimensionner une poutre, d'abord par une approche analytique, puis par une approche éléments finis. Cela amène les étudiants à développer une petite partie du code de calcul.

Activités de recherche

Mes activités de recherche ont consisté principalement en :

- Implication dans des projets de recherche collaboratifs : 5 dont 1 en tant que coordinateur
- Encadrement de post-doctorant : 3 dont 2 en cours
- Encadrement de doctorant : 5 dont 4 en cours
- Encadrement de stage de recherche de Mastère Spécialisé : 1
- Encadrement de stage de recherche de Master 2 : 7
- Encadrement de projet de recherche de Master 2 : 4
- Encadrement de projet de recherche de Master 1 : 2
- Encadrement de projet d'ingénierie de Master 1 : 6
- Encadrement de projet de recherche de Bachelor : 1
- Jury de thèse de Doctorat : 2
- Comité de suivi de thèse de Doctorat : 2
- Évaluation de propositions de projets pour des agences de financement : 3
- Évaluation d'articles pour des revues internationales à comité de lecture : 22
- Co-organisation de sessions à des conférences internationales : 1

Implication dans des projets de recherche collaboratifs

Modélisation et apprentissage des interfaces dans les écoulements à deux phases (MISSA)

2023–2026

Projet Jeune Chercheur ou Jeune Chercheuse (JCJC) de l'Agence Nationale de la Recherche (ANR)

Coordinateur

Conception orientée cycle de vie & approche systémique pour l'efficacité énergétique du stockage de systèmes de chauffage (CORENSTOCK)

2021–2024

Projet Chaire Industrielle (CHIND) de l'Agence Nationale de la Recherche (ANR)

Contributeur

- Coordinatrice : Mylène LAGARDÈRE (IMT Nord Europe)

Jumeau numérique d'un appareil à pression : évaluation de la tenue mécanique et maintenance prédictive (JUNAP)

2021–2023

Projet Industrie du Futur de la Région Hauts-de-France

Contributeur

- Coordinateur : Mohammed BENNEBACH (CETIM)
- Coordinateur local : Salim CHAKI (IMT Nord Europe)

Reduced order modeling for advanced nonlinear multi-scale numerical methods of composites (OCTET)

2019–2020

Bourse de mobilité courte transfrontalière de l'I-SITE Université Lille Nord-Europe (I-SITE ULNE)

Contributeur

- Coordinateur : Dmytro VASIUKOV (IMT Nord Europe)

Renforcement de préformes pour applications composites épaisses de forme complexe (COMP3DRE)

2018–2020

Projet Recherche Collaborative Entreprise (PRCE) de l'Agence Nationale de la Recherche (ANR)*Contributeur*

- Coordinateur : Damien SOULAT (ENSAIT)
- Coordinateur local : Chung-Hae PARK (IMT Nord Europe)

Activités d'encadrement**Post-doctorat****Conception et dimensionnement d'un élément de stockage d'eau chaude intelligent**

2022–2023

Ahmed AMMAR*IMT Nord Europe*

- Directeur : Salim CHAKI
- Encadrants : **Modesar SHAKOOR**, Dmytro VASIUKOV
- Projet CORENSTOCK

Développement d'un jumeau numérique d'un appareil à pression : hybridation de modèles physique et machine learning

2022–2023

Fatma ABID*IMT Nord Europe*

- Directeur : Salim CHAKI
- Encadrants : **Modesar SHAKOOR**, Dmytro VASIUKOV
- Projet JUNAP

Apprentissage profond pour le comportement mécanique non linéaire

2021–2022

Krushna SHINDE*IMT Nord Europe*

- Directeur : **Modesar SHAKOOR**
- Encadrants : Vincent ITIER, José MENNESSON, Dmytro VASIUKOV

Doctorat**Modélisation éléments finis multi-échelle des écoulements bi-phasés**

2023–2025

Sarabilou KPEREGUENI*IMT Nord Europe*

- Directeur : Chung-Hae PARK
- Encadrant : **Modesar SHAKOOR**
- Projet MISSA

Modélisation de l'endommagement en fatigue d'un équipement sous pression métallique de stockage d'hydrogène par méthode numérique de champ de phase

2022–2025

Shaymaa MERHEB*IMT Nord Europe*

- Directeur : Salim CHAKI

- Co-directeur : Samir ASSAF
- Encadrants : **Modesar SHAKOOR**, Dmytro VASIUKOV
- Thèse financée partiellement par la Région Hauts-de-France et le CETIM

Modélisation du comportement mécanique d'un équipement en service sous endommagements progressifs : vers un jumeau numérique d'appareil à pression

2022–2025

Izat KHALED

IMT Nord Europe

- Directeur : Salim CHAKI
- Encadrants : Mohamed BENNEBACH, **Modesar SHAKOOR**, Dmytro VASIUKOV
- Thèse financée partiellement par l'ANRT (CIFRE) et le CETIM

Optimisation de la fabrication des réservoirs de stockage d'H2 en composite et étude de leur comportement et de leur endommagement sous hautes pressions

2022–2025

Hervé DEMOUVEAU

IMT Nord Europe

- Directeur : Salim CHAKI
- Co-directeur : Chung-Hae PARK
- Encadrants : **Modesar SHAKOOR**, Dmytro VASIUKOV

Modélisation de l'élasticité et de l'endommagement des matériaux hétérogènes basée sur la transformée de Fourier rapide

2019–2022

Xiao MA

IMT Nord Europe

- Directeur : Chung-Hae PARK
- Co-directeur : Stepan LOMOV
- Encadrants : **Modesar SHAKOOR**, Dmytro VASIUKOV

Stage de recherche de Mastère Spécialisé

Génération et homogénéisation de VERs pour un polymère composite à renforcements discontinus

2016

Ivan COPPO

Mines ParisTech

Stage de recherche de Master 2

Amélioration d'un algorithme d'optimisation du placement de capteurs

2022

Daniel D

IMT Nord Europe

Placement intelligent de capteurs pour suivre l'état de santé d'un équipement sous pression

2021

Koceila K

IMT Nord Europe

- Financement obtenu auprès du CETIM dans le cadre d'un projet coordonné par Salim CHAKI (IMT Nord Europe)

Génération de microstructures virtuelles pour des composites à fibres naturelles 2021
 Amira D *IMT Nord Europe*

- Demi-financement obtenu auprès de la Fédération Mécanique de Lille (FML)
- Collaboration avec Toufik KANIT (Université de Lille)

Résolution parallèle du transfert radiatif 2021
 Venkata Mukund KASHYAP YEDUNUTHALA *IMT Nord Europe*

- Financement obtenu auprès du Partnership for Advanced Computing in Europe (PRACE) dans le cadre du programme Summer of HPC (SoHPC)
- Collaboration avec Daniel PINO MUÑOZ (Mines ParisTech)

Méthodes de réduction de modèle pour prédire l'endommagement de matériaux 2020
 Konan A *IMT Nord Europe*

Parallélisation d'un algorithme de génération et d'adaptation de maillage éléments finis sur GPU 2019
 Lambert D *IMT Nord Europe*

Modélisation numérique de tôles organiques basée sur une géométrie réaliste sans interpénétration 2019
 Shahul Hameed N H *IMT Nord Europe*

Projet de recherche de Master 2

Génération de microstructures virtuelles par réseaux adverses génératifs 2021–2022
 Zakaria B *Université de Lille*

La mécanique en images 2021–2022
 Younes B, Maxence H & Couganadane V *IMT Nord Europe*

Modélisation numérique multi-échelle de la rupture ductile de microstructures réelles de superalliages 2017–2018
 Stuti K *Northwestern University*

Modélisation numérique multi-échelle de polymères composites et de l'assemblage de tôles métalliques par rivetage auto-poinçonneur 2017–2018
 Andrew F *Northwestern University*

Projet de recherche de Master 1

Génération de microstructures virtuelles par autoencodeurs variationnels 2021–2022
 Lloyd M *Université de Lille*

Écoulements turbulents
Emma F & Nice T

2018–2019
IMT Nord Europe

Projet d'ingénierie de Master 1

Conception d'une petite éolienne
Laïla M & Meriem M

2021–2022
IMT Nord Europe

Conception d'un prototype de véhicule pour le Shell marathon
Benjamin F, Baptiste J, Maïlliss M, Quentin P & Nicolas L R

2021–2022
IMT Nord Europe

Conception d'un prototype de véhicule pour le Shell marathon
Kaoutar E M

2021–2022
IMT Nord Europe

Conception et fabrication d'une voiture de course dans le cadre du projet course en cours
Chaimae B & Augustin M

2020–2021
IMT Nord Europe

Conception d'un prototype de véhicule pour le Shell marathon
Noamane C, Brahim E M & Hafsa C

2019–2020
IMT Nord Europe

Conception d'un prototype de véhicule pour le Shell marathon
Auxence C, Colin F & Robin J

2019–2020
IMT Nord Europe

Projet de recherche de Bachelor

Synthèse des travaux expérimentaux et de modélisation multi-échelle d'un polymère composite à fibres longues dans le cadre d'un projet avec Ford Motor Company
Gino D

2017–2018
Northwestern University

Autres activités

Jury de thèse de Doctorat

Modélisation de l'élasticité et de l'endommagement des matériaux hétérogènes basée sur la transformée de Fourier rapide
Xiao MA

2022
IMT Nord Europe

- Soutenue le 25 janvier 2022
- Directeur : Chung-Hae PARK
- Co-directeur : Stepan LOMOV
- Encadrants : **Modesar SHAKOOR**, Dmytro VASIUKOV
- Rapporteurs : Lionel GELEBART, Thierry MASSART
- Examineurs : Emmanuelle ABISSET-CHAVANNE, Emmanuelle VIDAL-SALLE

Avancées concernant la modélisation de problèmes massivement multi-domaines avec applications aux évolutions de microstructures

2020

Sebastian FLOREZ

Mines ParisTech

- Soutenue le 30 novembre 2020
- Directeur : Marc BERNACKI
- Rapporteurs : Julien BRUCHON, Jean-François REMACLE
- Examineurs : Luis BARRALES-MORA, Hugues DIGONNET, **Modesar SHAKOOR**, Joëlle DEMURGER
- Invités : Pascal DE MICHELI, Thomas TOULORGE

Comité de suivi de thèse de Doctorat

Simulation multi-échelle des phénomènes de consolidation/déconsolidation dans les composites thermoplastiques

2020,2021

Lorys LE GOHEBEL

Centrale Nantes

- Directrice : Luisa SILVA
- Co-directeur : Steven LE CORRE
- Encadrant : Hugues DIGONNET
- Examineurs : Christophe BINETRUY, **Modesar SHAKOOR**

Évaluation de propositions de projets pour des agences de financement

- 1 proposition évaluée pour l'Agence Nationale de la Recherche (ANR) en 2020
- 2 propositions évaluées pour la Research Grants Council (RGC) de Hong Kong en 2018

Implication dans des revues internationales à comité de lecture

- Éditeur de Sujet pour *Materials*, MDPI depuis 2020
- Évaluateur de 1 article pour *Computational Materials Science*, Elsevier B.V. depuis 2022
- Évaluateur de 18 articles pour *Computational Mechanics*, Springer Berlin Heidelberg depuis 2016
- Évaluateur de 1 article pour *Mathematics*, MDPI depuis 2021
- Évaluateur de 1 article pour *Metals*, MDPI depuis 2022
- Évaluateur de 1 article pour *Frontiers in Materials*, Frontiers depuis 2022

Implication dans des conférences internationales

- Co-organisateur et Animateur en 2022 de la session «Multiphase flows with surface tension and capillarity» lors du *European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering*
- Animateur en 2018 de la session «Multiscale Computational Homogenization for Bridging Scales in the Mechanics and Physics of Complex Materials» lors du *World Congress on Computational Mechanics*

Autres activités

Suite à la création du CERI MP début 2019, un nouveau fonctionnement a progressivement été mis en place. Ainsi, à partir de la rentrée 2020, un comité de pilotage élargi composé de membres nommés et de membres élus a été instauré, avec des réunions bi-mensuelles. J'ai été le représentant élu des Maîtres-Assistants à ce comité de pilotage élargi pendant l'année scolaire 2021–2022.

Je représente également l'IMT Nord Europe au Club d'Intérêt "Internet des objets pour la maintenance" du pôle de compétitivité i-Trans qui se réunit au moins deux fois par an depuis 2020, et au comité de la Thématique Phare "Procédés avancés" de l'IMT depuis 2022.

Je m'étais déjà investi dans les activités collectives pendant ma thèse de doctorat, puisque j'avais animé en 2015 les réunions hebdomadaires des développeurs du code de calcul éléments finis de mon centre de recherche.

Production scientifique

J'ai été récompensé par 4 prix et distinctions scientifiques. L'ensemble de mes travaux de recherche a mené à 20 publications dans des revues internationales à comité de lecture, 3 numéros spéciaux dans des revues internationales à comité de lecture et 7 publications dans des actes de conférences internationales. J'ai été cité 356 fois d'après Web of Science (indice h : 12) et 627 fois d'après Google Scholar (indice h : 14). J'ai été invité pour 4 communications orales. Il y a aussi eu 37 communications orales à des conférences internationales, 21 communications orales à des conférences nationales et 3 communications par affiche à des conférences internationales.

Prix et distinctions scientifiques

- **Lauréat** en 2019 d'une subvention pour participation de jeunes chercheurs à des congrès internationaux de l'Association Française de Mécanique (AFM) et du Comité National Français de Mécanique (CNFM)
- **Finaliste** en 2017 des PhD Olympiads de la European Community on Computational Methods in Applied Sciences (ECCOMAS)
- **Finaliste** en 2016 du Prix de Thèse de la European Community on Computational Methods in Applied Sciences (ECCOMAS)
- **Lauréat** en 2016 du Prix de Thèse de la Computational Structural Mechanics Associations (CSMA)

Publications dans des revues internationales à comité de lecture

Préparées après la thèse de doctorat (*auteur correspondant) : 13

- E SYERKO*, T. SCHMIDT, D. MAY, C. BINETRUY, S. G. ADVANI, S. LOMOV, L. SILVA, S. ABAIMOV, N. AISSA, I. AKHATOV, M. ALI, N. ASIABAN, G. BROGGI, J. BRUCHON, B. CAGLAR, H. DIGONNET, J. DITTMANN, S. DRAPIER, A. ENDRUWEIT, A. GUILLOUX, R. KANDINSKII, A. LEYGUE, B. MAHATO, P. MARTINEZ, M. MATVEEV, V. MICHAUD, P. MIDDENDORF, N. MOULIN, L. ORGÉAS, C. H. PARK, S. RIEF, M. ROUHI, I. SERGEICHEV, **M. SHAKOOR**, O. SHISHKINA, Y. SWOLFS, M. TAHANI, R. UMER, K. VANCLOOSTER et R. VOROBYEV. « Benchmark Exercise on Image-Based Permeability Determination of Engineering Textiles : Microscale Predictions ». In : *Composites Part A : Applied Science and Manufacturing* 167 (2023), page 107397. DOI : [10.1016/j.compositesa.2022.107397](https://doi.org/10.1016/j.compositesa.2022.107397)
- X. MA, Y. CHEN, **M. SHAKOOR***, D. VASIUKOV, S. V. LOMOV et C. H. PARK. « Simplified and complete phase-field fracture formulations for heterogeneous materials and their solution using a Fast Fourier Transform based numerical method ». In : *Engineering Fracture Mechanics* 279 (2023), page 109049. DOI : [10.1016/j.engfracmech.2023.109049](https://doi.org/10.1016/j.engfracmech.2023.109049)
- **M. SHAKOOR*** et C. H. PARK. « Computational homogenization of unsteady flows with obstacles ». In : *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 95.4 (2023), pages 499-527. DOI : [10.1002/flid.5158](https://doi.org/10.1002/flid.5158)
- K. SHINDE, V. ITIER, J. MENNESSON, D. VASIUKOV et **M. SHAKOOR***. « Dimensionality reduction through convolutional autoencoders for fracture patterns prediction ». In : *Applied Mathematical Modelling* 114 (2023), pages 94-113. DOI : [10.1016/j.apm.2022.09.034](https://doi.org/10.1016/j.apm.2022.09.034)

- **M. SHAKOOR*** et C. H. PARK. « A higher-order finite element method with unstructured anisotropic mesh adaption for two phase flows with surface tension ». In : *Computers & Fluids* 230 (2021), page 105154. doi : [10.1016/j.compfluid.2021.105154](https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2021.105154)
- X. MA, **M. SHAKOOR***, D. VASIUKOV, S. V. LOMOV et C. H. PARK. « Numerical artifacts of Fast Fourier Transform solvers for elastic problems of multi-phase materials : their causes and reduction methods ». In : *Computational Mechanics* 67 (2021), pages 1667-1683. doi : [10.1007/s00466-021-02013-5](https://doi.org/10.1007/s00466-021-02013-5)
- **M. SHAKOOR***. « FEMS – A Mechanics-oriented Finite Element Modeling Software ». In : *Computer Physics Communications* 260 (2021), page 107729. doi : [10.1016/j.cpc.2020.107729](https://doi.org/10.1016/j.cpc.2020.107729)
- J. GAO, **M. SHAKOOR**, G. DOMEL, M. MERZKIRCH, G. ZHOU, D. ZENG, X. SU et W. K. LIU*. « Predictive multiscale modeling for Unidirectional Carbon Fiber Reinforced Polymers ». In : *Composites Science and Technology* 186 (2020), page 107922. doi : [10.1016/j.compscitech.2019.107922](https://doi.org/10.1016/j.compscitech.2019.107922)
- S. FLOREZ*, **M. SHAKOOR**, T. TOULORGE et M. BERNACKI. « A new finite element strategy to simulate microstructural evolutions ». In : *Computational Materials Science* 172 (2020), page 109335. doi : [10.1016/j.commatsci.2019.109335](https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2019.109335)
- J. GAO, **M. SHAKOOR**, H. JINNAI, H. KADOWAKI, E. SETA et W. K. LIU*. « An inverse modeling approach for predicting filled rubber performance ». In : *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 357 (2019), page 112567. doi : [10.1016/j.cma.2019.112567](https://doi.org/10.1016/j.cma.2019.112567)
- **M. SHAKOOR***, V. M. TREJO NAVAS, D. PINO MUÑOZ, M. BERNACKI et P.-O. BOUCHARD. « Computational methods for ductile fracture modeling at the microscale ». In : *Archives of Computational Methods in Engineering* 26.4 (2019), pages 1153-1192. doi : [10.1007/s11831-018-9276-1](https://doi.org/10.1007/s11831-018-9276-1)
- **M. SHAKOOR**, O. L. KAFKA, C. YU et W. K. LIU*. « Data science for finite strain mechanical science of ductile materials ». In : *Computational Mechanics* 64.1 (2019), pages 33-45. doi : [10.1007/s00466-018-1655-9](https://doi.org/10.1007/s00466-018-1655-9)
- A. BULJAC, V. M. TREJO NAVAS, **M. SHAKOOR**, A. BOUTERF, J. NEGGERS, M. BERNACKI, P.-O. BOUCHARD, T. F. MORGENEYER et F. HILD*. « On the calibration of elastoplastic parameters at the microscale via X-ray microtomography and digital volume correlation for the simulation of ductile damage ». In : *European Journal of Mechanics - A/Solids* 72 (2018), pages 287-297. doi : [10.1016/j.euromechsol.2018.04.010](https://doi.org/10.1016/j.euromechsol.2018.04.010)

Préparées pendant la thèse de doctorat (*auteur correspondant) : 7

- **M. SHAKOOR***, M. BERNACKI et P.-O. BOUCHARD. « Ductile fracture of a metal matrix composite studied using 3D numerical modeling of void nucleation and coalescence ». In : *Engineering Fracture Mechanics* 189 (2018), pages 110-132. doi : [10.1016/j.engfracmech.2017.10.027](https://doi.org/10.1016/j.engfracmech.2017.10.027)
- **M. SHAKOOR***, A. BULJAC, J. NEGGERS, F. HILD, T. F. MORGENEYER, L. HELFEN, M. BERNACKI et P.-O. BOUCHARD. « On the choice of boundary conditions for micromechanical simulations based on 3D imaging ». In : *International Journal of Solids and Structures* 112 (2017), pages 83-96. doi : [10.1016/j.ijsolstr.2017.02.018](https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2017.02.018)
- A. BULJAC, **M. SHAKOOR**, J. NEGGERS, M. BERNACKI, P.-O. BOUCHARD, L. HELFEN, T. F. MORGENEYER et F. HILD*. « Numerical validation framework for micromechanical simu-

lations based on synchrotron 3D imaging ». In : *Computational Mechanics (front cover)* 59.3 (2017), pages 419-441. DOI : [10.1007/s00466-016-1357-0](https://doi.org/10.1007/s00466-016-1357-0)

- **M. SHAKOOR***, P.-O. BOUCHARD et M. BERNACKI. « An adaptive level-set method with enhanced volume conservation for simulations in multiphase domains ». In : *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 109.4 (2017), pages 555-576. DOI : [10.1002/nme.5297](https://doi.org/10.1002/nme.5297)
- **B. SCHOLTES***, **M. SHAKOOR**, A. SETTEFRATI, P.-O. BOUCHARD, N. BOZZOLO et M. BERNACKI. « New finite element developments for the full field modeling of microstructural evolutions using the level-set method ». In : *Computational Materials Science* 109 (2015), pages 388-398. DOI : [10.1016/j.commatsci.2015.07.042](https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2015.07.042)
- **M. SHAKOOR***, B. SCHOLTES, P.-O. BOUCHARD et M. BERNACKI. « An efficient and parallel level set reinitialization method – Application to micromechanics and microstructural evolutions ». In : *Applied Mathematical Modelling* 39.23-24 (2015), pages 7291-7302. DOI : [10.1016/j.apm.2015.03.014](https://doi.org/10.1016/j.apm.2015.03.014)
- E. ROUX*, **M. SHAKOOR**, M. BERNACKI et P.-O. BOUCHARD. « A new finite element approach for modelling ductile damage void nucleation and growth—analysis of loading path effect on damage mechanisms ». In : *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* 22.7 (2014), page 075001. DOI : [10.1088/0965-0393/22/7/075001](https://doi.org/10.1088/0965-0393/22/7/075001)

Numéros spéciaux dans des revues internationales à comité de lecture

Préparées après la thèse de doctorat (*auteur correspondant) : 1

- O. L. KAFKA, C. YU, **M. SHAKOOR**, Z. LIU, G. J. WAGNER et W. K. LIU*. « Data-Driven Mechanistic Modeling of Influence of Microstructure on High-Cycle Fatigue Life of Nickel Titanium ». In : *JOM* 70.7 (2018), pages 1154-1158. DOI : [10.1007/s11837-018-2868-2](https://doi.org/10.1007/s11837-018-2868-2)

Préparées pendant la thèse de doctorat (*auteur correspondant) : 2

- D. POLYCHRONOPOULOU*, N. BOZZOLO, D. PINO MUÑOZ, J. BRUCHON, **M. SHAKOOR**, Y. MILLET, C. DUMONT, I. FREIHERR VON THÜNGEN, R. BESNARD et M. BERNACKI. « Introduction to the level-set full field modeling of laths spheroidization phenomenon in α/β titanium alloys ». In : *International Journal of Material Forming* 12.2 (2019), pages 173-183. DOI : [10.1007/s12289-017-1371-6](https://doi.org/10.1007/s12289-017-1371-6)
- **M. SHAKOOR***, M. BERNACKI et P.-O. BOUCHARD. « A new body-fitted immersed volume method for the modeling of ductile fracture at the microscale : Analysis of void clusters and stress state effects on coalescence ». In : *Engineering Fracture Mechanics* 147 (2015), pages 398-417. DOI : [10.1016/j.engfracmech.2015.06.057](https://doi.org/10.1016/j.engfracmech.2015.06.057)

Publications dans des actes de conférences internationales

Préparées après la thèse de doctorat (*auteur correspondant) : 3

- **M. SHAKOOR**, J. GAO, Z. LIU et W. K. LIU*. « A Data-Driven Multiscale Theory For Modeling Damage and Fracture of Composite Materials ». In : *Meshfree Methods for Partial Differential Equations IX. IWMMPDE 2017*. Sous la direction de M. GRIEBEL et M. SCHWEITZER. Tome 129. Lecture Notes in Computational Science and Engineering. Cham : Springer, 2019, pages 135-148. DOI : [10.1007/978-3-030-15119-5_8](https://doi.org/10.1007/978-3-030-15119-5_8)

- P.-O. BOUCHARD*, V. M. TREJO NAVAS, M. SHAKOOR, T. MORGENEYER, A. BULJAC, L. HELFEN, F. HILD et M. BERNACKI. « Recent advances in finite element modelling of ductile fracture at mesoscale ». In : *Proceedings of the 17th International Conference on Metal Forming METAL FORMING 2018 September 16 – 19, 2018, Loisir Hotel Toyohashi, Toyohashi, Japan*. Sous la direction de K.-i. MORI, Y. ABE et T. MAENO. Tome 15. Procedia Manufacturing. Elsevier B.V., 2019, pages 39-45. DOI : [10.1016/j.promfg.2018.07.167](https://doi.org/10.1016/j.promfg.2018.07.167)
- A. BULJAC, M. SHAKOOR, J. NEGGERS, M. BERNACKI, P.-O. BOUCHARD, L. HELFEN, T. F. MORGENEYER et F. HILD*. « Experimental-Numerical Validation Framework for Micromechanical Simulations ». In : *Multiscale Modeling of Heterogeneous Structures*. Sous la direction de J. SORIĆ, P. WRIGGERS et O. ALLIX. Tome 86. Lecture Notes in Applied and Computational Mechanics. Cham : Springer, 2018, pages 147-161. DOI : [10.1007/978-3-319-65463-8_8](https://doi.org/10.1007/978-3-319-65463-8_8)

Préparées pendant la thèse de doctorat (*auteur correspondant) : 4

- F. HILD*, A. BULJAC, M. SHAKOOR, J. NEGGERS, M. BERNACKI, P.-O. BOUCHARD et T. F. MORGENEYER. « Numerical validation framework for micromechanical simulations based on 3D imaging ». In : *Proceedings of the 7th GACM Colloquium on Computational Mechanics for Young Scientists from Academia and Industry*. Sous la direction de M. v. SCHEVEN, M.-A. KEIP et N. KARAJAN. 02 Fakultät Bau- und Umweltingenieurwissenschaften. Stuttgart : Institute for Structural Mechanics, University of Stuttgart, 2017, pages 24-27. DOI : [10.18419/opus-9334](https://doi.org/10.18419/opus-9334)
- P.-O. BOUCHARD*, V. M. TREJO NAVAS, M. SHAKOOR, M. BERNACKI, T. F. MORGENEYER, A. BULJAC et F. HILD. « Numerical modeling of ductile fracture at the microscale combined with X-ray laminography and digital volume correlation ». In : *Proceedings of the 20th International ESAFORM Conference on Material Forming : ESAFORM 2017*. Sous la direction de D. BRABAZON, S. NAHER et I. U. AHAD. Tome 1896. AIP Conference Proceedings 1. AIP Publishing, 2017, page 160016. DOI : [10.1063/1.5008191](https://doi.org/10.1063/1.5008191)
- D. POLYCHRONOPOULOU*, N. BOZZOLO, D. PINO MUÑOZ, J. BRUCHON, M. SHAKOOR, Y. MILLET, C. DUMONT, I. FREIHERR VON THÜNGEN, R. BESNARD et M. BERNACKI. « Introduction to the level-set full field modeling of laths spheroidization phenomenon in α/β titanium alloys ». In : *NUMIFORM 2016 : The 12th International Conference on Numerical Methods in Industrial Forming Processes*. Sous la direction de K. SAANOUNI. Tome 80. MATEC Web of Conferences. EDP Sciences, 2016. Chapitre MS2 : Microstructure modeling in forming processes, page 02003. DOI : [10.1051/mateconf/20168002003](https://doi.org/10.1051/mateconf/20168002003)
- B. SCHOLTES*, M. SHAKOOR, N. BOZZOLO, P.-O. BOUCHARD, A. SETTEFRATI et M. BERNACKI. « Advances in Level-Set Modeling of Recrystallization at the Polycrystal Scale – Development of the Digi- μ Software ». In : *Material Forming ESAFORM 2015*. Sous la direction d'A. OFENHEIMER, C. POLETTI, D. SCHALK-KITTING et C. SOMMITSCH. Tome 651–653. Key Engineering Materials. Scientific.Net, 2015, pages 617-623. DOI : [10.4028/www.scientific.net/KEM.651-653.617](https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/KEM.651-653.617)

Communications orales sur invitation

Présentées après la thèse de doctorat (*présentateur) : 4

- M. SHAKOOR*. « From microstructure to material laws using reduced order modeling ». In : *University of Porto*. Porto (Portugal), 22 mars 2019

- **M. SHAKOOR***. « From microstructure to material laws using reduced order modeling ». In : *Centre for Materials Forming (CEMEF) – Mines ParisTech*. Sophia-Antipolis (France), 6 déc. 2018
- **M. SHAKOOR***, M. BERNACKI et P.-O. BOUCHARD. « Three-dimensional numerical modeling of ductile fracture mechanisms at the microscale ». In : *ECCOMAS PhD Olympiads at the ECCOMAS Young Investigator Conference (YIC)*. Milano (Italy), 13-15 sept. 2017
- **M. SHAKOOR***, M. BERNACKI et P.-O. BOUCHARD. « Modélisation numérique tridimensionnelle des mécanismes de rupture ductile à l'échelle microscopique ». In : *Colloque national en calcul des structures (CSMA)*. Giens (France), 15-19 mai 2017

Communications orales à des conférences internationales

Présentées après la thèse de doctorat (*présentateur) : 25

- X. MA, **M. SHAKOOR**, D. VASIUKOV*, Y. CHEN, S. V. LOMOV et C. H. PARK. « Effect of characteristic length parameter in phase-field damage modeling on fibrous composites ». In : *European Solid Mechanics Conference (ESMC)*. Galway (Ireland), 4-8 juill. 2022
- X. MA, **M. SHAKOOR**, Y. CHEN, D. VASIUKOV*, S. V. LOMOV et C. H. PARK. « Characteristic length-insensitive phase-field damage modeling of cracks in fiber-reinforced composites with FFT solver ». In : *European Conference on Composite Materials (ECCM)*. Lausanne (Switzerland), 26-30 juin 2022
- **M. SHAKOOR*** et C. H. PARK. « Computational homogenization of unsteady incompressible two-phase flows with obstacles ». In : *European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering (ECCOMAS)*. Oslo (Norway), 5-9 juin 2022
- K. SHINDE*, V. ITIER, J. MENNESSON, D. VASIUKOV et **M. SHAKOOR**. « Deep learning based dimensionality reduction for fracture mechanics ». In : *European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering (ECCOMAS)*. Oslo (Norway), 5-9 juin 2022
- X. MA*, **M. SHAKOOR**, D. VASIUKOV, S. V. LOMOV et C. H. PARK. « Numerical Artifacts in FFT Solver for Elastic Problems of Multi-Phase Materials and their Reduction with a Level-Set Based Composite Voxel Method ». In : *International Conference on Advanced Computational Engineering and Experimenting (ACEX)*. St. Julian's (Malta), 4-8 juill. 2021
- **M. SHAKOOR*** et C. H. PARK. « Computational Homogenization of Unsteady Incompressible Flows with Obstacles ». In : *International Conference on Adaptive Modeling and Simulation (ADMOS)*. Virtual Congress, 21-23 juin 2021
- **M. SHAKOOR*** et L. DELBEKE. « Topological optimization of triangulations on graphics processing units : a bad idea ? ». In : *World Congress on Computational Mechanics and European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering (WCCM-ECCOMAS)*. Virtual Congress, 11-15 jan. 2021
- **M. SHAKOOR*** et C. H. PARK. « Adaptive Higher-Order Finite Element Modeling of Multi-phase Flow ». In : *World Congress on Computational Mechanics and European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering (WCCM-ECCOMAS)*. Virtual Congress, 11-15 jan. 2021
- **M. SHAKOOR*** et C. H. PARK. « An Adaptive Fully Implicit Residual-Based Variational Multi-Scale Formulation for Multiphase Flow ». In : *International Conference on Adaptive Modeling and Simulation (ADMOS)*. El Campello, Alicante (Spain), 27-29 mai 2019

- P.-O. BOUCHARD*, V. M. TREJO NAVAS, **M. SHAKOOR**, T. MORGENEYER, A. BULJAC, L. HELFEN, F. HILD et M. BERNACKI. « Recent advances in finite element modelling of ductile fracture at mesoscale ». In : *International Conference on Metal Forming (Metal Forming)*. Toyohashi (Japan), 16-19 sept. 2018
- H. LI*, J. GAO, C. YU, **M. SHAKOOR** et W. K. LIU. « Data Compression in Multiscale Analysis for Composite Materials ». In : *World Congress on Computational Mechanics (WCCM)*. New York, NY (USA), 22-27 juill. 2018
- T. TOULORGE*, M. BERNACKI, P.-O. BOUCHARD, **M. SHAKOOR** et V. M. TREJO NAVAS. « Numerical Modeling of Nucleation Mechanisms for 3D Heterogeneous Microstructures ». In : *World Congress on Computational Mechanics (WCCM)*. New York, NY (USA), 22-27 juill. 2018
- P.-O. BOUCHARD*, V. M. TREJO NAVAS, **M. SHAKOOR**, M. BERNACKI, T. F. MORGENEYER, A. BULJAC et F. HILD. « Analysis of Local Strain in Nodular Graphite Cast Iron at the Onset of Coalescence by Means of 3D Numerical Modeling Combined with X-Ray Laminography and Digital Volume Correlation ». In : *World Congress on Computational Mechanics (WCCM)*. New York, NY (USA), 22-27 juill. 2018
- **M. SHAKOOR***, C. YU, O. L. KAFKA et W. K. LIU. « A Multiscale Computational Homogenization Theory with Data-Driven Model Reduction for the Prediction of Ductile Damage ». In : *World Congress on Computational Mechanics (WCCM)*. New York, NY (USA), 22-27 juill. 2018
- C. YU*, **M. SHAKOOR**, O. L. KAFKA et W. K. LIU. « Data-driven Reduced-order Modeling of Microvoid Evolution for Ductile Fracture ». In : *World Congress on Computational Mechanics (WCCM)*. New York, NY (USA), 22-27 juill. 2018
- A. BULJAC, **M. SHAKOOR.**, M. BERNACKI, P.-O. BOUCHARD, L. HELFEN, F. HILD et T. F. MORGENEYER*. « Effect of void arrangement on ductile damage mechanisms in nodular cast iron : in situ 3D measurements and micromechanical simulations ». In : *IUTAM Symposium on Size-Effects in Microstructure and Damage Evolution*. Lyngby (Denmark), 27 mai-1^{er} juin 2018
- A. BULJAC, **M. SHAKOOR**, V. M. TREJO NAVAS, M. BERNACKI, P.-O. BOUCHARD, A. BOUTERF, L. HELFEN, F. HILD*, T. F. MORGENEYER, J. NEGGERS et S. ROUX. « On the integration of measured data in numerical simulations at the microscale ». In : *Annual International Digital Image Correlation Society Conference (IDIC)*. Barcelona (Spain), 6-9 nov. 2017
- F. HILD*, A. BULJAC, **M. SHAKOOR**, J. NEGGERS, M. BERNACKI, P.-O. BOUCHARD et T. F. MORGENEYER. « Numerical validation framework for micromechanical simulations based on 3D imaging ». In : *7th GACM Colloquium on Computational Mechanics for Young Scientists from Academia and Industry (GACM)*. Stuttgart (Germany), 11-13 oct. 2017
- P.-O. BOUCHARD*, V. M. TREJO NAVAS, **M. SHAKOOR** et M. BERNACKI. « A parametric analysis of void coalescence mechanisms based on 3D finite element microscale computations ». In : *International Conference on Computational Plasticity (COMPLAS)*. Barcelona (Spain), 5-7 sept. 2017
- V. M. TREJO NAVAS*, **M. SHAKOOR**, M. BERNACKI et P.-O. BOUCHARD. « A micromechanical study of ductile damage in a finite element framework with advanced meshing capabilities ». In : *International Conference on Fracture (ICF)*. Rhodes (Greece), 18-23 juin 2017
- P.-O. BOUCHARD*, **M. SHAKOOR**, V. M. TREJO NAVAS et M. BERNACKI. « A new finite element framework for the modeling of ductile fracture mechanisms in heterogeneous microstructures ». In : *International Conference on Computational Modeling of Fracture and Failure of Materials and Structures (CFRAC)*. Nantes (France), 14-16 juin 2017

- F. HILD*, A. BULJAC, **M. SHAKOOR**, J. NEGGERS, M. BERNACKI, P.-O. BOUCHARD, L. HELFEN et T. F. MORGENEYER. « Validation framework for micromechanical simulations based on synchrotron imaging ». In : *Conference and Exposition on Experimental and Applied Mechanics (SEM ANNUAL)*. Indianapolis (USA), 12-15 juin 2017
- J.-L. BOUVARD*, I. COPPO, F. LU, **M. SHAKOOR**, S. CANTOURNET, N. BILLON, V. FABRE et M. BERNACKI. « Generation and homogenization of RVEs for thermoplastics reinforced with discontinuous reinforcements ». In : *Conference and Exposition on Experimental and Applied Mechanics (SEM ANNUAL)*. Indianapolis (USA), 12-15 juin 2017
- T. TOULORGE*, **M. SHAKOOR**, M. BERNACKI, P.-O. BOUCHARD, Y. MESRI et E. HACHEM. « A robust deformation method for unstructured meshes subject to large boundary movements ». In : *International Conference on Coupled Problems in Science and Engineering (COUPLED PROBLEMS)*. Rhodes (Greece), 12-14 juin 2017
- P.-O. BOUCHARD*, V. M. TREJO NAVAS, **M. SHAKOOR**, M. BERNACKI, T. F. MORGENEYER, A. BULJAC et F. HILD. « Numerical modeling of ductile fracture at the microscale combined with X-Ray laminography and digital volume correlation ». In : *International ESAFORM Conference on Material Forming (ESAFORM)*. Dublin (Ireland), 26-28 avr. 2017

Présentées pendant la thèse de doctorat (*présentateur) : 12

- A. BULJAC, **M. SHAKOOR**, J. NEGGERS, M. BERNACKI, P.-O. BOUCHARD, L. HELFEN, T. F. MORGENEYER et F. HILD*. « Numerical validation framework for micromechanical simulations based on synchrotron imaging ». In : *Workshop Multiscale Modeling of Heterogeneous Structures (MUMO)*. Dubrovnik (Croatia), 21-23 sept. 2016
- **M. SHAKOOR***, M. BERNACKI et P.-O. BOUCHARD. « An adaptive body-fitted monolithic method for modeling the fracture of heterogeneous microstructures ». In : *World Congress on Computational Mechanics (WCCM)*. Seoul (Korea), 24-29 juill. 2016
- D. POLYCHRONOPOULOU*, N. BOZZOLO, D. PINO MUÑOZ, J. BRUCHON, **M. SHAKOOR**, Y. MILLET, C. DUMONT, I. FREIHERR VON THÜNGEN, R. BESNARD et M. BERNACKI. « Introduction to the level-set full field modeling of laths spheroidization phenomenon in α/β titanium alloys ». In : *International Conference on Numerical Methods in Industrial Forming Processes (NUMIFORM)*. Troyes (France), 4-7 juill. 2016
- V. M. TREJO NAVAS*, **M. SHAKOOR**, M. BERNACKI et P.-O. BOUCHARD. « Ductile fracture – Influence of heterogeneous microstructure on nucleation, growth and coalescence mechanisms ». In : *International Conference on Numerical Methods in Industrial Forming Processes (NUMIFORM)*. Troyes (France), 4-7 juill. 2016
- D. PINO MUÑOZ*, **M. SHAKOOR**, M. BERNACKI et P.-O. BOUCHARD. « Towards a mesh independent fracture modeling method using cohesive elements ». In : *European Conference on Fracture (ECF)*. Catania (Italy), 20-24 juin 2016
- P.-O. BOUCHARD*, **M. SHAKOOR**, V. M. TREJO NAVAS et M. BERNACKI. « Numerical modeling of failure mechanisms in complex heterogeneous microstructures ». In : *European Conference on Fracture (ECF)*. Catania (Italy), 20-24 juin 2016
- **M. SHAKOOR***, M. BERNACKI et P.-O. BOUCHARD. « Modeling of ductile fracture mechanisms at the microscale using a new adaptive body-fitted monolithic method ». In : *International Conference on Computational Plasticity (COMPLAS)*. Barcelona (Spain), 1^{er}-3 sept. 2015
- **M. SHAKOOR**, M. BERNACKI et P.-O. BOUCHARD*. « Micromechanical modelling of ductile fracture mechanisms using a new body-fitted immersed volume method ». In : *Internation-*

tional Conference on Computational Modeling of Fracture and Failure of Materials and Structures (CFRAC). Paris (France), 3-5 juin 2015

- **M. SHAKOOR***, M. BERNACKI et P.-O. BOUCHARD. « An adaptive body-fitted monolithic method for modeling the fracture of heterogeneous microstructures ». In : *International Conference on Computational Modeling of Fracture and Failure of Materials and Structures (CFRAC)*. Paris (France), 3-5 juin 2015
- B. SCHOLTES*, **M. SHAKOOR**, N. BOZZOLO, P.-O. BOUCHARD, A. SETTEFRATI et M. BERNACKI. « Advances in Level-Set modeling of recrystallization at the polycrystal scale – Development of the Digi- μ software ». In : *International ESAFORM Conference on Material Forming (ESAFORM)*. Graz (Austria), 15-17 avr. 2015
- **M. SHAKOOR**, M. BERNACKI et P.-O. BOUCHARD*. « Analysis of void clusters arrangements on coalescence using a new body-fitted immersed volume method for the modeling of ductile fracture at the microscale ». In : *IUTAM Symposium : Ductile Fracture and Localization*. Paris (France), 27-28 mars 2015
- **M. SHAKOOR**, M. BERNACKI, E. ROUX et P.-O. BOUCHARD*. « Numerical modelling of the effect of non-proportional loading on ductile fracture at the microscale ». In : *European Conference on Fracture (ECF)*. Trondheim (Norway), 30 juin-4 juill. 2014

Communications orales à des conférences nationales

Présentées après la thèse de doctorat (*présentateur) : 16

- **M. SHAKOOR*** et C. H. PARK. « Homogénéisation numérique d'écoulements avec obstacles ». In : *Journées scientifiques du GdR Mise en œuvre des composites et propriétés induites (GDR Week – MIC)*. Toulouse (France), 30 nov.-1^{er} déc. 2022
- D. VASIUKOV* et **M. SHAKOOR***. « Optimisation du déploiement des capteurs sur les appareils à pression ». In : *Journée du Réseau National Académique et Recherche Equipements Sous Pression (RNAR-ESP)*. Senlis (France), 17 mai 2022
- D. VASIUKOV* et **M. SHAKOOR***. « Optimisation du déploiement des capteurs sur les appareils à pression ». In : *20 ans du LATEP, Equipements sous pression et nouvelles technologies*. Douai (France), 1^{er} déc. 2021
- A. DJERIDA, A. PISUPATI, T. KANIT et **M. SHAKOOR***. « Génération de microstructures virtuelles par apprentissage profond ». In : *Journée scientifique de la Fédération Lilloise de Mécanique*. Villeneuve d'Ascq (France), 23 sept. 2021
- **M. SHAKOOR*** et C. H. PARK. « Modélisation numérique de la migration de porosités pendant la mise en œuvre des composites ». In : *Journées Nationales sur les Composites (JNC)*. Conférence virtuelle, 28-30 juin 2021
- **M. SHAKOOR*** et C. H. PARK. « Simulation de la migration de bulles dans le milieu fibreux pendant l'imprégnation de composites ». In : *Journées scientifiques du GdR Mise en œuvre des composites et propriétés induites (GDR Week – MIC)*. Tarbes (France), 7-8 nov. 2019
- S. FLOREZ*, **M. SHAKOOR**, T. TOULORGE et M. BERNACKI. « Body-fitted finite element discretizations for moving interfaces in context of microstructure evolutions ». In : *Colloque national en calcul des structures (CSMA)*. Giens (France), 17-13 mai 2019
- D. PINO MUÑOZ*, V. M. TREJO NAVAS, **M. SHAKOOR**, M. BERNACKI et P.-O. BOUCHARD. « Modélisation de la rupture pour des microstructures hétérogènes par approches Level-Set et adaptation de maillage ». In : *Colloque National MECAMAT*. Aussois (France), 21-25 jan. 2019

- **M. SHAKOOR***, C. YU*, O. L. KAFKA, J. GAO et W. K. LIU. « Mechanistic data-driven self-consistent analysis : applications for material performance ». In : *NU-NIMS Materials Genome Workshop*. Evanston, IL (USA), 28 mars 2018
- O. L. KAFKA*, Z. GAN*, **M. SHAKOOR**, C. YU et W. K. LIU. « Predicting Process-Structure-Properties Relationships — NiTi fatigue and Additive Manufacturing ». In : *SRG Materials Design Workshop*. Evanston, IL (USA), 26-27 mars 2018
- T. F. MORGENEYER*, A. BULJAC, **M. SHAKOOR**, J. NEGGERS, M. BERNACKI, P.-O. BOUCHARD, L. HELFEN et F. HILD. « Micromechanical simulations and analyses based on synchrotron 3D imaging for nodular cast iron tested under different stress states ». In : *Journées Annuelles SF2M*. Lyon (France), 23-25 oct. 2017
- V. M. TREJO NAVAS*, **M. SHAKOOR**, M. BERNACKI et P.-O. BOUCHARD. « Influence of heterogeneous microstructure on the micromechanisms of ductile fracture ». In : *Colloque national en calcul des structures (CSMA)*. Giens (France), 15-19 mai 2017
- I. COPPO, F. LU, **M. SHAKOOR**, S. CANTOURNET, N. BILLON, V. FABRE, M. BERNACKI et J.-L. BOUVARD*. « Génération et homogénéisation de VÉRs pour composites thermoplastiques à renforts discontinus ». In : *Journées Matériaux Numériques (JMN)*. Tours (France), 31 jan.-2 fév. 2017
- V. M. TREJO NAVAS*, **M. SHAKOOR**, M. BERNACKI et P.-O. BOUCHARD. « A study of the effect of microstructural heterogeneities on ductile damage ». In : *Journées Matériaux Numériques (JMN)*. Tours (France), 31 jan.-2 fév. 2017
- T. F. MORGENEYER*, A. BULJAC, **M. SHAKOOR**, V. M. TREJO NAVAS, J. NEGGERS, M. BERNACKI, P.-O. BOUCHARD, L. HELFEN et F. HILD. « Endommagement ductile : mesures volumiques et simulations micromécaniques ». In : *Journées Matériaux Numériques (JMN)*. Tours (France), 31 jan.-2 fév. 2017
- **M. SHAKOOR**, P.-O. BOUCHARD, D. PINO MUÑOZ, T. TOULORGE et M. BERNACKI*. « An adaptive level-set method with enhanced volume conservation for simulations in multiphase domains ». In : *Journées Matériaux Numériques (JMN)*. Tours (France), 31 jan.-2 fév. 2017

Présentées pendant la thèse de doctorat (*présentateur) : 5

- V. M. TREJO NAVAS*, **M. SHAKOOR**, M. BERNACKI et P.-O. BOUCHARD. « Ductile fracture – Influence of heterogeneous microstructure on nucleation, growth and coalescence mechanisms ». In : *Workshop Analyses in-situ : Expérience / Modélisation – SF2M/MECAMAT*. Paris (France), 15-16 sept. 2016
- A. BULJAC*, **M. SHAKOOR**, J. NEGGERS, M. BERNACKI, P.-O. BOUCHARD, L. HELFEN, T. F. MORGENEYER et F. HILD. « Micromechanical simulations based on laminography 3D imaging : experimental/numerical framework ». In : *Workshop Analyses in-situ : Expérience / Modélisation – SF2M/MECAMAT*. Paris (France), 15-16 sept. 2016
- P.-O. BOUCHARD*, **M. SHAKOOR** et M. BERNACKI. « 3D modeling of ductile fracture at the microscale using a new body-fitted mesh adaptation technique ». In : *Workshop Matériau Numérique – SF2M/MECAMAT*. Paris (France), 30 nov.-1^{er} déc. 2015
- **M. SHAKOOR***, M. BERNACKI et P.-O. BOUCHARD. « Une nouvelle méthode de volume immergé pour la modélisation numérique de l'endommagement ductile à l'échelle des microstructures ». In : *Colloque national en calcul des structures (CSMA)*. Giens (France), 18-22 mai 2015

- **M. SHAKOOR***, M. BERNACKI et P.-O. BOUCHARD. « Modélisation numérique de l'endommagement ductile à l'échelle des microstructures ». In : *Journées Matériaux Numériques (JMN)*. St-Aignan-sur-Cher (France), 3-5 fév. 2015

Communications par affiche à des conférences internationales

Présentées après la thèse de doctorat (*présentateur) : 2

- X. MA*, K.-K. PARVATHANENI, S. V. LOMOV, D. VASIUKOV, **M. SHAKOOR** et C. H. PARK. « Quantitative comparison between fast fourier transform and finite element method for micromechanical modeling of composite ». In : *FiBreMoD Conference*. Leuven (Belgium), 9-12 déc. 2019
- O. L. KAFKA*, C. YU, **M. SHAKOOR** et W. K. LIU. « Data-driven Modeling of Microstructure Shape Influence on High Cycle Fatigue Life of NiTi Wire ». In : *International Congress on 3D Materials Science (3DMS)*. Helsingør (Denmark), 10-13 juin 2018

Présentées pendant la thèse de doctorat (*présentateur) : 1

- **M. SHAKOOR***, M. BERNACKI et P.-O. BOUCHARD. « Numerical modelling of ductile damage at the microscale in a level set framework ». In : *International CAE Conference (CAE)*. Verona (Italy), 27-28 oct. 2014

Chapitre 1

Modélisation des écoulements biphases par fonction de niveau et éléments finis adaptatifs

Dans les entreprises où l'on risque tout, un moment arrive, d'ordinaire, où celui qui mène la partie sent que le destin se fixe. Par un étrange concours, les mille épreuves où il se débat semblent s'épanouir soudain en un épisode décisif. Que celui-ci soit heureux et la fortune va se livrer.

Charles de Gaulle

Introduction	38
1.1 Génération et adaptation de maillage	41
1.1.1 Méthode d'adaptation de maillage	41
1.1.2 Méthode de génération de maillage	46
1.1.3 Applications	47
1.2 Simulation des écoulements biphases	60
1.2.1 Modèle	60
1.2.2 Méthode numérique	61
1.2.3 Résultats	62
1.3 Génie logiciel et calcul parallèle	75
Conclusion	77

Introduction

Les matériaux auxquels je m'intéresse sont caractérisés par une structure hétérogène à une petite échelle, qui peut être celle du millimètre voire du micromètre. La modélisation numérique de ces matériaux pose nécessairement la question de la discrétisation des interfaces. De nombreuses méthodes numériques ont été proposées dans la littérature pour traiter cette problématique, mais sans qu'une approche unique et universelle n'ait émergé. Selon la quantité d'interfaces, la complexité de leur morphologie et la nature de leur évolution pendant la simulation, différentes méthodes peuvent être considérées comme plus appropriées.

Pendant ma thèse de doctorat, mes travaux de recherche se concentraient exclusivement sur la modélisation de la rupture ductile dans les métaux. Depuis, j'ai pu travailler sur d'autres matériaux et phénomènes et je me concentre depuis mon arrivée à l'IMT Nord Europe sur les matériaux composites à matrice polymère et à fibres longues unidirectionnelles ou tissées. Je suis amené à m'intéresser à différentes méthodes numériques selon les caractéristiques du matériau et le phénomène que je souhaite modéliser (qui correspond à une étape du cycle de vie).

L'objectif final dans ce chapitre est de modéliser des écoulements biphasés dans un domaine contenant des obstacles, bien que la plupart des notions abordées dans ce chapitre ne se limitent pas à cette application. Ce problème est inspiré des procédés de mise en œuvre des matériaux composites comme le moulage par transfert de résine, où la résine s'écoule à travers le moule, et est freinée dans sa progression par le renfort. La modélisation de l'interaction entre le front de résine et l'obstacle formé par le renfort est essentielle afin de prédire le piégeage de bulles pendant la fabrication. Ces bulles ne sont autres que des porosités qui peuvent détériorer gravement les propriétés finales des structures composites [2, 3].

Les méthodes numériques pour modéliser les écoulements biphasés dans un domaine contenant des obstacles se basent sur plusieurs outils :

- Une discrétisation du domaine de calcul, qui peut éventuellement être adaptative.
- Une méthode d'approximation et de résolution des équations d'écoulement.
- Une modélisation des obstacles.
- Une modélisation de l'interface entre les deux fluides, de son évolution et de la tension de surface.

Le choix de la discrétisation du domaine de calcul est lié à la méthode d'approximation et de résolution des équations d'écoulement. Il y a la méthode des volumes finis, et la méthode des Éléments Finis (EFs), qui sont les deux méthodes les plus utilisées dans la mécanique des fluides numérique, et ce sous différentes variantes. Selon la méthode choisie, le maillage et en particulier le type d'élément utilisé ne sera pas le même.

Le problème considéré étant non stationnaire, de nombreuses approches adaptatives basées sur les volumes finis ou les EFs ont été proposées dans la littérature [28, 29]. Ces approches consistent à adapter dynamiquement le maillage tout au long de la simulation pour réduire le coût de calcul en grossissant les éléments là où l'erreur d'approximation est petite, et pour améliorer la précision en raffinant les éléments là où l'erreur est grande.

Parmi ces approches, les méthodes d'adaptation de maillage EFs basées sur les métriques sont attractives car elles permettent de séparer le problème en deux parties : un estimateur d'erreur dont le rôle est de définir une métrique de remaillage prescrivant la taille et l'orientation locales des éléments, et un algorithme de remaillage dont le rôle est de modifier le maillage. La littérature sur les méthodes d'adaptation de maillage EFs basées sur les métriques est conséquente mais elle se concentre essentiellement sur une interpolation EF linéaire [30, 31, 32,

33]. Bien que les estimateurs d'erreur pour l'interpolation d'ordre supérieur soient bien établis, la formulation de métriques de remaillage se basant sur ces estimateurs a peu été abordée [34, 35].

La modélisation des obstacles, dans le cas où ceux-ci sont indéformables, est un problème d'interaction fluide-structure très largement traité dans la littérature [36, 37]. Dans le cas spécifique de l'application à la mise en œuvre des composites, la difficulté provient de la géométrie. En effet, les composites à fibres longues tissées ont une mésostructure assez complexe qui amène des problèmes d'inter-pénétration et de vides artificiels lors de la discrétisation [38]. Ces problèmes sont d'autant plus difficiles à traiter lorsque la géométrie est fournie sous la forme d'une image 3D acquise par tomographie. La robustesse des outils de génération de maillage existants est encore assez limitée pour ces composites textiles [38]. Cela pousse souvent à se restreindre à des maillages voxélisés, comme présenté au Chapitre 2.

L'interface liquide/gaz est sans aucun doute l'aspect le plus important du problème. Le suivi de l'interface avec une discrétisation explicite dans le cas où celle-ci subit des déformations voire des changements topologiques majeurs requière des techniques avancées [18]. C'est pourquoi les deux approches les plus répandues pour la modélisation d'une interface liquide/gaz reposent sur une représentation implicite. L'interface est ainsi représentée à travers une fraction volumique locale dans la méthode volume de fluide [39] et à travers une fonction de distance signée dans la méthode des Fonctions De Niveau (FDNs) [40]. L'utilisation d'une fonction de distance signée est particulièrement intéressante pour la modélisation de la tension de surface [41], car elle donne directement accès à des propriétés géométriques comme le vecteur normal ou la courbure moyenne [40, 42].

La méthode des FDNs pour la simulation des écoulements biphasés comporte deux inconvénients majeurs qui sont la présence de courants parasites et une mauvaise conservation de la masse [43, 44]. Les courants parasites peuvent notamment être causés par un mauvais équilibre entre la discrétisation utilisée pour la FDN et celle utilisée pour le champ de pression [45], et par un calcul imprécis de la courbure moyenne [44, 45]. Le développement d'approches EFs équilibrées et avec interpolation d'ordre supérieur pour la FDN n'a pas encore été abordé dans la littérature. L'élévation de l'ordre de l'interpolation utilisée pour le champ de pression pose en effet le problème de la condition inf-sup. La question du couplage entre vitesse, pression et FDN dans une telle approche est également à étudier.

En outre, les méthodes adaptatives trouvent leur place car elles permettent d'éviter un raffinement uniforme de tout le domaine de calcul lorsqu'il s'agit seulement de maintenir une discrétisation assez fine à l'interface [28, 29, 46]. Par ailleurs, l'utilisation d'une représentation implicite de l'interface ne signifie pas nécessairement que le maillage doit être Eulérien. Ainsi, selon le pas de temps utilisé et la vitesse de l'écoulement, des approches Lagrangiennes ou Lagrangiennes-Eulériennes Arbitraires ont aussi été développées dans la littérature [47, 48]. L'intérêt d'une approche Lagrangienne réside dans la conservation améliorée qu'elle procure [48]. Le développement d'approches Lagrangiennes ou Lagrangiennes-Eulériennes Arbitraires avec interpolation quadratique pour les écoulements biphasés pourrait donc être particulièrement intéressant.

Mes travaux de recherche sur l'adaptation de maillage, notamment avec une interpolation quadratique et sur la génération de maillage avec discrétisation explicite des interfaces sont présentés en Section 1.1. Quelques applications allant au-delà des écoulements biphasés sont également abordées.

Mes contributions à la modélisation numérique des écoulements biphasés sont présentées en Section 1.2. Ces travaux s'appuient sur une méthode des FDNs avec interpolation quadratique et

adaptation de maillage. L'approche développée est flexible et permet un maillage Eulérien ou Lagrangien, et un couplage fort ou faible entre le système vitesse-pression et la FDN.

Mes travaux de recherche m'amènent naturellement à envisager des méthodes numériques allant au-delà de ce que les codes de calculs existants permettent d'implémenter. Ce chapitre est directement lié au développement des premières briques qui ont fini par former un code de calcul EFs d'ampleur conséquente. La gestion de ce code est une partie intégrante de mes travaux de recherche, de même que sa parallélisation. Cette partie de mon travail est résumée en Section [1.3](#).

1.1 Génération et adaptation de maillage

Cette Section repose essentiellement sur des travaux publiés dans la Référence [11].

Une des toutes premières étapes dans toute démarche de modélisation numérique est la discrétisation. Pour les matériaux hétérogènes, il s’agit de discrétiser des géométries qui peuvent provenir de deux sources. Des images expérimentales 2D ou 3D peuvent être acquises par microscopie optique ou électronique, ou par tomographie. Des géométries virtuelles peuvent également être générées à partir de statistiques. Dans ma thèse de doctorat, j’avais développé une approche originale basée sur des fonctions de distance signée. J’ai repris ces travaux dès mon arrivée à IMT Nord Europe dans l’objectif de générer des maillages EFs de composites à fibres longues. Ces travaux proviennent essentiellement de la Référence [11]. Il s’agit des premières briques qui ont fini par constituer le logiciel libre *FEMS* [49].

L’approche développée s’appuie sur une étape préliminaire présentée en Sous-section 1.1.1, qui est l’adaptation du maillage. La génération de maillage en elle-même est présentée en Sous-section 1.1.2. Son application à des composites à fibres longues est présentée en Sous-section 1.1.3, avec des résultats de calculs de propriétés mécaniques à partir de ces maillages.

1.1.1 Méthode d’adaptation de maillage

Quel que soit le problème à résoudre par la méthode des EFs, il est aisé de définir une variable d’intérêt \mathbf{s} , qui peut même être un vecteur regroupant plusieurs grandeurs d’intérêt. Par exemple, dans bien des problèmes de calcul de structure $\mathbf{s} = \mathbf{u}$, où \mathbf{u} est le champ de déplacement et dans des problèmes d’écoulements incompressibles $\mathbf{s} = \mathbf{v}$, où \mathbf{v} est le champ de vitesse.

Étant donnée une approximation EF \mathbf{s}_h sur un maillage existant, deux objectifs alternatifs peuvent être traités par adaptation de maillage non structuré. Le maillage existant peut être modifié pour minimiser la complexité de calcul tout en respectant une limite de tolérance sur l’erreur d’approximation. Alternativement, il est possible de choisir de minimiser l’erreur d’approximation tout en fixant la complexité de calcul. La complexité de calcul telle que mentionnée dans ce travail doit être comprise comme directement proportionnelle au nombre de nœuds et d’éléments dans le maillage EF.

Les modifications sur le maillage peuvent inclure la suppression, l’insertion et le déplacement de nœuds, et aussi la suppression et l’insertion d’éléments. Les critères pour déterminer les modifications à faire sur le maillage existant sont définis à travers des métriques de remaillage, qui elles-mêmes sont basées sur des estimateur d’erreurs. Les opérations de modification en elles-mêmes sont effectuées par un algorithme de remaillage. Ces modifications ne sont pas aisées à implémenter pour tout type d’éléments, c’est pourquoi ces travaux se limitent à l’adaptation de maillages contenant exclusivement des simplexes, *i.e.*, des triangles linéaires en 2D et des tétraèdres linéaires en 3D.

Le domaine de calcul est noté dans la suite $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, avec $d = 2$ ou 3 la dimension de l’espace. L’ensemble des nœuds du maillage EFs est noté \mathcal{N} . Un unique numéro global $n \in \mathcal{N}$ identifie chaque nœud, et les coordonnées de ce nœud sont données par $\mathbf{A}_n \in \Omega$. L’ensemble des éléments du maillage est noté \mathcal{T} , et un élément K est défini par l’ensemble de ses nœuds $\mathcal{N}(K)$. Un numéro local $n_K \in \mathcal{N}(K)$ identifie chacun des nœuds d’un élément. L’opérateur de connectivité Π_K est défini pour associer chaque numéro local au numéro global correspondant. Par exemple $n = \Pi_K(n_K)$ est le numéro global du nœud qui a pour numéro local n_K au sein de l’élément K .

1.1.1.1 Estimateurs d'erreurs et métriques de remaillage

L'adaptation de maillage peut être vue comme un procédé d'optimisation multi-objectif ciblant les qualités des éléments et les longueurs des arêtes du maillage. Dans le cas de l'adaptation isotrope, un champ de taille de maille scalaire doit être défini sur le maillage EF existant afin de déterminer la longueur d'arête souhaitée localement. Un simplexe optimal a un volume aussi large que possible avec des arêtes de longueurs aussi proches que possible de l'objectif prescrit. Cette injonction contradictoire nécessite la formulation d'un compromis. Celui-ci sera formulé dans l'algorithme de remaillage par la suite.

Dans le cas de l'adaptation anisotrope, une métrique de remaillage \mathbf{M} doit être définie sur le maillage EF existant. Ce champ tensoriel du deuxième ordre défini localement d directions orthogonales et d tailles de maille scalaires indépendantes dans ces directions [50]. Le procédé d'optimisation demeure identique au cas isotrope, mais une distorsion de la métrique Euclidienne est introduite dans la définition du volume des éléments $\forall K \in \mathcal{T}$,

$$|K|_{\mathbf{M}} = \int_K \sqrt{\det(\mathbf{M}(\mathbf{x}))} d\mathbf{x}, \quad (1.1)$$

et celle de la longueur des arêtes $\forall m_K, n_K \in \mathcal{N}(K), m_K \neq n_K, m = \Pi_K(m_K), n = \Pi_K(n_K)$,

$$\|\mathbf{A}_m \mathbf{A}_n\|_{\mathbf{M}} = \int_{\mathbf{A}_m \mathbf{A}_n} \sqrt{\mathbf{M}(\mathbf{x}) \cdot (\mathbf{A}_m - \mathbf{A}_n) \cdot (\mathbf{A}_m - \mathbf{A}_n)} d\mathbf{x}. \quad (1.2)$$

Comme suggéré implicitement dans l'Équation (1.1) et l'Équation (1.2), un tenseur de métrique valide $\mathbf{M}(\mathbf{x}), \mathbf{x} \in \Omega$ est une matrice symétrique définie positive. Elle peut donc être diagonalisée, par exemple pour $d = 3$:

$$\mathbf{M}(\mathbf{x}) = \mathbf{R}(\mathbf{x}) \begin{pmatrix} \frac{1}{h_1^2(\mathbf{x})} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{h_2^2(\mathbf{x})} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{h_3^2(\mathbf{x})} \end{pmatrix} \mathbf{R}(\mathbf{x})^T \quad (1.3)$$

où chaque colonne $i = 1 \dots d$ de la matrice $\mathbf{R}(\mathbf{x})$ est un vecteur indiquant une direction le long de laquelle la taille de maille $h_i(\mathbf{x})$ est prescrite. Comme montré dans la Figure 1.1, le tenseur de métrique donne un contrôle direct sur la forme des éléments. Il est déterminé par un estimateur d'erreur. Les deux estimateurs utilisés dans ce chapitre sont présentés dans la suite.

Premièrement, l'adaptation de maillage pilotée par une métrique peut être utilisée pour adapter le maillage à une géométrie et obtenir des maillages raffinés près des interfaces internes, et ce en fonction de la courbure principale maximale locale. Cela est particulièrement intéressant lorsque l'interface interne $\Gamma_{1,2}$ est définie à travers une fonction de distance signée, ou FDN, ϕ :

$$\phi(\mathbf{x}, t) = \begin{cases} +dist(\mathbf{x}, \Gamma_{1,2}(t)), & \mathbf{x} \in \Omega_1(t), \\ -dist(\mathbf{x}, \Gamma_{1,2}(t)), & \mathbf{x} \in \Omega_2(t), \\ 0, & \mathbf{x} \in \Gamma_{1,2}(t), \end{cases} \quad (1.4)$$

où il est supposé qu'à un instant t le domaine $\Omega(t)$ est décomposé en deux parties $\Omega_1(t)$ et $\Omega_2(t)$ qui sont séparées par l'interface $\Gamma_{1,2}(t)$. Une telle fonction peut être calculée pour des entités géométriques simples et même pour des géométries segmentées à partir d'images 2D ou 3D. La

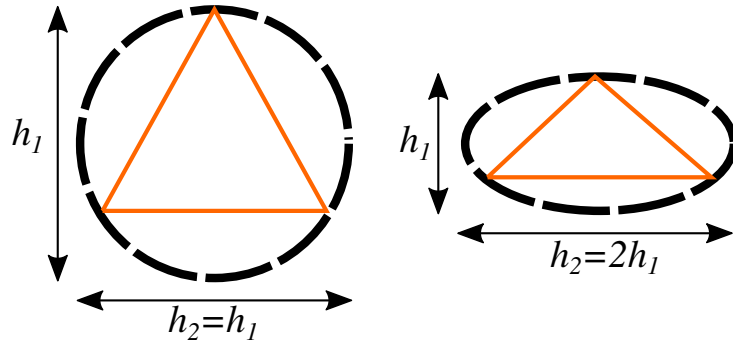


FIGURE 1.1 – Influence de la métrique de remaillage sur la forme finale d'un triangle dans le cas isotrope à gauche, et dans le cas anisotrope à droite, en supposant que le premier vecteur de direction est vertical et le second horizontal. Image(s) issue(s) de la Référence [11].

variable d'intérêt peut alors être définie comme $\mathbf{s} = \phi$.

Bien qu'une métrique de remaillage anisotrope basée sur les courbures principales puisse être implémentée assez aisément dans *FEMS* à partir de la littérature [30, 31], un critère isotrope [16] est préféré dans l'objectif de générer un maillage. En effet, les maillages anisotropes étirés se prêtent peu à la procédure de génération de maillage décrite dans la Sous-section 1.1.2. La matrice $\mathbf{R}(\mathbf{x})$, $\mathbf{x} \in \Omega$ est donc la matrice identité, tandis que

$$\forall i = 1 \dots d, h_i(\mathbf{x}) = \max(h_{min}, \min(h_{max}, \tilde{h}(\mathbf{x}))), \quad (1.5)$$

$$\tilde{h}(\mathbf{x}) = \frac{h_c}{\lambda_s(\mathbf{x})} + \left(h_{max} - \frac{h_c}{\lambda_s(\mathbf{x})} \right) \min\left(\frac{|\mathbf{s}(\mathbf{x})|}{h_{max}}, 1\right), \quad (1.6)$$

où $\lambda_s(\mathbf{x})$ est la valeur propre maximale de la matrice Hessienne $\nabla\nabla\mathbf{s}(\mathbf{x})$ de $\mathbf{s} = \phi$ au point \mathbf{x} . Puisque les valeurs propres de cette matrice Hessienne contiennent les courbures principales de $\Gamma_{1,2}$, il apparaît qu'à l'interface, où $\phi(\mathbf{x}) \approx 0$, la taille de maille est prescrite comme inversement proportionnelle à la courbure, avec h_c comme paramètre de contrôle. Une taille de maille très petite est donc prescrite aux singularités de l'interface ($\lambda_s(\mathbf{x}) \rightarrow \infty$), et très grande dans les parties plates de l'interface ($\lambda_s(\mathbf{x}) \rightarrow 0$). À une distance supérieure à h_{max} de $\Gamma_{1,2}$, une taille de maillage de h_{max} est prescrite, avec une transition linéaire de $\phi(\mathbf{x}) \approx 0$ vers $\phi(\mathbf{x}) \approx h_{max}$. Systématiquement, la taille de maille prescrite est bornée par h_{min} et h_{max} .

En outre, la métrique de remaillage est définie aux nœuds du maillage car elle est destinée à être interpolée pour évaluer l'Équation (1.1) et l'Équation (1.2). Dans l'Équation (1.5), la variable d'intérêt \mathbf{s} peut être remplacée par son approximation nodale $\mathbf{s}_h = \phi_h$, mais pas λ_s , qui dépend des dérivées secondes de \mathbf{s} . Ces dernières ne sont pas accessibles aux nœuds du maillage pour des EFs de Lagrange. Elles sont récupérées dans *FEMS* par une opération de Récupération Superconvergente par Patches (RSP). La RSP consiste à récupérer une approximation d'ordre et de régularité supérieurs de \mathbf{s} à chaque nœud [51]. Afin de récupérer une matrice Hessienne régulière, cette approximation est élevée au troisième ordre dans *FEMS*, comme suggéré dans la littérature [52]. Pour chaque nœud, cette approximation récupérée est calibrée au sens des moindres carrés aux valeurs de \mathbf{s} aux nœuds voisins. L'ensemble des nœuds voisins considérés pour la calibration forme ledit patch.

Deuxièmement, pour l'adaptation à une variable d'intérêt qui peut évoluer vers un champ très hétérogène pendant la simulation, il est préférable d'utiliser la complexité de calcul comme paramètre de contrôle. En effet, cela évite de voir le coût de calcul exploser pendant la simulation, par exemple lors de changements topologiques complexes ou lors de phénomènes très locali-

sés. L'objectif est donc d'estimer l'erreur d'approximation sur \mathbf{s} , et de prescrire une métrique permettant de distribuer cette erreur uniformément dans le domaine de simulation, et ce pour une complexité de calcul constante. Il ne sera alors possible de capturer qu'un certain niveau de détail dans la simulation, et ce en fonction de la complexité de calcul qu'il est possible de gérer. La théorie du maillage continu pour l'adaptation de maillage pilotée par une métrique peut être utilisée pour atteindre cet objectif pour des maillages EFs de simplexes de Lagrange de n'importe quel ordre [9, 35, 53, 54]. La métrique de remaillage est définie en deux étapes. Une opération de mélange géométrique est d'abord utilisée pour définir un unique champ d'erreur directionnelle \mathbf{Q} pour toutes les composantes de \mathbf{s} . Pour des EFs linéaires (P1), cette opération est définie $\forall \mathbf{x} \in \Omega$ par

$$\mathbf{Q}(\mathbf{x}) = \left(\exp \left(\frac{1}{\dim(\mathbf{s})} \sum_{i=1}^{\dim(\mathbf{s})} \log \left((\nabla \nabla s_i(\mathbf{x}))^{-\frac{1}{2}} \right) \right) \right)^{-2}. \quad (1.7)$$

Les détails de cette opération de mélange géométrique peuvent être trouvés dans la littérature [50, 55]. L'extension de cette opération pour des EFs de Lagrange quadratiques (P2) est donnée par [9]

$$\mathbf{Q}(\mathbf{x}) = \left(\exp \left(\frac{1}{\dim(\mathbf{s})d} \sum_{i=1}^{\dim(\mathbf{s})} \sum_{j=1}^d \log \left(\left(\nabla \nabla \frac{\partial s_i}{\partial x_j}(\mathbf{x}) \right)^{-\frac{1}{2}} \right) \right) \right)^{-2}. \quad (1.8)$$

Cette première étape inclut une opération de post-traitement permettant de contrôler l'étrirage des éléments et les variations de la taille de maille induits par le champ tensoriel d'erreur \mathbf{Q} . Cette opération consiste à calculer la valeur propre médiane Q_{med} de \mathbf{Q} sur tout le maillage, et ensuite à borner ses valeurs propres de sorte qu'aucune d'entre elles ne soit supérieure à $Q_{med}h_{max}$, et qu'aucune ne soit inférieure à Q_{med}/h_{max} , où h_{max} est un ratio à prescrire.

La deuxième étape consiste à convertir \mathbf{Q} en une métrique de remaillage \mathbf{M} minimisant l'erreur totale tout en distribuant les erreurs locales de manière uniforme et en contrôlant la complexité de calcul. La solution de ce problème d'optimisation sous contrainte est [34]

$$\mathbf{M}(\mathbf{x}) = \mathcal{N}_c^{\frac{2}{d}} \left(\int_{\Omega} (\det(\mathbf{Q}(\mathbf{x}))^{\frac{k+1}{2(k+1)+d}} dx) \right)^{-\frac{2}{d}} (\det(\mathbf{Q}(\mathbf{x}))^{-\frac{1}{2(k+1)+d}} \mathbf{Q}(\mathbf{x})), \quad (1.9)$$

où \mathcal{N}_c est le nombre de nœuds P1 prescrit (dans le cas P2, cela exclut les nœuds aux milieux des arêtes), et k est l'ordre la méthode EF (1 en P1 et 2 en P2).

Il est à noter que l'Équation (1.7) implique une récupération des dérivées secondes de \mathbf{s} dans le cas P1, et que l'Équation (1.8) implique une récupération des dérivées troisièmes dans le cas P2. La RSP peut être utilisée dans les deux cas [9, 21, 34].

1.1.1.2 Algorithme de remaillage

Une fois que la métrique de remaillage \mathbf{M} est définie et calculée aux nœuds, des modifications peuvent être opérées sur le maillage dans l'objectif de satisfaire les tailles de maille et les orientations prescrites par cette métrique. Comme mentionné précédemment, cela requière de définir un compromis entre l'objectif de maximiser les volumes des éléments et celui de ramener les longueurs des arêtes aussi proche que possible de 1. Il est rappelé que le volume d'un élément est donné par l'Équation (1.1) et la longueur d'une arête par l'Équation (1.2). Deux stratégies sont disponibles dans *FEMS* pour combiner ces objectifs.

Dans la première stratégie [56], le critère de longueur d'arête est d'abord appliqué lors d'un parcours de toutes les arêtes, où celles qui ont une longueur supérieure à $\sqrt{2}$ sont brisées, et

celles qui ont une longueur inférieure à $\sqrt{2}^{-1}$ sont repliées sur elles-mêmes. Ces opérations sont effectuées avec un noyau de Delaunay afin d'assurer la validité du maillage EFs. Deuxièmement, un critère de qualité d'élément est appliqué lors d'un parcours de tous les éléments, où des modifications locales du maillage sont effectuées lorsqu'elles permettent d'améliorer la qualité d'élément. Ces modifications incluent la bascule d'arête, le déplacement de nœud et d'autres opérations plus complexes notamment en 3D, comme illustré dans la Fig. 3 de la Référence [32]. La qualité d'un élément est définie dans cette stratégie par

$$Q_M(K) = \alpha_d \frac{h_M(K)}{|K|_M}, \quad (1.10)$$

$$h_M(K) = \left(\sum_{m_K, n_K \in \mathcal{N}(K), m_K < n_K} \|\mathbf{A}_{\Pi_K(m_K)} \mathbf{A}_{\Pi_K(n_K)}\|_M^2 \right)^{\frac{d}{2}}, \quad (1.11)$$

où α_d est un coefficient de normalisation permettant d'obtenir $Q_M(K) = 1$ pour un simplexe régulier. La qualité d'élément $Q_M(K)$ doit être minimisée avec cette définition. Avec le critère en $\sqrt{2}$ sur la longueur d'arête, les auteurs de la Référence [56] indiquent que les arêtes et les éléments peuvent être successivement parcourus et modifiés jusqu'à ce qu'aucune amélioration ne soit trouvée par l'algorithme, et ce sans risque de boucle infinie. Néanmoins, pour des raisons d'efficacité, ils recommandent de limiter le nombre d'itérations.

Dans la deuxième stratégie [18, 57], le critère de qualité d'élément et celui de longueur d'arête sont combinés dans un unique critère de qualité d'élément qui est défini par

$$Q_M(K) = \min \left(\frac{d!}{\sqrt{d+1}} 2^{\frac{d}{2}} \frac{|K|_M}{h_M(K)}, h_M(K), \frac{1}{h_M(K)} \right), \quad (1.12)$$

$$h_M(K) = \left(\frac{2}{d(d+1)} \sum_{m_K, n_K \in \mathcal{N}(K), m_K < n_K} \|\mathbf{A}_{\Pi_K(m_K)} \mathbf{A}_{\Pi_K(n_K)}\|_M^2 \right)^{\frac{d}{2}}, \quad (1.13)$$

de telle sorte que $Q_M(K) = 0$ pour un simplexe dégénéré et 1 pour un simplexe régulier. La qualité d'élément $Q_M(K)$ doit être maximisée avec ce critère. Cette unique critère de qualité d'élément est appliqué en parcourant des patches d'éléments au voisinage de chaque nœud et arête du maillage. Des modifications locales du maillage comme la bascule d'arête, le déplacement de nœud, la suppression de nœud et l'insertion de nœud sont opérées lorsqu'elles permettent d'améliorer la qualité d'élément. Des exemples de modifications sont montrés dans la Figure 1.2. Bien d'autres modifications sont explorées dans cette stratégie, qui considère de manière générale plus d'opérations locales que la première stratégie, même en 2D. Cela est illustré dans les Figures 1 et 2 de la Référence [18]. Les arêtes et les nœuds du maillage sont parcourus jusqu'à ce qu'aucune amélioration ne puisse être trouvée par l'algorithme. Il est indiqué dans la Référence [18] qu'en pratique cet algorithme converge toujours.

De par leur nature très générale, les modifications de maillage opérées par les deux algorithmes résultent dans des maillages non structurés, et ce même si le maillage initial est structuré. En outre, les deux algorithmes ne peuvent traiter que des simplexes linéaires en 2D et en 3D, mais sont totalement compatibles l'un comme l'autre avec des métriques de remaillage isotropes comme anisotrope.

Lorsque l'algorithme d'adaptation du maillage termine, les variables physiques ainsi que la variable d'intérêt doivent être transférées du maillage initial vers le maillage adapté. Premièrement, une technique de partitionnement de l'espace est utilisée pour pouvoir localiser efficacement

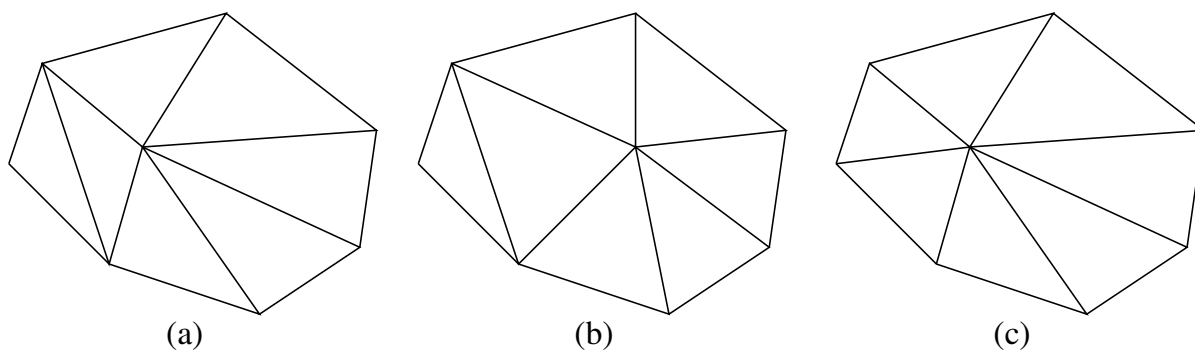


FIGURE 1.2 – Exemples de modifications du maillage en 2D : (a) patch d'éléments initial, (b) déplacement de nœud, (c) bascule d'arête. Image(s) issue(s) de la Référence [11].

l'élément du maillage initial contenant chaque nœud du nouveau maillage. Les valeurs des variables sont alors calculées à chaque nœud du nouveau maillage par interpolation EF depuis l'élément du maillage initial contenant ledit nœud.

Pour des maillages EF P2, c'est-à-dire quadratiques (avec des nœuds aux milieux des arêtes), la procédure est plus avancée car les algorithmes de remaillage ne sont compatibles qu'avec des simplexes linéaires. Les nœuds aux milieux des arêtes sont ainsi supprimés pour être rajoutés une fois le maillage optimisé. Cela préserve l'avantage de l'interpolation EF P2 pour l'interpolation du maillage initial vers le nouveau, mais empêche l'utilisation d'éléments iso-paramétriques qui pourraient être intéressants pour mailler expliciter les interfaces curvilignes.

Pour les variables définies aux points de quadrature, la technique de partitionnement de l'espace localise l'élément du maillage initial contenant chaque point de quadrature du nouveau maillage. Les valeurs des variables sont alors directement copiées depuis le point de quadrature le plus proche à l'intérieur de cet élément du maillage initial vers le point de quadrature du nouveau maillage, et ce sans interpolation ou lissage.

En conclusion, l'adaptation d'un maillage ne transparait pas comme une tâche aisée car elle nécessite la compréhension et l'implémentation de différentes théories mathématiques. Un estimateur d'erreur est indispensable pour définir un objectif de taille de maille à chaque point du domaine, objectif qui dans le cas de *FEMS* peut être défini par une métrique de remaillage anisotrope. Ensuite, ce champ tensoriel est fourni à un algorithme de remaillage qui opère des modifications locales sur la topologie du maillage et la position des nœuds afin d'optimiser un certain critère de qualité, qui dépend justement de cette métrique. Finalement, un algorithme de transfert des variables est nécessaire pour transférer chaque variable définie sur le maillage initial vers le maillage adapté.

Une fonctionnalité intéressante de *FEMS* est la possibilité d'utiliser une FDN comme variable d'intérêt afin d'adapter le maillage à une géométrie représentée implicitement. Cette représentation peut automatiquement être rendue explicite, comme présenté dans la suite.

1.1.2 Méthode de génération de maillage

L'idée de générer des maillages pour des géométries représentées implicitement à travers des FDNs a été proposée par divers auteurs [21, 32]. Cette idée est intéressante lorsqu'une fonction de distance signée peut-être définie analytiquement. C'est le cas pour les entités géométriques simples comme les cercles, les cylindres, les ellipsoïdes, les plans, les carrés et les combinaisons (unions, intersections, compléments). Les FDNs se prêtent particulièrement bien aux géométries

segmentées depuis des images 2D ou 3D acquises par microscopie optique ou électronique, ou par tomographie [17, 33].

Comme dans la Référence [17], la méthodologie implémentée dans *FEMS* requière une FDN en entrée. Celle-ci peut être définie analytiquement, par exemple à partir des coordonnées du centre d'une sphère et de son rayon. Pour une image 2D ou 3D déjà segmentée, la FDN peut être obtenue numériquement pour un coût de calcul linéaire par rapport au nombre de voxels [58]. Un coût aussi optimal ne peut être atteint pour des maillages non structurés [19, 33, 59].

Cette FDN est utilisée comme variable d'intérêt pour adapter le maillage, et ce à travers la métrique de remaillage isotrope basée sur les courbures principales définie dans les Équations (1.3) et (1.5). Selon le maillage initial, qui peut être n'importe quel maillage du domaine indépendamment de la FDN, cette adaptation du maillage doit généralement procéder en plusieurs itérations. La FDN, en effet, ainsi que l'estimateur d'erreur pourraient ne pas être bien représentés sur le maillage initial, et il faut donc améliorer cette discrétisation jusqu'à convergence (en 5 à 7 itérations en général [17]).

Après convergence, si la simulation requière un maillage EF explicite aux interfaces, le maillage surfacique de l'iso-contour zéro de la FDN peut être reconstruit soit avec une stratégie dite de *marching* [32], soit par une stratégie purement topologique [21]. La première parcourt chaque triangle ou tétraèdre et le sous-divise selon l'intersection entre cet élément et l'iso-contour zéro de la FDN. La seconde parcourt chaque arête du maillage et la brise si les valeurs de la FDN à ses extrémités ont des signes opposés, et ce en insérant un nouveau nœud à l'intersection entre l'arête et l'iso-contour zéro de la FDN. Les deux stratégies ont une complexité de calcul linéaire relativement au nombre de nœuds du maillage, mais la seconde a l'intérêt d'être plus simple à implémenter puisqu'elle ne requière que le calcul d'intersections avec des arêtes.

Une fois le maillage EF explicite construit, la FDN n'est plus nécessaire, si ce n'est pour une dernière étape d'adaptation du maillage. En effet, la qualité du maillage telle que définie par les Équations (1.12) ou (1.10) a de grandes chances d'être détériorée pendant la reconstruction du maillage surfacique de l'iso-contour zéro. Elle doit être restaurée en recourant une fois de plus à l'adaptation de maillage, ce qui nécessite un algorithme de remaillage préservant le maillage explicite d'interfaces internes. C'est le cas pour les deux algorithmes présentés dans le Paragraphe 1.1.1.2 (voir les Références [18, 32]).

1.1.3 Applications

J'ai pu explorer diverses applications exigeantes en termes de génération de maillage dans le cadre de mes travaux de recherche. Je reprends dans un premier temps un exemple démonstratif publié dans la Référence [11], puis des applications issues de projets collaboratifs visant à calculer des propriétés linéaires pour du calcul de structures ou d'écoulements. Je ne reprends volontairement pas dans cette partie des applications mêlant génération et adaptation de maillage pendant une simulation. Celles-ci sont détaillées dans la Section 1.2.

1.1.3.1 Exemple démonstratif

Ce premier cas d'application vise à montrer le principe de l'approche de génération de maillage. La géométrie pour ces simulations est basée sur l'image 2D montrée dans la Figure 1.3(a). La FDN représentant la surface des lettres est calculée en utilisant le logiciel *Fiji* [60] et est montrée dans la Figure 1.3(b,c).

Comme décrit dans la Sous-section 1.1.2, la métrique de remaillage utilisée pour la génération du maillage est celle des Équations (1.3) et (1.5), avec trois paramètres de remaillage h_c , h_{min} et h_{max} à prescrire. Dans la suite, des maillages EF avec interfaces explicites sont générés en projetant

la FDN basée sur l'image montrée dans la Figure 1.3(b,c) sur un maillage initial du domaine de calcul. Les paramètres h_{min} et h_{max} sont réglés respectivement à $4 \mu\text{m}$ et $32 \mu\text{m}$, tandis que le paramètre de contrôle h_c est varié afin de montrer son influence.

L'algorithme de remaillage de la première stratégie décrite dans le Paragraphe 1.1.1.2 est utilisé pour ces simulations. Afin de générer le maillage explicite aux interfaces, la stratégie basée sur le *marching* [32] est utilisée.

Comme décrit dans la Sous-section 1.1.2, la FDN basée sur l'image montrée dans la Figure 1.3(b,c) est d'abord interpolée vers un maillage EF structuré du domaine. Le résultat est montré dans la Figure 1.4(a,b). Une fois que la FDN est accessible aux noeuds de ce maillage EF, la métrique de remaillage peut être calculée et l'adaptation de maillage peut démarrer. Le résultat est présenté dans la Figure 1.4(c,d) pour $h_c = 0.128$.

La FDN est alors ré-interpolée puisqu'il est probable qu'elle soit mieux capturée et représentée sur le maillage adapté, et la métrique de remaillage est aussi re-calculée afin de ré-adapter le maillage. Le résultat après 8 cycles est présenté dans la Figure 1.5(a,b). Ces figures montrent comment le maillage est automatiquement raffiné dans les régions avec de grandes courbures principales maximales locales, notamment celles correspondant aux coins des lettres.

Finalement, ce maillage adapté est modifié avec le *marching* et ré-adapté afin de produire le maillage présenté dans la Figure 1.5(c,d). Ce maillage explicite final capture de manière précise toutes les spécificités de la géométrie, et en particulier la lettre *M* qui a trois régions avec des angles très nets.

La précision est bien sûr guidée par le choix des paramètres h_{min} et h_{max} , qui déterminent les bornes sur la taille de maille prescrite. Néanmoins, le paramètre de contrôle h_c a aussi une influence majeure sur la relation entre la courbure principale maximale locale et la taille de maille prescrite. Ceci est démontré dans la Figure 1.6(a,b) où ce paramètre a été réglé à $h_c = 0.256$, et dans la Figure 1.6(c,d) où il a été réglé à $h_c = 0.512$.

D'une part, lorsque h_c est trop grand, les courbures principales locales perdent leur influence et une taille de maille uniforme h_{max} est prescrite partout dans le domaine. D'autre part, lorsque h_c est trop petit, la taille h_{min} est prescrite partout. Il est donc important de choisir une valeur intermédiaire afin que les aspérités de la géométrie avec une forte courbure principale maximale soient bien capturées mais qu'une taille de maille plus large soit prescrite pour les régions avec une faible courbure principale maximale.

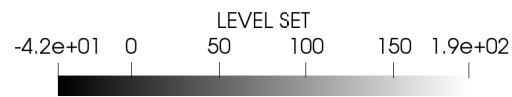
1.1.3.2 Calcul de propriétés élastiques

Dans le cadre du stage de fin d'études de Shahul Hameed N H en 2019, nous avons généré des maillages de composites textiles afin d'ensuite calculer des propriétés élastiques. Ce projet coordonné par Dmytro VASIUKOV du CERI MP était une collaboration avec Siemens Industry Software NV (Leuven, Belgique). L'objectif général du projet de stage était d'essayer différentes solutions de génération de géométries et de maillages EFs pour ces composites textiles.

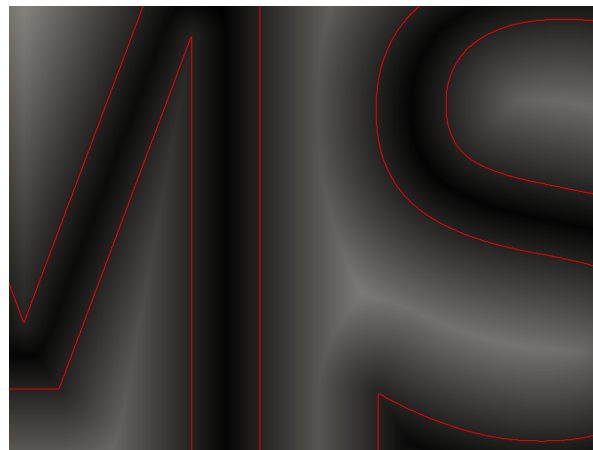
Ces matériaux sont composés d'un renfort et d'une matrice polymère. Le renfort est lui-même constitué d'une architecture de mèches de fibres longues. Ces fibres sont généralement en carbone ou en verre. Des exemples de structures en composite tissé sont montrés dans la Figure 1.7. Comme observé dans cette figure, bien que l'architecture textile soit en général constituée de mèches se rencontrant dans des directions orthogonales, la mise en forme de structures non-planes engendre des régions avec des mèches se rencontrant dans des directions non-orthogonales. Pour calculer les propriétés du matériau dans ces régions, il est nécessaire d'effectuer des calculs sur des Volumes Élémentaires Représentatifs (VERs) contenant des angles variés, comme illustré dans la Figure 1.8.



(a)



(b)



(c)

FIGURE 1.3 – Image *FEMS* utilisée pour les simulations de génération de maillage : (a) image de 1999×679 pixels, (b) FDN calculée sur l'image avec les distances exprimées en pixels, (c) zoom sur la FDN. Image(s) issue(s) de la Référence [11].

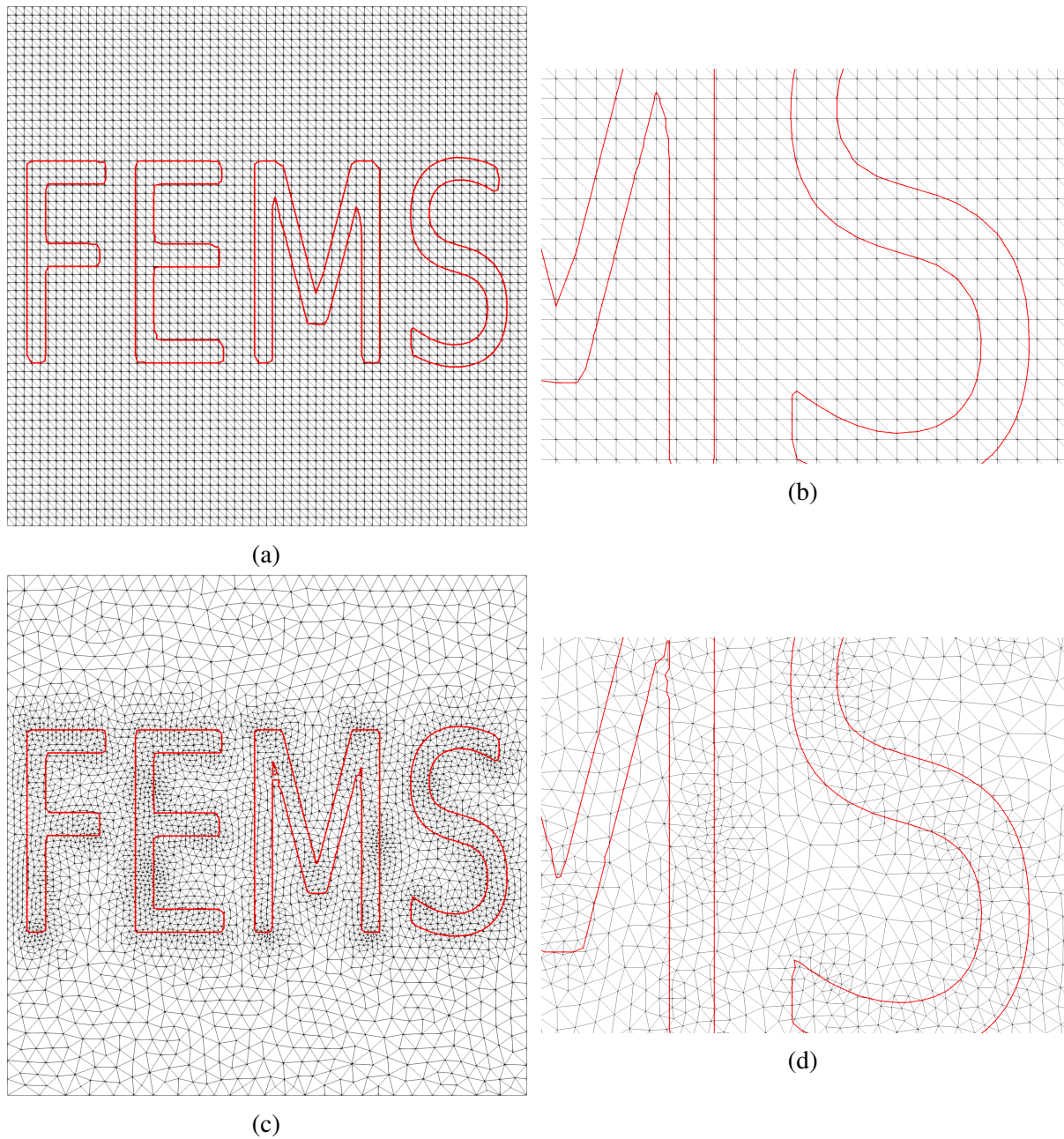


FIGURE 1.4 – Premières étapes de la génération de maillage pour l'image *FEMS* avec $h_c = 0.128$: (a,b) interpolation de la FDN de l'image vers un maillage structuré, (c,d) premier maillage adapté avec la métrique de remaillage isotrope basée sur les courbures principales. Image(s) issue(s) de la Référence [11].

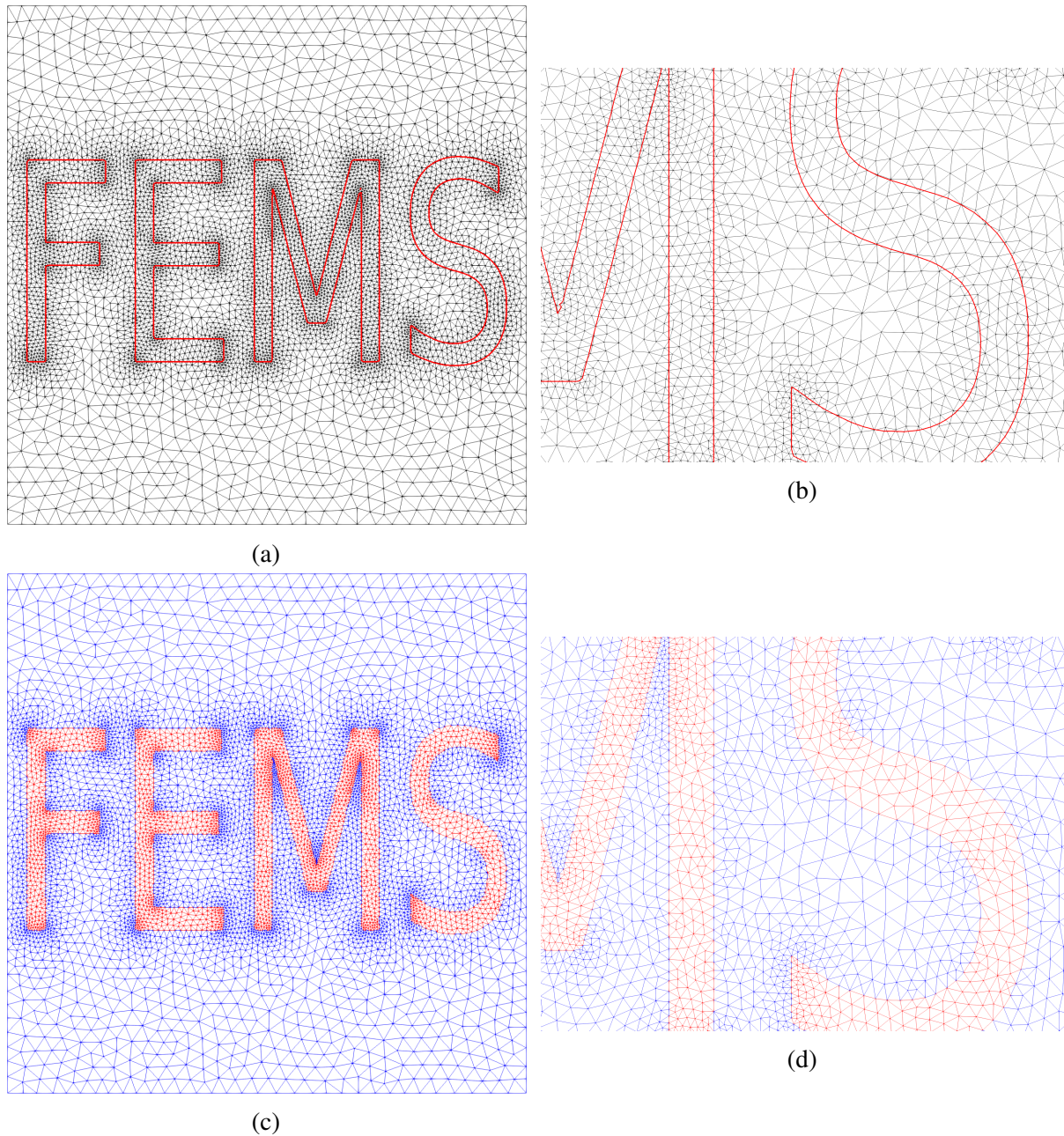


FIGURE 1.5 – Dernières étapes de la génération de maillage pour l’image *FEMS* avec $h_c = 0.128$: (a,b) maillage adapté huit fois avec la métrique de remaillage isotrope basée sur les courbures principales, (c,d) maillage final avec interfaces explicites. Image(s) issue(s) de la Référence [11].

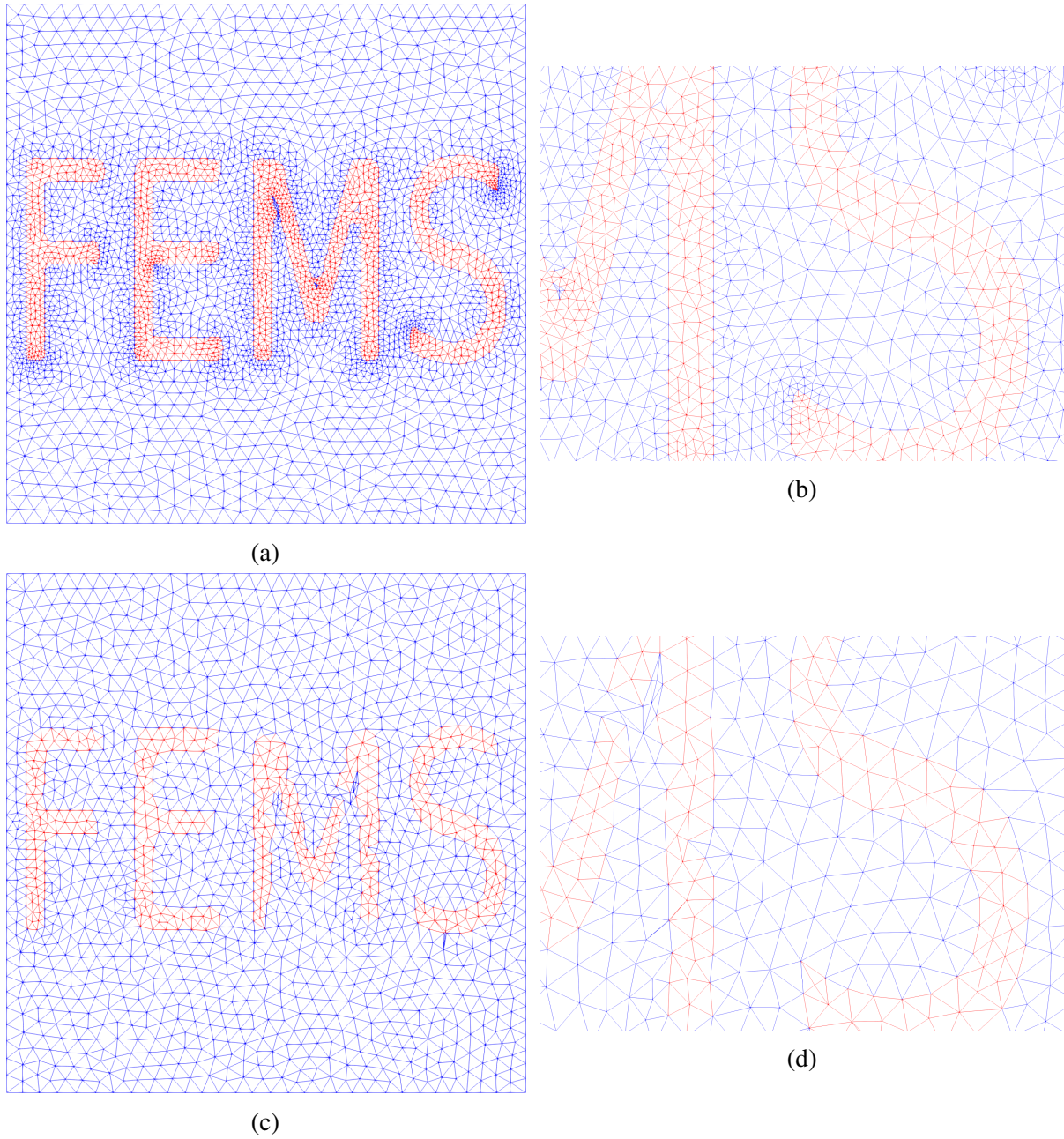


FIGURE 1.6 – Maillage finaux pour l'image *FEMS* avec : (a,b) $h_c = 0.256$, (c,d) $h_c = 0.512$. Image(s) issue(s) de la Référence [11].



FIGURE 1.7 – Exemples de structures en composite à renforts de fibres longues tissés avec localement des angles non-orthogonaux entre les mèches. Sources : www.frptitan.com, www.ptonline.com, www.compose-tools.com.

Le logiciel EFs *Siemens PLM Software* était utilisé pour le calcul des propriétés élastiques, et en particulier le *VMC Toolkit* de *Simcenter 3D*. Les alternatives qui ont été considérées pour générer les maillages EFs étaient :

- génération de la géométrie et d'un maillage EFs adapté aux interfaces avec le logiciel *VTMS*,
- génération de la géométrie et d'un maillage EFs adapté aux interfaces ou d'une image 3D avec le logiciel *WiseTex*,
- génération de la géométrie et d'un maillage EFs adapté aux interfaces ou d'une image 3D avec le logiciel *TexGen*,
- génération de la géométrie et d'une image 3D avec *TexGen*, puis génération d'un maillage EFs adapté aux interfaces avec *FEMS*,
- acquisition de la géométrie par tomographie sous forme d'une image 3D,
- acquisition de la géométrie par tomographie sous forme d'une image 3D, puis génération d'un maillage EFs adapté aux interfaces avec *FEMS*.

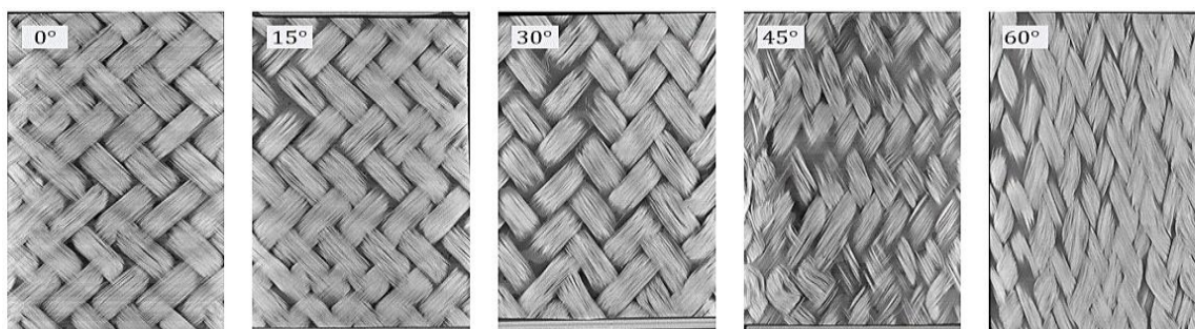


FIGURE 1.8 – Images acquises par tomographie de composites à renforts de fibres longues tissés avec différents angles entre les mèches.

Le calcul des propriétés élastiques fait intervenir un tenseur des rigidité anisotrope pour les mèches qui dépend des orientations locales des fibres. Il faut veiller à transférer ces orientations depuis le logiciel de génération ou l'image acquise par tomographie vers *Siemens PLM Software*. Le travail du stagiaire pour arriver à faire fonctionner tous les logiciels avec leurs formats d'entrée et de sortie bien spécifiques a donc été conséquent.

La plupart des combinaisons allant vers un maillage EFs conforme posent des problèmes de robustesse car il peut y avoir des inter-pénétrations ou des éléments de mauvaise qualité. Les combinaisons s'arrêtant à une image 3D et donc un maillage EFs voxélisé sont plus robustes de ce point de vue, mais elles impliquent des zones de concentration de contrainte artificielles purement dues à la discrétisation en zig-zag des interfaces.

La combinaison *TexGen+FEMS* est particulièrement intéressante, car elle permet d'augmenter arbitrairement la résolution de l'image 3D générée par *TexGen* pour décrire la géométrie plus finement. Comme montré dans la Figure 1.9, il est aussi possible de produire une image 3D déjà segmentée avec *TexGen*, où une couleur distincte est associée aux mèches dites *warp* et *weft*, voire même à chaque mèche. Cela permet ensuite de pouvoir identifier chaque mèche individuellement dans le maillage EFs avec interfaces explicites produit par *FEMS*. Cela évite les problèmes d'inter-pénétration puisque chaque élément du maillage est bien associé à une unique mèche ou à la matrice.

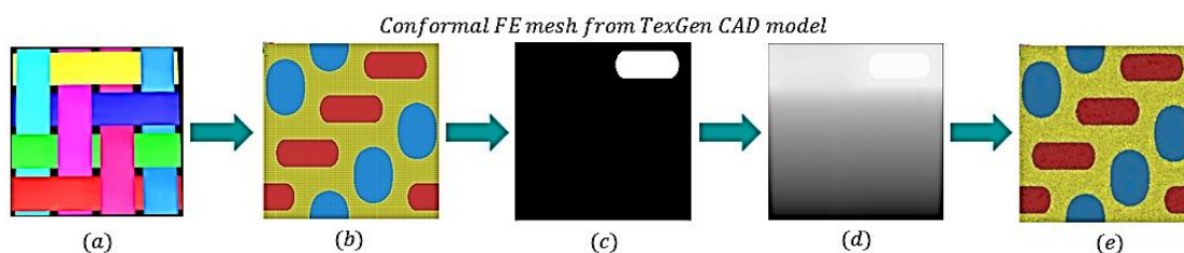


FIGURE 1.9 – Génération d'un maillage EFs conforme avec *FEMS* à partir d'une image 3D générée par *TexGen* : (a) géométrie générée par *TexGen*, (b) image 3D générée par *TexGen*, (c) image 3D pour une mèche, (d) FDN sur l'image 3D pour une mèche, (e) maillage EFs conforme généré par *FEMS*.

Un résultat de calcul avec un maillage généré par la combinaison *TexGen+FEMS* est montré dans la Figure 1.10, en comparaison avec un maillage *TexGen* purement voxélisé. L'effet de la voxélisation est clair dans la vue du dessus présentée dans cette figure. Il y a un effet *marches*

d'escalier dans le maillage voxélisé. La discrétisation des mèches est bien plus lisse dans le maillage généré par *FEMS*. Dans cette vue du dessus, il est par ailleurs aisé de voir que la discrétisation par *FEMS* permet de mieux distinguer les mèches et donc que les problèmes d'inter-pénétration sont correctement gérés.

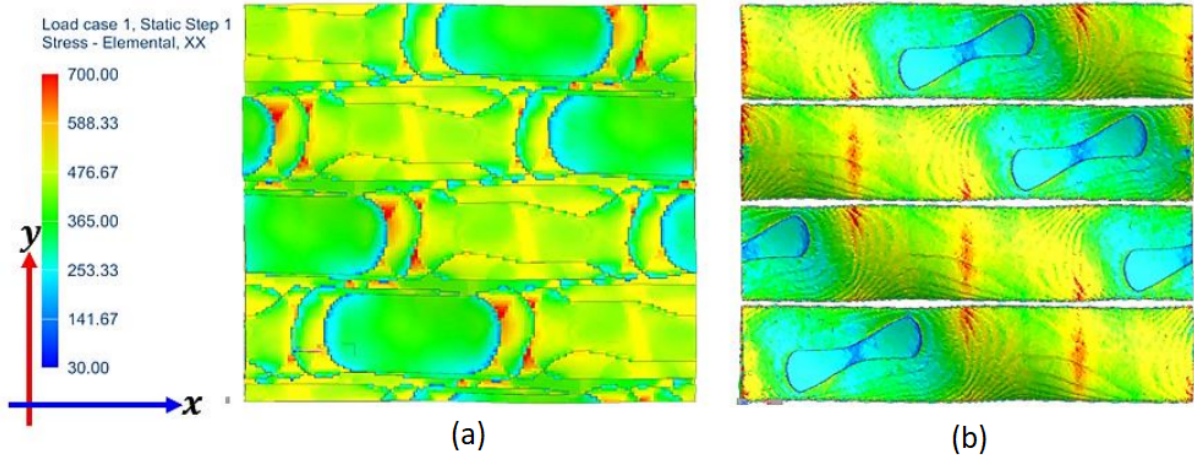


FIGURE 1.10 – Zones de concentration de la contrainte σ_{xx} lors d'une tension uniaxiale dans la direction horizontale avec des mèches orthogonales : (a) maillage voxélisé *TexGen*, (b) maillage adapté aux interfaces *TexGen+FEMS*. Seules les mèches *warp* sont montrées.

Des zones de concentration de contrainte artificielles sont observées dans le calcul avec le maillage voxélisé. Le même phénomène est visible pour un calcul avec mèches non-orthogonales comme montré dans la Figure 1.11. Ces zones artificielles dues à la discrétisation en zig-zag des interfaces ne sont pas présentes dans le maillage généré par *FEMS*.

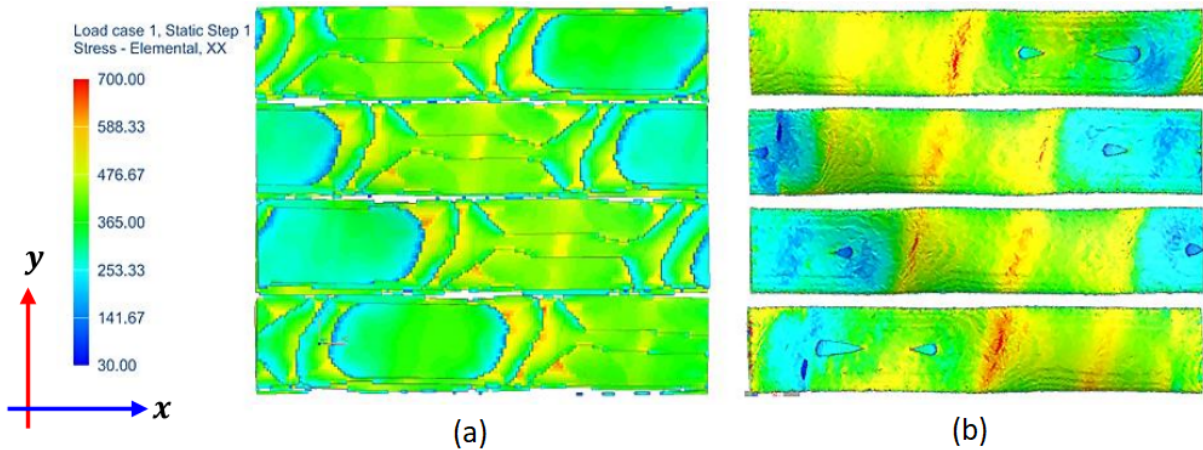


FIGURE 1.11 – Zones de concentration de la contrainte σ_{xx} lors d'une tension uniaxiale dans la direction horizontale avec des mèches non-orthogonales : (a) maillage voxélisé *TexGen*, (b) maillage adapté aux interfaces *TexGen+FEMS*. Seules les mèches *warp* sont montrées.

Dans le cas où l'image 3D est acquise par tomographie, nous n'avons pas pu dans ce travail aller jusqu'à distinguer chaque mèche, mais nous avons tout de même pu distinguer les mèches

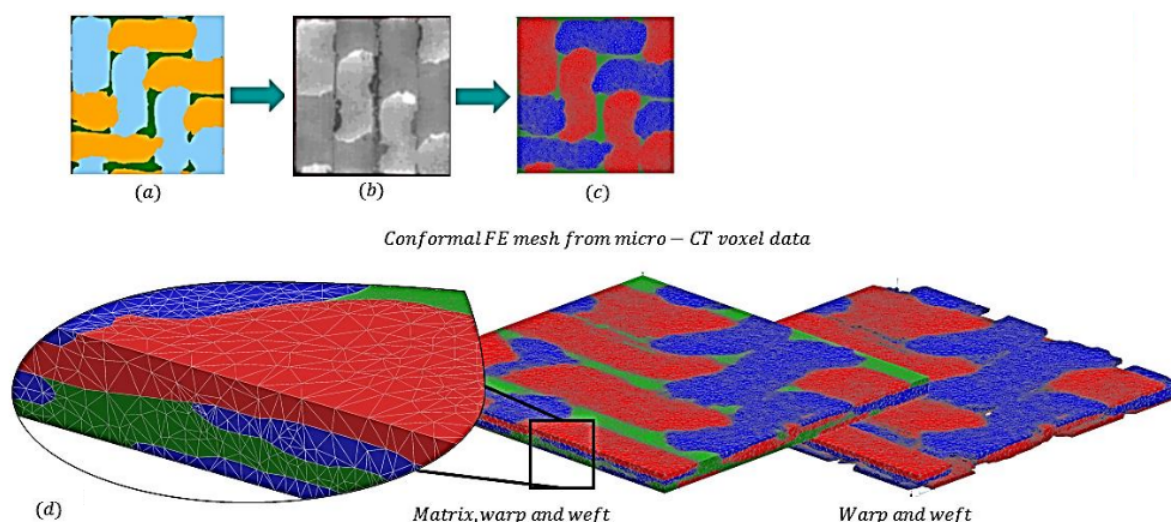


FIGURE 1.12 – Génération d'un maillage EFs conforme avec *FEMS* à partir d'une image 3D acquise par tomographie : (a) image 3D segmentée, (b) FDN sur l'image 3D pour l'une des deux catégories de mèches, (c,d) maillage EFs conforme généré par *FEMS*.

entre *warp* et *weft*. Cela est illustré dans la Figure 1.12.

Ces différents calculs avec différentes combinaisons de logiciels, différents types de maillages et différents angles entre les mèches ont montré que la solution avec *FEMS* est intéressante du point de vue de la robustesse et des champs de contraintes locaux. Néanmoins, cette solution sous-estime systématiquement la rigidité du matériau par rapport aux autres méthodes et aux mesures expérimentales. Cette différence légère ($< 10\%$) a été attribuée à une perte de volume de fibres dans cette méthode. Cela est dû notamment à l'étape de transfert entre l'image 3D et le maillage EFs, et aux diverses étapes de remaillage.

1.1.3.3 Calcul de perméabilité

Le premier cas d'application qui a motivé ces développements sur la génération de maillage EFs à partir d'images est issu du projet ANR/COMP3DRE auquel j'ai participé entre 2018 et 2021. Ce projet concernait le développement de composites textiles avec piquage et l'objectif de mes travaux était de calculer numériquement la perméabilité de ces composites à partir d'images 3D acquises par tomographie. Des images de composites textiles avec et sans piquage m'ont été fournies par Masoud BODAGHI, alors en post-doctorat. Il a également mesuré expérimentalement la perméabilité de ces composites [61].

Le pas de piquage était assez grand, ce qui rendait difficile de scanner par tomographie un volume assez grand pour y trouver plusieurs piquages et assez petit pour avoir une bonne résolution. Par conséquent, la segmentation était d'assez mauvaise qualité (il y avait par exemple des voxels non-mèche à l'intérieur des mèches dans les images segmentées). Il était par ailleurs impossible pour le post-doctorant de segmenter le fil de piquage à part, ou même de distinguer *warp* et *weft* correctement. La génération de maillages EFs avec des interfaces explicites et des éléments de bonne qualité était ainsi particulièrement difficile pour ces images.

Les maillages générés pour ce projet sont montrés dans la Figure 1.13. Les maillages (a,b) correspondent à de petits volumes où une taille de maille $h_{min} = 1 \mu\text{m}$ peut être utilisée et les maillages (c,d) à de plus grands volumes où $h_{min} = 2 \mu\text{m}$. Il y a environ 500,000 éléments pour (a,b), et 1,000,000 pour (c,d).

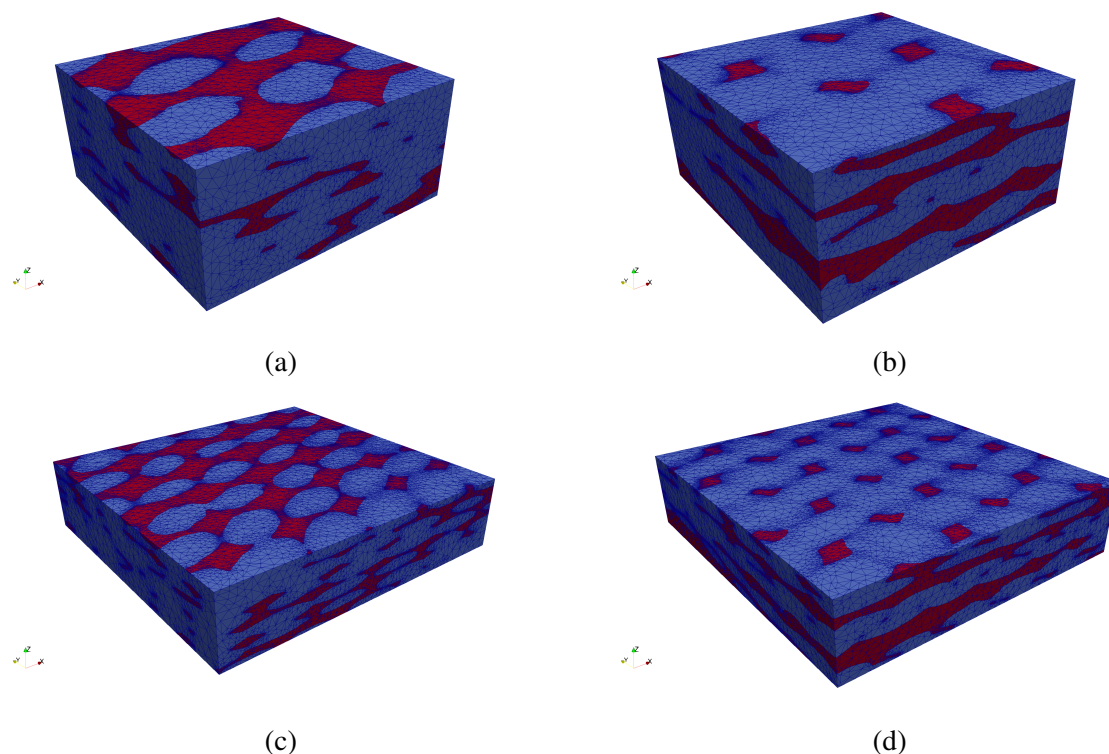


FIGURE 1.13 – Maillages utilisés dans le projet ANR/COMP3DRE : (a) petit domaine sans piquage, (b) petit domaine avec piquage, (c) grand domaine sans piquage, (d) grand domaine avec piquage. La hauteur du VER (direction z) est d'environ 1 mm pour chaque domaine.

Pour ce projet, mon travail consistait non seulement à générer les maillages EFs, mais aussi à calculer les perméabilités. Pour cela, j'ai développé une méthode de résolution de type Stokes-Brinkman dans *FEMS*. Il eût été assez simple de supprimer les mèches du domaine et d'effectuer une résolution de type Stokes en imposant une vitesse nulle aux bords des mèches. En pratique, ce genre de résolution ne convergeait pas. J'ai donc introduit le terme de Brinkman afin de régulariser la transition entre les mèches, considérées imperméables, et le reste du domaine. Les conditions aux limites utilisées pour ces calculs sont issues de l'approche multi-échelle avec multiplicateurs de Lagrange présentée dans la Section 4.2. Les éléments finis utilisés sont de type Taylor-Hood P2/P1, c'est-à-dire avec une interpolation quadratique pour la vitesse et linéaire pour la pression.

Étant donné la taille conséquente des maillages utilisés, ces calculs n'ont été rendus possibles que par la parallélisation de *FEMS* en mémoire distribuée, qui est abordée dans la Section 1.3. Ce projet a donc pu bénéficier de plusieurs de mes travaux de recherche, et aussi leur apporter une motivation supplémentaire.

Une équipe internationale de chercheurs travaillant sur les procédés de mise en œuvre des composites à fibres longues a récemment mis en place un exercice d'évaluation des méthodes de caractérisation de la perméabilité. Suite à un volet expérimental réalisé avec succès par cette équipe [62], j'ai été invité à participer au volet numérique. Comme détaillé dans les Refs. [5, 63], il s'agit de calculer numériquement la perméabilité d'un matériau à partir d'une image 3D acquise par tomographie, et fournie déjà segmentée.

L'objectif est d'évaluer l'influence des conditions aux limites, du type de résolution (Stokes,

Navier-Stokes, Stokes-Brinkman, etc.) et de la méthode numérique (volumes finis, EFs, etc.). L'image est aussi fournie sous forme non-segmentée afin d'évaluer l'influence de la méthode de segmentation. J'ai pour l'instant pu participer à une première étape, qui concerne un composite à fibres longues unidirectionnelles, pour lequel j'ai choisi d'effectuer les calculs en 2D en choisissant 10 sections le long des fibres.

Les résultats pour une section sont montrés dans la Figure 1.14(a). Le zoom présenté dans la Figure 1.14(c) montre que la forme circulaire des fibres n'est pas bien décrite. Cela ne provient pas de la méthode de génération de maillage mais de la pauvre résolution de l'image segmentée fournie par les organisateurs. Les méthodes de segmentation utilisées pour les composites à fibres longues unidirectionnelles sont en réalité bien particulières puisqu'il est possible de s'appuyer sur le fait que la forme des fibres est connue, notamment lorsque leur section est circulaire. C'est le cas pour la méthode utilisée par les organisateurs, et aussi pour la méthode développée par Keerthi Krishna PARVATHANENI [64], un doctorant du CERI MP. Les organisateurs ont néanmoins choisi de re-projeter ces formes circulaires sur une image 3D. Avec Keerthi Krishna PARVATHANENI, nous avons choisi de segmenter les images brutes fournies par les organisateurs et d'exploiter directement les résultats sous forme paramétrique (centres et rayons des cercles pour chaque section). Cela m'a permis de générer des maillages de bien meilleure qualité, notamment aux bords des fibres, comme montré dans la Figure 1.14(b,d). Cela permet d'illustrer un autre avantage de la méthode de génération de maillage développée : la géométrie peut être fournie sous diverses formes (image, paramétrisation, etc.) tant qu'une FDN peut être obtenue.

En complément des travaux présentés au Paragraphe 1.1.3.2, ces études sur la perméabilité ont permis de montrer que mes travaux de recherche sur la génération de maillage sont concluants. Les maillages générés en 2D comme en 3D sont en effet utilisables pour calculer des propriétés linéaires pour des problèmes de calcul de structures tout comme pour des problèmes d'écoulement.

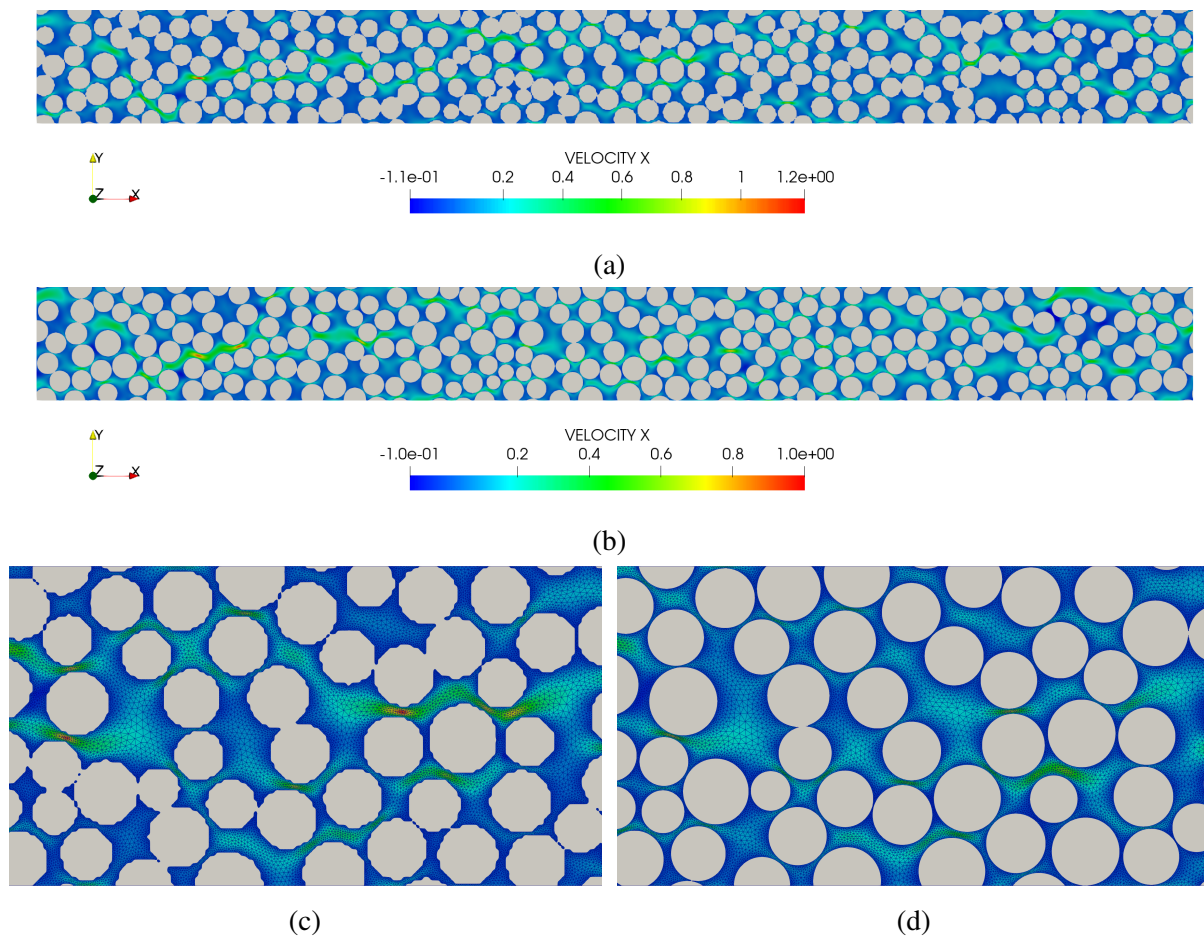


FIGURE 1.14 – Écoulement avec la vitesse (mm s^{-1}) dans la direction horizontale pour une section de l'image d'exercice de calcul de perméabilité : (a) à partir de l'image déjà segmentée, (b) à partir de l'image segmentée par nos moyens, (c) zoom sur (a) montrant le maillage autour des fibres, (d) zoom sur (b) montrant le maillage autour des fibres. La hauteur du VER (direction y) est d'environ $50 \mu\text{m}$ et le gradient de pression est appliqué dans la direction x .

1.2 Simulation des écoulements biphasés

Cette Section repose essentiellement sur des travaux publiés dans la Référence [9].

Le calcul de perméabilité présenté dans le Paragraphe 1.1.3.3 est une première étape incontournable pour la simulation de la mise en œuvre des composites à matrice polymère, notamment pour les procédés de moulage par transfert de résine. Dans ces procédés, la résine avance progressivement à travers le moule et est freinée dans sa progression par la présence du renfort. Une mauvaise imprégnation peut mener à la formation de bulles qui peuvent rester piégées et détériorer fortement les propriétés finales des structures composites [2, 3, 65].

Pour prédire la formation des bulles et modéliser leur effet sur les propriétés finales, la simulation de l'interaction du front de résine avec la mésostructure et la microstructure des renforts est indispensable. Pour cela, la seconde étape est le développement d'une approche numérique permettant de modéliser des écoulements biphasés en présence d'obstacles.

Les équations modélisant ces écoulements sont rappelées en Sous-section 1.2.1. La méthode numérique que j'ai développée est détaillée en Sous-section 1.2.2. Quelques résultats sont présentés en Sous-section 1.2.3.

1.2.1 Modèle

Le domaine de calcul $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, $d = 2, 3$ est dans cette partie séparé en deux sous-domaines Ω_1 et Ω_2 , avec $\Omega_1 \cup \Omega_2 = \Omega$ et $\Omega_1 \cap \Omega_2 = \Gamma_{1,2}$. Ces deux sous-domaines et l'interface $\Gamma_{1,2}$ les séparant évoluent dans le temps : $\Omega_1 = \Omega_1(t)$, $\Omega_2 = \Omega_2(t)$ et $\Gamma_{1,2} = \Gamma_{1,2}(t)$. Une FDN ϕ est définie d'après l'Équation (1.4) pour représenter implicitement l'interface. Son évolution est décrite par l'équation d'advection

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \phi = 0 \quad (1.14)$$

où \mathbf{v} est le vecteur vitesse d'écoulement. Cette vitesse est obtenue en résolvant les équations de Navier-Stokes modélisant l'écoulement incompressible et isotherme de deux fluides Newtoniens avec tension de surface :

$$\begin{cases} \rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right) - \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{v}, p) - \mathbf{f}_g + \mathbf{f}_s = \mathbf{0}, \\ \nabla \cdot \mathbf{v} = 0. \end{cases} \quad (1.15)$$

Ces équations sont accompagnées par des conditions aux limites qui dépendent du problème à résoudre. Dans ces équations p est la pression, ρ la masse volumique et μ la viscosité dynamique. Le tenseur des contraintes de Cauchy $\boldsymbol{\sigma}$ est défini par

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{v}, p) = \mu(\nabla \mathbf{v} + \nabla^T \mathbf{v}) - p\mathbf{I}, \quad (1.16)$$

où \mathbf{I} est la matrice identité. La force $\mathbf{f}_g = -\rho g \mathbf{e}_y$ est la force de gravité, avec g l'accélération gravitationnelle. La force \mathbf{f}_s est la force de tension de surface et est modélisée comme une force de surface continue [41] :

$$\mathbf{f}_s = \sigma_s \kappa_s \nabla H, \quad (1.17)$$

avec σ_s le coefficient de tension de surface, κ_s la courbure moyenne de l'interface et H la fonction de Heaviside donnée par

$$H(\phi) = \begin{cases} 1, & \phi > 0, \\ \frac{1}{2}, & \phi = 0, \\ 0, & \phi < 0. \end{cases} \quad (1.18)$$

Comme proposé dans la Référence [66], cette fonction de Heaviside est aussi utilisée pour déterminer les propriétés d'écoulement dans l'Équation (1.15) :

$$\begin{aligned}\rho(\mathbf{x}, t) &= \rho(\phi(\mathbf{x}, t)) = H(\phi(\mathbf{x}, t))\rho_1 + (1 - H(\phi(\mathbf{x}, t)))\rho_2 \\ \mu(\mathbf{x}, t) &= \mu(\phi(\mathbf{x}, t)) = H(\phi(\mathbf{x}, t))\mu_1 + (1 - H(\phi(\mathbf{x}, t)))\mu_2\end{aligned}\quad (1.19)$$

où ρ_1, ρ_2 et μ_1, μ_2 sont les masses volumiques et les viscosités de chaque fluide, respectivement. Les propriétés géométriques comme le vecteur normal à l'interface ou la courbure moyenne sont calculées directement depuis la FDN en utilisant les formules

$$\mathbf{n}_s = \mathbf{n}_s(\phi) = \frac{\nabla\phi}{|\nabla\phi|}, \kappa_s = \kappa_s(\phi) = -\nabla \cdot \mathbf{n}_s(\phi) = \frac{\nabla\phi \cdot \nabla\nabla\phi \cdot \nabla\phi - |\nabla\phi|^2 \text{tr}(\nabla\nabla\phi)}{|\nabla\phi|^3}, \quad (1.20)$$

où $\nabla\nabla\phi$ est la matrice Hessienne de ϕ et $|\cdot|$ est la norme Euclidienne. En raison de la convention de signe choisie pour ϕ dans l'Équation (1.4), le vecteur normal est dirigé vers le fluide 1, ce qui signifie que celui-ci est liquide et que le fluide 2 est gazeux.

En outre, ce problème couplé vitesse-pression-FDN est non linéaire à cause de l'auto-advection, de la tension de surface et de la fonction de Heaviside qui intervient dans la définition des propriétés d'écoulement. Cela rajoute à la complexité de la méthode numérique utilisée pour résoudre ces équations.

1.2.2 Méthode numérique

La première étape dans l'implémentation numérique des équations de la Sous-section 1.2.1 concerne la fonction Heaviside de l'Équation (1.18). Celle-ci est discontinue. Il est possible d'enrichir la méthode EFs afin de gérer cette discontinuité [67]. L'approche alternative proposée dans la littérature consiste à régulariser cette discontinuité et à compenser la perte de précision corollaire en raffinant le maillage à l'interface. Cela permet d'éviter toute modification des fonctions de forme EFs. La fonction de Heaviside régularisée est donnée par

$$H_\epsilon(\phi) = \begin{cases} 1, & \phi > \epsilon, \\ \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\phi}{\epsilon} + \frac{1}{\pi} \sin\left(\frac{\pi\phi}{\epsilon}\right) \right), & |\phi| \leq \epsilon, \\ 0, & \phi < -\epsilon. \end{cases} \quad (1.21)$$

Puisque la fonction de Heaviside intervient dans le calcul des propriétés d'écoulement (Équation (1.19)), le paramètre ϵ définit la demi-épaisseur de la couche de transition entre les deux fluides. Cette couche doit être aussi fine que possible pour se rapprocher d'une transition discontinue, mais une approximation précise de la fonction de Heaviside régularisée n'est possible que si cette couche est assez large par rapport à la taille de maille h . Il est ainsi nécessaire de se restreindre à $\epsilon > h$ pour des EFs linéaires (P1) et $\epsilon > \frac{h}{2}$ pour des EFs quadratiques (P2) [68].

La deuxième étape est le choix de l'interpolation EF en vue d'approximer la force de tension de surface définie par l'Équation (1.17). Une interpolation quadratique pour la FDN ϕ est particulièrement intéressante pour le calcul de la courbure moyenne dans l'Équation (1.17), qui nécessite les dérivées secondes de la FDN. Cela permet également d'améliorer la conservation de la masse et de l'énergie [68].

Un tel choix pose néanmoins une restriction non négligeable sur l'interpolation utilisée pour le champ de pression p . En effet, il est essentiel que la discrétisation de la force de tension de surface soit équilibrée par rapport à celle utilisée pour la pression [45]. Ainsi, la discrétisation

utilisée pour le terme ∇H_ϵ dans l'Équation (1.17) doit être la même que celle utilisée pour le terme ∇p dans l'Équation (1.15). La solution la plus simple si une interpolation P2 est utilisée pour la FDN est d'utiliser la même interpolation pour la pression.

Là aussi, ce choix n'est pas sans conséquences. De fait, la condition inf-sup impose que l'ordre de l'interpolation utilisée pour le champ de vitesse soit strictement supérieur à celui de l'interpolation utilisée pour le champ de pression. Cette restriction peut être allégée par une stabilisation adéquate. Une même interpolation quadratique peut être utilisée pour les trois champs en se reposant sur une stabilisation Variationnelle Multi-Échelle Basée sur les Résidus (VMEBR) [69]. Les détails de la formulation VMEBR du problème d'écoulement biphasé avec les termes de stabilisation peuvent être trouvés dans la Référence [9]. Cette formulation est résolue simultanément pour les trois champs vitesse-pression-FDN avec un schéma temporel de type Euler implicite et donc un couplage fort entre les Équations (1.14) et (1.15). Un algorithme de Newton-Raphson avec différentiation automatique est utilisé pour résoudre les termes non linéaires, et le pas de temps est automatiquement réduit lorsque la résolution non linéaire peine à converger [9].

Comme mentionné précédemment, le lissage de la transition des propriétés entre les deux fluides et de la force de tension de surface implique une discrétisation assez fine près de l'interface. Pour satisfaire cet objectif tout en maintenant un coût de calcul raisonnable pendant la simulation, la métrique de remaillage de l'Équation (1.9) est utilisée avec une variable d'intérêt $s_h = (H_\epsilon(\phi_h^n), H_\epsilon(2\phi_h^n - \phi_h^{n-1}))$, où ϕ_h^n est la FDN au début d'un incrément de temps (avant la résolution par l'algorithme de Newton-Raphson) et $2\phi_h^n - \phi_h^{n-1}$ est une extrapolation de ϕ_h^{n+1} . Cette adaptation de maillage est déclenchée à chaque début d'incrément.

La métrique de remaillage ainsi que la définition de la fonction de Heaviside régularisée dans l'Équation (1.21) et celle de la force de tension de surface dans l'Équation (1.17) dépendent d'une propriété essentielle de la FDN, qui est celle de distance. Pendant l'advection de la FDN, cette propriété est généralement perdue et il faut donc la restaurer. Cela se fait par une opération dite de ré-initialisation ou re-distanciation de la FDN. Une approche directe ou géométrique consistant à projeter chaque nœud du maillage EF vers une reconstruction de l'interface sous forme de maillage surfacique a été implémentée dans ce travail [9, 68]. Cette opération est déclenchée à chaque incrément de temps, juste après l'adaptation de maillage.

1.2.3 Résultats

Un exemple de simulation statique permettant de vérifier l'équilibre de la discrétisation de la force de tension de surface par rapport au champ de pression peut être trouvé dans la Référence [9]. La précision de la solution obtenue est du même ordre que la tolérance utilisée pour l'algorithme de Newton-Raphson lorsque la courbure moyenne est calculée analytiquement. Cela montre l'intérêt de l'interpolation quadratique équilibrée avec stabilisation VMEBR.

Les résultats inclus dans cette partie correspondent à des simulations dynamiques où toutes les composantes de la méthode numérique sont éprouvées. Les premiers exemples présentés dans le Paragraphe 1.2.3.1 sont basés sur un exercice d'évaluation des méthodes numériques de modélisation des écoulements biphasés avec tension de surface et permettent de situer la méthode proposée par rapport à la littérature [48]. L'application de cette méthode aux procédés de moulage par transfert de résine a soulevé une problématique spécifique aux écoulements à faible nombre capillaire. Cette problématique a été étudiée avec une approche alternative basée sur un maillage Lagrangien. Les résultats de cette étude sont présentés dans le Paragraphe 1.2.3.2. Un exemple de simulation faisant intervenir la génération d'un maillage à partir d'une image et un écoulement biphasé avec obstacle est finalement présenté dans le Paragraphe 1.2.3.3.

1.2.3.1 Montée de bulle

L'exercice d'évaluation conduit dans la Référence [48] repose sur la simulation de la montée d'une bulle dans un domaine 2D, comme illustré dans la Figure 1.15.

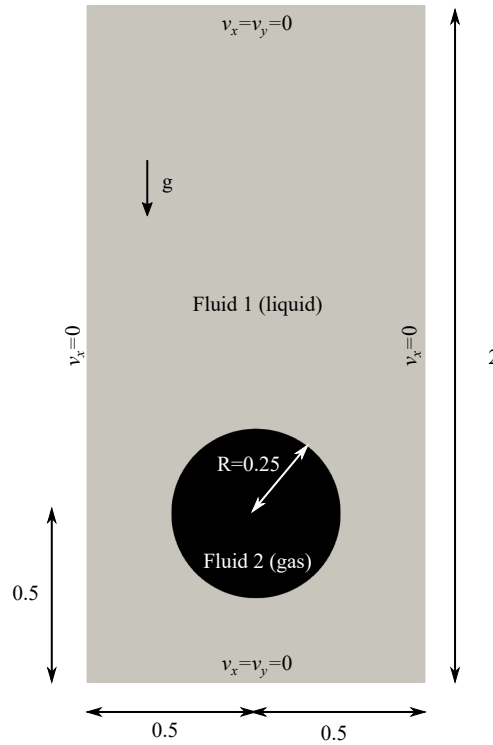


FIGURE 1.15 – Domaine et conditions aux limites pour les simulations de montée de bulle. Image(s) issue(s) de la Référence [9].

Deux cas correspondant à deux jeux de propriétés d'écoulement adimensionnelles sont définis :

- Dans le cas 1, $\rho_1 = 1000$, $\rho_2 = 100$, $\mu_1 = 10$, $\mu_2 = 1$, $g = 0.98$ et $\sigma_s = 24.5$.
- Dans le cas 2, $\rho_1 = 1000$, $\rho_2 = 1$, $\mu_1 = 10$, $\mu_2 = 0.1$, $g = 0.98$ et $\sigma_s = 1.96$.

Dans les deux cas, le nombre de Reynolds est de $Re=35$. Le nombre de Eötvös est de $Eo=10$ dans le cas 1 et de $Eo=125$ dans le cas 2. Les définitions de ces nombres caractéristiques pour ces simulations peuvent être trouvées dans la Référence [48].

Des simulations avec ou sans adaptation de maillage et avec différentes discrétisations sont conduites. Les maillages non-adaptatifs sont des triangulations uniformes et isotropes. Le nombre de degrés de libertés vitesse-pression-FDN à résoudre est noté NDOF, le nombre d'éléments du maillage EFs est noté NEL et le nombre d'incrément de temps est noté NTS. Pour les simulations avec maillage adaptatif, des valeurs moyennes sont calculées pour NEL et NDOF. Étant donné qu'un maillage plus fin permet d'utiliser une demi-épaisseur ϵ plus petite pour la couche de transition, la valeur de ϵ est variée en fonction de NDOF.

Pour chaque simulation, les quantités calculées et surveillées sont la surface de la bulle V_b , la hauteur de son centre de gravité y_b et sa vitesse de montée v_b . Ces quantités peuvent être calculées à l'aide de la fonction de Heaviside avec les formules suivantes :

$$V_b(t) = \int_{\Omega} H(-\phi(\mathbf{x}, t)) d\Omega,$$

$$y_b(t) = \frac{\int_{\Omega} H(-\phi(\mathbf{x}, t)) \mathbf{x} d\Omega}{V_b(t)} \cdot \mathbf{e}_y,$$

$$v_b(t) = \frac{\int_{\Omega} H(-\phi(\mathbf{x}, t)) \mathbf{v}(t) d\Omega}{V_b(t)} \cdot \mathbf{e}_y.$$

Il est ensuite possible de calculer l'erreur relative en norme L^2 intégrée sur toute la durée de la simulation :

$$\text{Erreur}(q) = \sqrt{\frac{\int_0^T (q(t) - q_{ref}(t))^2 dt}{\int_0^T (q_{ref}(t))^2 dt}},$$

où $T = 3$ et $q = V_b, y_b$, ou v_b . La solution de référence q_{ref} est πR^2 en ce qui concerne la surface de la bulle (l'écoulement est incompressible) et correspond à une solution numérique de référence pour les deux autres quantités. Cette référence est systématiquement la simulation donnant le résultat le plus précis quant à la surface de la bulle.

Un exemple de résultat avec adaptation de maillage anisotrope est montré dans la Figure 1.16. La bulle devient presque elliptique dans ce cas, avec un côté inférieur plutôt plat. La Figure 1.16 montre bien l'intérêt de l'adaptation de maillage anisotrope, qui permet d'aplatir et d'étirer les éléments lorsque les dérivées troisièmes de la FDN sont proches de zéro afin de privilégier les zones où ces dérivées sont plus intenses.

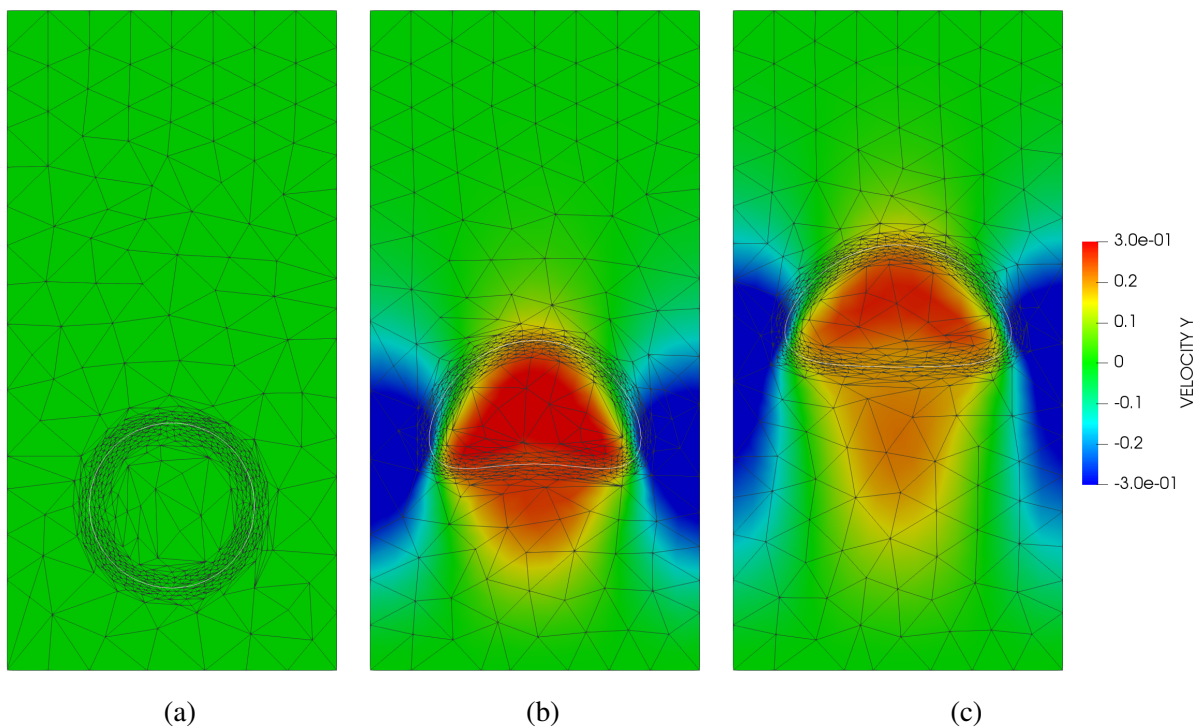


FIGURE 1.16 – Champ de vitesse de montée $\mathbf{v} \cdot \mathbf{e}_y$ pour les simulations de montée de bulle du cas 1 avec un maillage adaptatif, NDOF ≈ 11500 et NTS = 407 à : (a) $t = 0$, (b) $t = 1.5$, (c) $t = 3.0$. Image(s) issue(s) de la Référence [9].

Les erreurs pour le cas 1 sont rapportées dans la Table 1.1. Le nombre d'incrément de temps est bien plus grand que celui prévu initialement pour certaines simulations. Cela s'explique par la

difficulté de convergence de l’algorithme de Newton-Raphson pour ces simulations et donc une réduction automatique du pas de temps pour l’amener à converger. Le résultat avec le maillage 80×160 et un NTS prescrit à 100 n’est notamment pas rapporté dans la Table 1.1 car le NTS réel s’approchait plutôt de 200.

Une très bonne conservation de la surface de la bulle est observée dans toutes les simulations grâce à l’interpolation quadratique utilisée pour la FDN. Cette conservation est encore meilleure avec un maillage adaptatif. Par exemple, la simulation avec $NDOF \approx 6000$ et $NTS = 400$ mène à de meilleurs résultats que toutes les simulations avec maillage non-adaptatif pour le même NTS. Le facteur de réduction en termes de NDOF est d’environ 35.

L’ensemble de ces résultats pour le cas 1 correspond bien avec ceux présentés dans la Référence [48], notamment en ce qui concerne l’évolution de y_b et v_b , et la forme finale de la bulle [9].

Maillage	20×40	40×80	80×160	Adaptatif	Adaptatif	Adaptatif
ϵ	0.1	0.05	0.025	0.05	0.025	0.0125
NEL	1,600	6,400	25,600	≈ 740	$\approx 1,400$	$\approx 2,800$
NDOF	12,962	51,522	205,442	$\approx 6,000$	$\approx 11,500$	$\approx 23,000$
NTS	102	100		100	104	165
Erreur(V_b)	5.45×10^{-2}	4.79×10^{-2}		4.89×10^{-2}	4.68×10^{-2}	4.32×10^{-2}
Erreur(y_b)	4.45×10^{-3}	2.46×10^{-3}		2.13×10^{-3}	1.81×10^{-3}	3.41×10^{-3}
Erreur(v_b)	8.05×10^{-2}	3.01×10^{-2}		2.74×10^{-2}	1.74×10^{-2}	1.62×10^{-2}
NTS	207	200	200	200	204	261
Erreur(V_b)	3.30×10^{-2}	2.40×10^{-2}	2.33×10^{-2}	2.05×10^{-2}	2.13×10^{-2}	2.14×10^{-2}
Erreur(y_b)	4.89×10^{-3}	2.51×10^{-3}	1.95×10^{-3}	2.99×10^{-3}	7.48×10^{-4}	1.32×10^{-3}
Erreur(v_b)	7.64×10^{-2}	2.44×10^{-2}	1.37×10^{-2}	2.38×10^{-2}	9.25×10^{-3}	9.59×10^{-3}
NTS	406	400	400	400	407	463
Erreur(V_b)	2.71×10^{-2}	1.06×10^{-2}	1.10×10^{-2}	2.25×10^{-3}	6.18×10^{-3}	8.22×10^{-3}
Erreur(y_b)	7.45×10^{-3}	2.24×10^{-3}	1.85×10^{-3}	1.52×10^{-3}	4.51×10^{-4}	1.86×10^{-3}
Erreur(v_b)	8.39×10^{-2}	2.12×10^{-2}	1.05×10^{-2}	1.60×10^{-2}	5.07×10^{-3}	8.04×10^{-3}
NTS	802	800	800	800	804	880
Erreur(V_b)	3.10×10^{-2}	1.99×10^{-3}	3.92×10^{-3}	2.11×10^{-2}	7.17×10^{-3}	1.67×10^{-3}
Erreur(y_b)	1.03×10^{-2}	9.72×10^{-4}	2.05×10^{-3}	1.49×10^{-3}	9.10×10^{-4}	
Erreur(v_b)	7.80×10^{-2}	1.71×10^{-2}	9.20×10^{-3}	1.48×10^{-2}	7.09×10^{-3}	

TABLE 1.1 – Erreurs relatives en norme L^2 pour les simulations de montée de bulle du cas 1 avec différentes discrétisations temporelles et spatiales, et avec ou sans adaptation de maillage.

Un exemple de résultat pour le cas 2 est montré dans la Figure 1.17. Cette fois-ci de fins filaments de gaz se forment aux extrémités latérales de la bulle et s’étirent progressivement tandis que la forme du corps principal de la bulle reste la même que dans le cas 1. Comme détaillé dans la Référence [9], les simulations avec un maillage plus fin et donc une valeur de ϵ prédisent des filaments plus fins, mais sans rupture. Les différentes méthodes numériques évaluées dans la Référence [48] n’ont pas toutes mené au même résultat pour le cas 2. Certaines prédisaient une rupture des filaments et d’autres non. Les résultats obtenus dans ce travail se rapprochent de ceux obtenus avec les méthodes les plus performantes en termes de conservation de la masse.

Une étude des temps de calcul s’avère intéressante pour ces simulations du cas 2. Comme détaillé dans la Référence [9], la résolution de la formulation VMEBR avec couplage fort occupe la grande majorité du temps de calcul. L’adaptation de maillage vient en deuxième position, avec

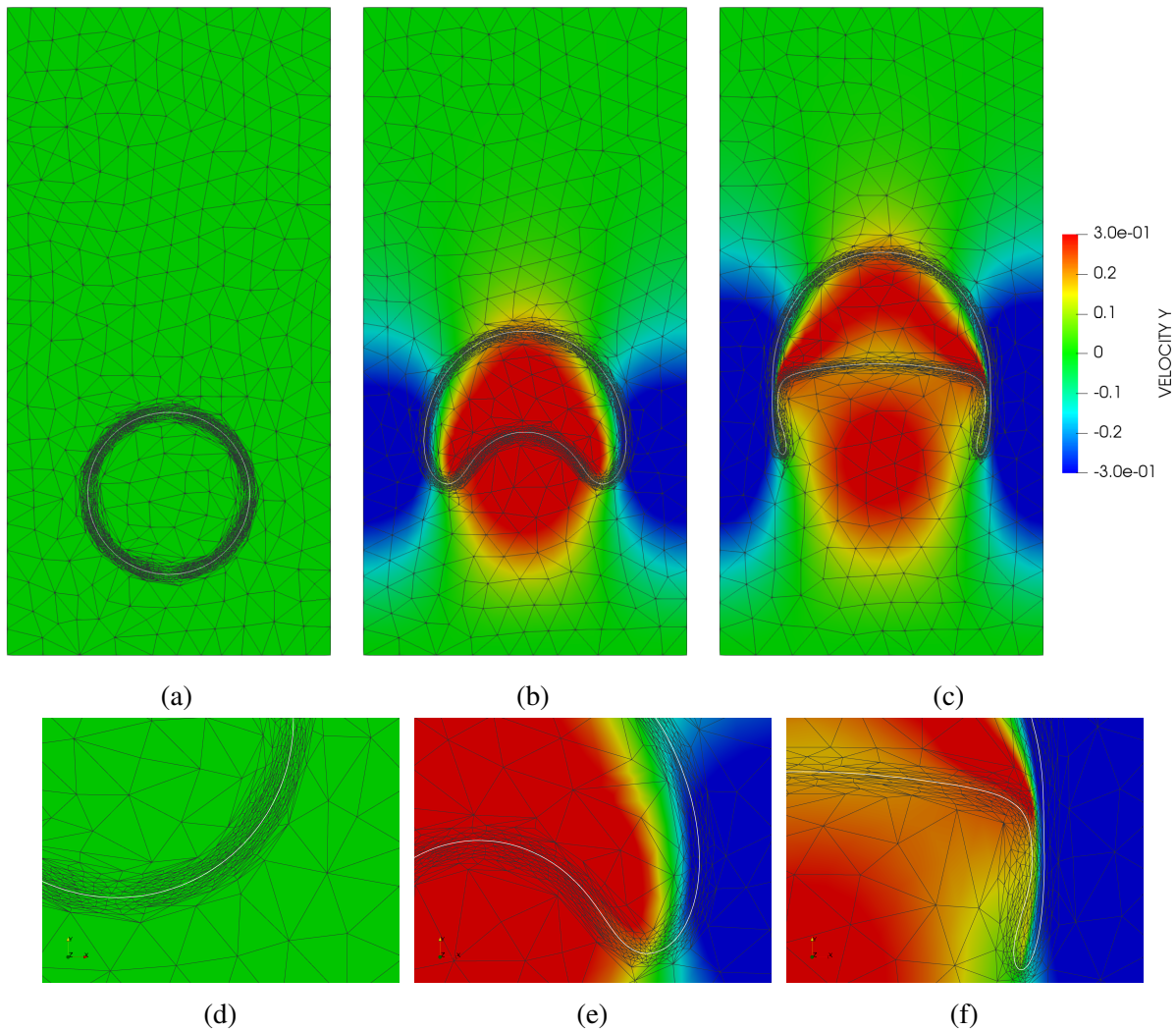


FIGURE 1.17 – Champ de vitesse de montée $\mathbf{v} \cdot \mathbf{e}_y$ pour les simulations de montée de bulle du cas 2 avec un maillage adaptatif, $\text{NDOF} \approx 23000$ et $\text{NTS} = 530$ à : (a) $t = 0$, (b) $t = 1.5$, (c) $t = 3.0$. Zoom sur le maillage adapté à : (d) $t = 0$, (e) $t = 1.5$, (f) $t = 3.0$. Image(s) issue(s) de la Référence [9].

un temps de calcul cumulant l'estimation de l'erreur, la RSP, le calcul de la métrique, l'adaptation du maillage et le transfert des variables qui varie entre 1 et 15% du temps de calcul total. Ce surcoût de l'adaptation de maillage est faible par rapport au gain en termes de précision, notamment en ce qui concerne la conservation de masse. L'utilisation d'une interpolation quadratique pour la FDN contribue pour beaucoup à ce résultat car elle permet de minimiser la diffusion pendant le transfert des variables à chaque adaptation du maillage.

1.2.3.2 Montée de bulle en Lagrangien

Comme démontré précédemment, la méthode numérique développée dans ce travail présente bien des avantages grâce à l'interpolation quadratique, l'adaptation de maillage anisotrope et le couplage fort entre la vitesse, la pression et la FDN. Cela se manifeste notamment par une très bonne conservation de la masse et la possibilité d'utiliser de grands pas de temps. Les premières tentatives d'application de cette méthode à la simulation du moulage par transfert de résine à l'échelle microscopique n'ont toutefois pas été concluantes. Cela a suscité l'intérêt de développer une approche alternative reposant sur un maillage adaptatif Lagrangien et un couplage faible [24].

Dans cette approche alternative, chaque nœud du maillage est déplacé au début de chaque incrément de temps en fonction de la vitesse de l'écoulement. Un algorithme d'essai-correction itératif est utilisé pour réaliser ce mouvement tout en déclenchant des opérations de remaillage pour éviter que des éléments n'aient un volume nul ou négatif [18].

Une métrique de remaillage isotrope est préférée afin d'inciter l'algorithme de remaillage à produire des éléments réguliers facilitant ce mouvement du maillage. Cette métrique est la même que dans l'approche Eulérienne, mais une opération supplémentaire est rajoutée après l'Équation (1.8) afin d'obtenir une erreur scalaire. Celle-ci est égale à la valeur propre maximale de la matrice d'erreur calculée par l'Équation (1.8).

Le mouvement du maillage implique également le transport de la FDN, ce qui rend superflue la résolution de l'Équation (1.14). Le terme d'auto-advection est également supprimé dans l'Équation (1.15). Cela est avantageux du point de vue du coût de la résolution de ces équations, mais implique une condition Courant–Friedrichs–Lewy (CFL) sur le pas de temps.

Pour résumer :

- Le maillage est fixe par rapport à l'écoulement dans l'approche Eulérienne, alors qu'il suit l'écoulement dans l'approche Lagrangienne. Ce mouvement du maillage a lieu au début de l'incrément de temps et peut nécessiter plusieurs opérations de remaillage.
- Les deux approches permettent des maillages adaptatifs, mais les maillages anisotropes sont difficilement exploitables dans l'approche Lagrangienne. Cette adaptation du maillage a lieu au début de l'incrément de temps.
- Il y a un terme d'auto-advection et une équation d'advection en plus dans l'approche Eulérienne.
- L'approche Eulérienne permet un couplage fort entre le système vitesse-pression et le transport de la FDN, ce qui n'est pas possible dans l'approche Lagrangienne. Ceci implique une condition CFL pour l'approche Lagrangienne et donc des pas de temps possiblement plus grands pour l'approche Eulérienne. Le pas de temps est automatiquement réduit lorsque la condition CFL est violée dans l'approche Lagrangienne, et de même dans l'approche Eulérienne lorsque l'algorithme de Newton-Raphson ne converge pas.

Dans une étude récente [44], un lien a été établi entre les courants parasites dans les modèles de tension de surface et le type de couplage utilisé. Cette étude conclut notamment que la modélisation de la tension de surface implique une condition de stabilité sur le pas de temps qui ne peut

être levée, même avec un couplage fort. Cette condition dépend en outre du nombre capillaire. Cela amène à s'intéresser à l'approche Lagrangienne pour de faibles nombres capillaires.

Pour rappel, le nombre capillaire est défini par $Ca = \frac{\mu v_c}{\sigma_s}$, où v_c est une vitesse caractéristique de l'écoulement. Les nombres capillaires observés dans les procédés de mise en œuvre des matériaux composites à matrice polymère sont généralement inférieurs à 10^{-2} , et ils sont mêmes inférieurs à 10^{-5} dans les applications liées à l'ingénierie des réservoirs (industrie pétrolière et gazière notamment).

Des simulations de montée de bulle en 3D avec deux jeux de propriétés correspondant respectivement à un nombre capillaire de $Ca = 1.5$ et $Ca = 0.015$ sont conduites en utilisant les deux approches. Les conditions aux limites pour cette extension en 3D sont inspirées de la Référence [70] et consistent à imposer une vitesse nulle sur tout le bord du domaine.

Pour un nombre capillaire de $Ca = 1.5$, dans un premier temps, des simulations utilisant différentes discrétisations spatiales sont conduites avec un même pas de temps prescrit pour les deux approches. Dans un second temps, afin de permettre la comparaison en termes de précision, des simulations Eulériennes supplémentaires sont réalisées avec le même NTS que celui obtenu pour chaque simulation Lagrangienne.

Un exemple de résultat avec les deux approches pour un NTS équivalent et un nombre capillaire de $Ca = 1.5$ est présenté dans la Figure 1.18. Les deux approches semblent mener à un résultat équivalent qualitativement. La forme finale de la bulle se rapproche de celle du cas 2 vu en 2D. Malgré un nombre de degrés de libertés supérieur pour l'approche Eulérienne, ces deux simulations sont bien équivalentes en termes de discrétisation spatiale. En effet, l'approche Eulérienne implique la résolution de l'équation d'advection pour la FDN et donc un nombre de degrés de libertés plus grand pour un même nombre d'éléments.

La Figure 1.19 montre l'évolution du volume de gaz pour différentes discrétisations. Celui-ci est sensé rester constant car l'écoulement est incompressible. Une augmentation du volume est constatée, ce qui montre que pour ces simulations c'est l'erreur due à la discrétisation en temps qui est dominante par rapport à celle due à la discrétisation en espace. Cela est vrai pour les deux approches.

Par ailleurs, l'approche Eulérienne peut être conduite avec un nombre d'incrément de temps proche de 100 quelle que soit la discrétisation en espace, alors que la condition CFL empêche cela même pour le maillage le plus grossier dans le cas Lagrangien. Cela permet de conclure qu'à condition d'intégrer un schéma temporel plus précis que celui utilisé dans ce travail, l'approche Eulérienne est plus intéressante que l'approche Lagrangienne pour ce nombre capillaire. En effet, elle permet d'utiliser des pas de temps plus grands et évite toutes les difficultés liées au mouvement de maillage.

Les résultats avec un nombre capillaire de $Ca = 0.015$ sont présentés dans la Figure 1.20. La bulle maintient sa forme sphérique dans cette configuration, en raison d'une tension de surface bien plus importante. La bulle monte par ailleurs plus rapidement par rapport au cas où $Ca = 1.5$. L'approche Eulérienne prédit une montée plus rapide par rapport à l'approche Lagrangienne, mais cela peut être expliqué par le nombre d'incrément de temps plus important.

Pour ce nombre capillaire faible, en effet, l'algorithme de Newton-Raphson de l'approche Eulérienne éprouve beaucoup de difficultés à converger, ce qui a pour conséquence d'augmenter significativement le nombre d'incrément de temps. Le nombre final correspond à plus de cinq fois ce qui était prescrit pour l'approche Eulérienne. Pour l'approche Lagrangienne, au contraire, il n'y a pas de problème de convergence et la condition CFL peut même être satisfaite en utilisant

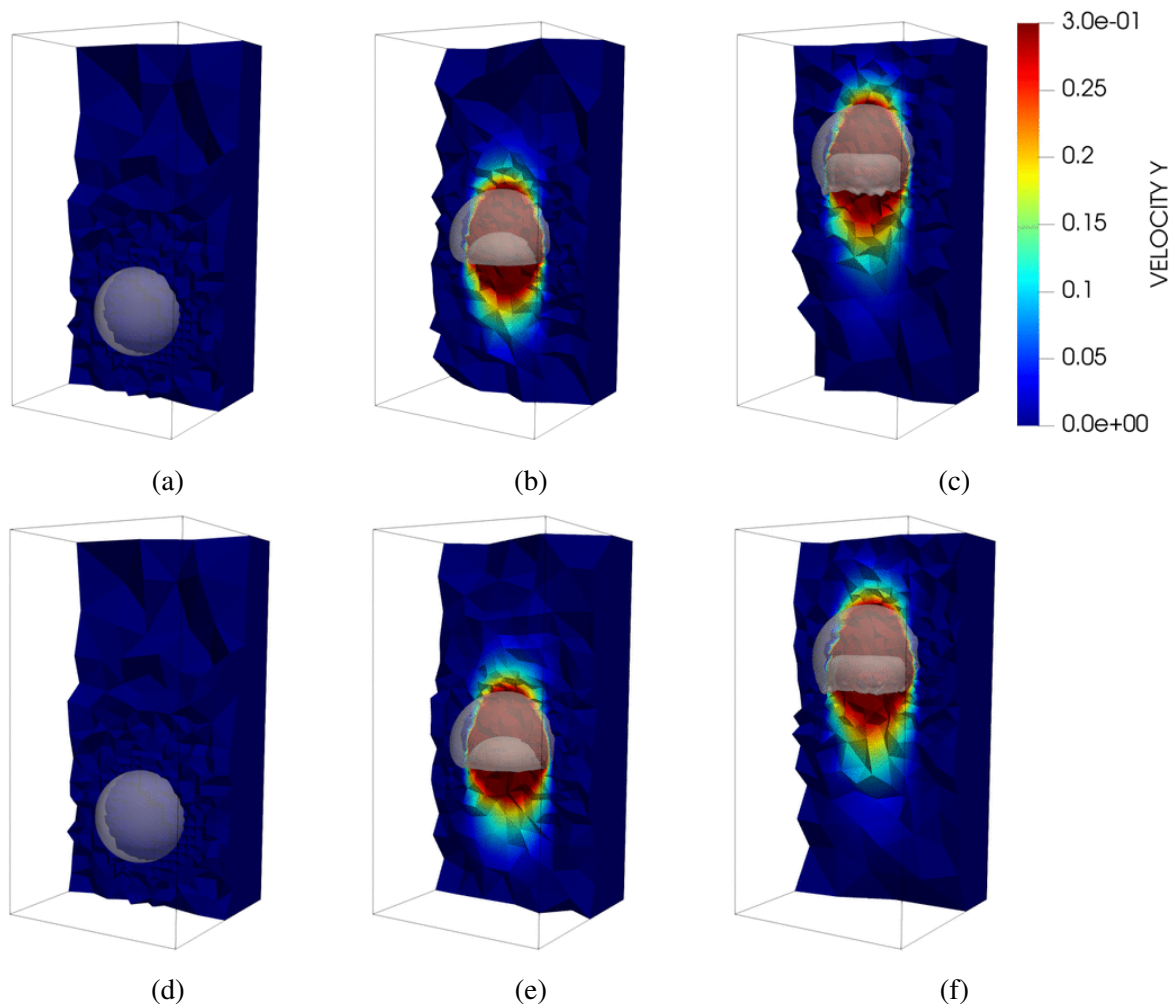


FIGURE 1.18 – Coupe du domaine montrant le champ de vitesse de montée $\mathbf{v} \cdot \mathbf{e}_y$ pour les simulations de montée de bulle avec $Ca = 1.5$. Simulation Eulérienne avec $NDOF \approx 205000$ et $NTS = 328$ à : (a) $t = 0$, (b) $t = 1.5$, (c) $t = 3.0$. Simulation Lagrangienne avec $NDOF \approx 166000$ et $NTS = 325$ à : (d) $t = 0$, (e) $t = 1.5$, (f) $t = 3.0$.

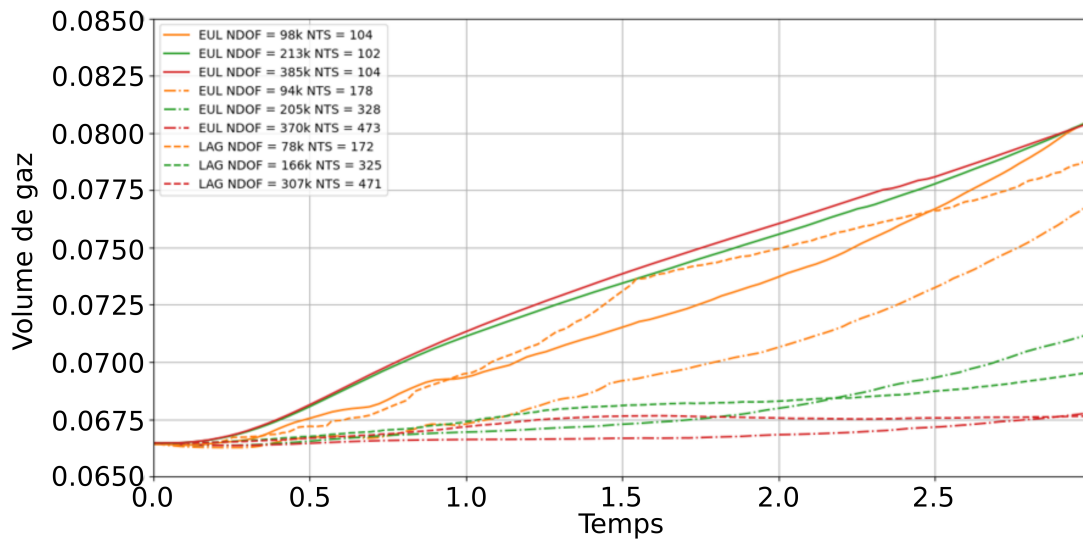


FIGURE 1.19 – Évolution du volume de gaz en fonction du temps pour les différentes simulations Lagrangiennes (LAG) et Eulériennes (EUL).

un nombre d'incrément de temps inférieur à celui utilisé pour le cas où $Ca = 1.5$.

En conclusion, bien que l'approche Eulérienne avec couplage fort développée dans ce travail puisse sembler très prometteuse et avantageuse avec un nombre capillaire élevé, son intérêt peut être questionné pour un nombre capillaire faible. Les développements numériques effectués dans ce travail autour de l'adaptation de maillage avec interpolation quadratique pour la FDN et de la formulation VMEBR équilibrée trouvent tout de même leur place, pourvu qu'ils soient complétés par un algorithme de mouvement de maillage permettant d'obtenir une approche Lagrangienne robuste. Il apparaît de manière générale que pour un nombre capillaire faible les difficultés de convergence ainsi que la condition CFL amènent à utiliser un pas de temps si faible qu'il devient intéressant d'envisager un couplage faible avec un maillage Lagrangien.

D'autres exemples exploitant l'approche Lagrangienne pour des applications liées à la mécanique des matériaux avec un comportement non linéaire de type hyperélastique ou élasto-plastique en grandes déformations peuvent être trouvées dans la Référence [11].

1.2.3.3 Cas avec obstacles

Pour finir, un exemple d'écoulement biphasé avec un domaine contenant des obstacles est considéré. Le domaine et les conditions aux limites sont présentés dans la Figure 1.21(a). Une goutte de liquide est placée dans la partie supérieure du domaine, tandis que la partie inférieure contient des obstacles.

La première étape est de générer un maillage EFs avec une discrétisation explicite des obstacles. La procédure est celle décrite en Section 1.1 et la géométrie des obstacles correspond à celle considérée dans le Paragraphe 1.1.3.1. Les paramètres $h_{min} = 8 \mu\text{m}$, $h_{max} = 32 \mu\text{m}$ et $h_c = 0.128$ sont utilisés pour la métrique de remaillage basée sur la courbure principale maximale et le maillage obtenu est présenté dans la Figure 1.21(b) après 8 cycles d'adaptation.

La deuxième étape est d'introduire la FDN de l'interface liquide/gaz dans ce maillage EFs avec discrétisation explicite des obstacles. Pour cela, la métrique de remaillage est changée pour passer à celle définie dans l'Équation (1.9) avec une variable d'intérêt $\mathbf{s} = H_\epsilon(\phi^0)$ où ϕ^0 est

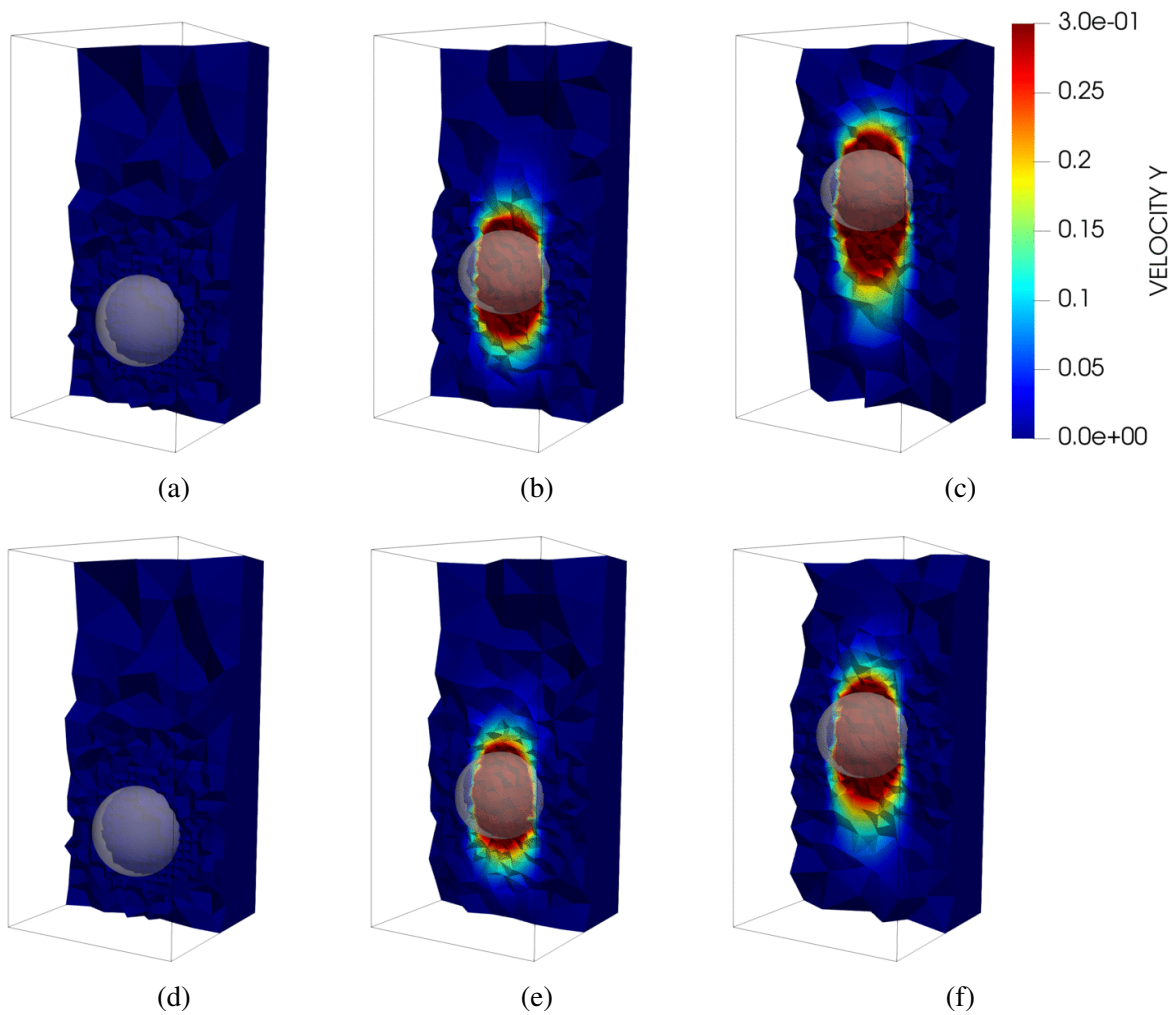


FIGURE 1.20 – Coupe du domaine montrant le champ de vitesse de montée $\mathbf{v} \cdot \mathbf{e}_y$ pour les simulations de montée de bulle avec $Ca = 0.015$. Simulation Eulérienne avec $NDOF \approx 199000$ et $NTS = 530$ à : (a) $t = 0$, (b) $t = 0.75$, (c) $t = 1.5$. Simulation Lagrangienne avec $NDOF \approx 160000$ et $NTS = 218$ à : (d) $t = 0$, (e) $t = 0.75$, (f) $t = 1.5$.

la FDN de l'interface liquide/gaz dans la configuration initiale. Les paramètres $h_{max} = 1000$, $N_c = 4096$ et $\epsilon = 8 \mu\text{m}$ sont utilisés pour arriver au maillage présenté dans la Figure 1.21(c) après 5 nouveaux cycles d'adaptation. Pendant ces nouveaux cycles et aussi pendant tout le reste de la simulation, le maillage à l'intérieur des obstacles est gelé. La Figure 1.21(d) montre bien comment la discrétisation est explicite pour les obstacles et implicite pour l'interface liquide/gaz, avec un maillage adapté dans les deux cas.

Enfin, la simulation de l'écoulement biphasé peut être conduite. Une vitesse nulle est imposée à l'intérieur et au bord des obstacles, de sorte que ceux-ci auraient pu être éliminés du maillage EFs. Le liquide est de masse volumique 1 kg mm^{-3} et de viscosité dynamique 10 MPa ms . Le coefficient de tension de surface est de 1.96 g ms^{-2} . Le gaz est de masse volumique 1 g mm^{-3} et de viscosité dynamique 0.1 MPa ms . L'accélération gravitationnelle est fixée à 0.98 mm ms^{-2} . La méthode numérique utilisée est l'approche Eulérienne avec couplage fort décrite dans la Sous-section 1.2.2, avec la légère différence que l'adaptation de maillage n'est déclenchée que si la qualité d'au moins un élément du maillage telle que définie dans l'Équation (1.12) tombe en dessous de 0.33. Le pas de temps prescrit est de 0.1 ms. La simulation termine à $T = 10 \text{ ms}$ en 750 incréments de temps, dont 454 incluent une adaptation du maillage suite à une chute de la qualité. L'interface liquide/gaz ainsi que les maillages EFs adaptés sont montrés dans la Figure 1.22 à différents instants de la simulation.

La goutte entre en contact avec les obstacles dans la Figure 1.22(a). Elle s'étale ensuite à cause de l'inertie dans la Figure 1.22(b), avant de s'écouler vers le bas entre les obstacles jusqu'à l'état final montré dans la Figure 1.22(c). Le zoom sur le maillage adapté de la Figure 1.22(d) peut être comparé à celui de la Figure 1.21(d). Le fait de fixer la complexité de calcul avec le paramètre N_c oblige visiblement à une gestion pragmatique de la discrétisation. La morphologie de l'interface devient ainsi bien plus complexe qu'elle ne l'était initialement dans cette simulation. L'étirement des éléments là où l'interface s'aplatit permet de maintenir un bon niveau de raffinement là où l'interface se courbe, et ce pour un coût constant.

Cette simulation avec des obstacles montre bien l'intérêt de la méthode numérique développée dans ces travaux. La méthode des FDNs avec interpolation quadratique et adaptation de maillage permet d'assurer une très bonne conservation de la masse. Elle peut être complétée par une formulation VMEBR équilibrée avec couplage fort ou faible selon le nombre capillaire. Ces développements numériques ont pu être exploités pour l'étude de la migration des bulles à l'échelle microscopique dans des composites à fibres longues [26, 27].

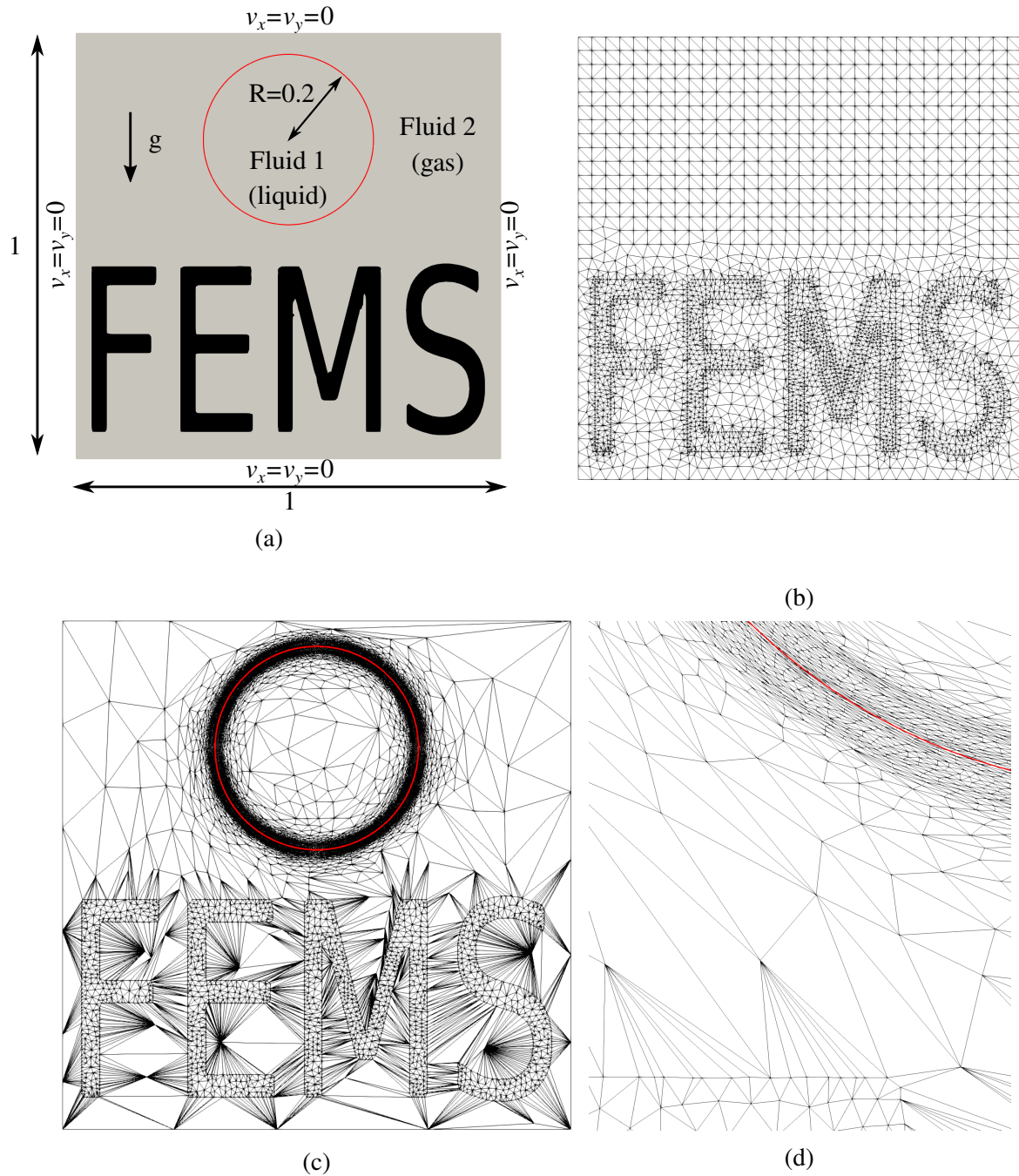


FIGURE 1.21 – (a) Conditions aux limites pour le problème d'écoulement biphasé avec obstacles. Les longueurs sont en millimètres et les vitesses en mètres par seconde. (b) Maillage EFs généré avec discrétisation explicite des obstacles. (c) Maillage EFs avec obstacles discrétisés explicitement et adapté à l'interface liquide/gaz qui est représentée implicitement à travers une FDN. (d) Zoom sur le maillage adapté. Image(s) issue(s) de la Référence [11].

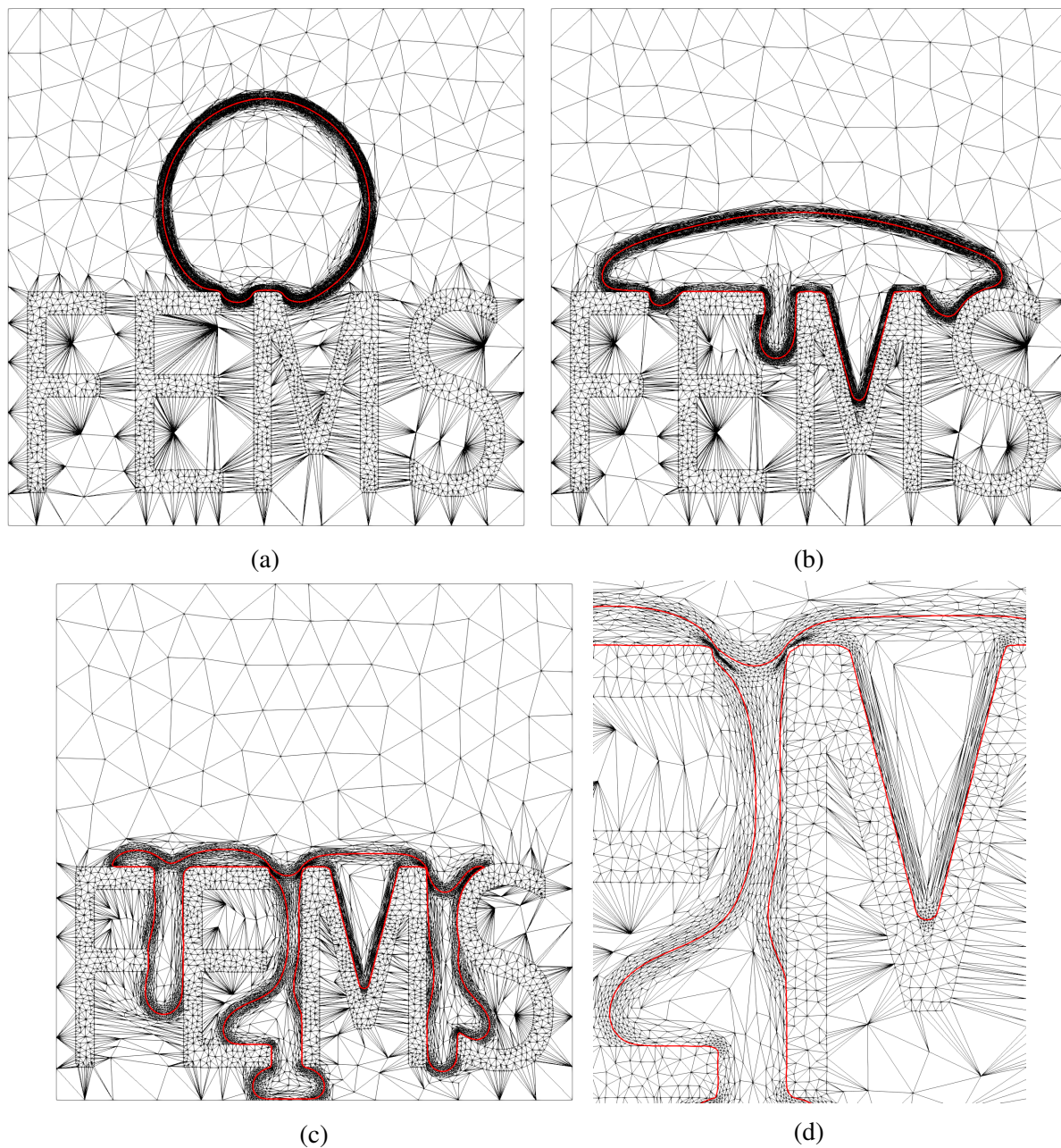


FIGURE 1.22 – Résultats pour le problème d'écoulement biphasé avec obstacles à : (a) $t = 0.5$ ms, (b) $t = 1$ ms, (c) 10 ms. (d) Zoom sur le maillage adapté à $t = 10$ ms. Image(s) issue(s) de la Référence [11].

1.3 Génie logiciel et calcul parallèle

La gestion du code de calcul *FEMS* dans lequel ont été intégrés tous les développements de ce chapitre s'est très vite posée au vu des projets et stages de recherche dans lesquels ce code allait jouer un rôle. L'objectif était multiple :

- Certains collaborateurs non initiés à la programmation étaient amenés à utiliser le code.
- Certains collaborateurs étaient amenés à y contribuer, sans avoir d'expérience significative en calcul scientifique.
- Je devais pouvoir maintenir le code et y assurer une certaine homogénéité.
- Le code devait être assez efficient et exploiter au mieux les capacités du supercalculateur de l'IMT Nord Europe, tout en restant accessible pour des novices en calcul scientifique.

Dans la première version de *FEMS*, détaillée dans la Référence [11], le code a été divisé en trois blocs. Les utilisateurs peuvent utiliser le code sans y programmer quoique ce soit grâce à des fichiers d'entrée au format *Extensible Markup Language*, et des maillages au format *MSH*. Des maillages avec ce format peuvent être créés avec le logiciel *Gmsh* [71]. Ces fichiers d'entrée correspondent au premier bloc.

Le second bloc est constitué de toute une partie du code qui ne requière par de gestion du parallélisme. Cela permet de programmer des opérations locales à un nœud, un point d'intégration ou un élément du maillage sans nécessiter d'attention particulière liée à la parallélisation.

Enfin, les opérations du troisième bloc sont toutes celles qui nécessitent une connaissance en calcul parallèle. Cela concerne notamment le remaillage ainsi que la RSP et la ré-initialisation. Cette première version de *FEMS* s'appuyait sur une parallélisation en mémoire partagée et sur différentes bibliothèques séquentielles d'algèbre linéaire existantes. Elle a été publiée sous la forme d'un logiciel libre [49] accompagné d'une documentation technique rédigée avec l'outil *Doxygen* et de tutoriels complets publiés dans la Référence [11].

Les travaux sur les écoulements biphasés ont été l'occasion d'expérimenter la parallélisation sur carte graphique. Ces cartes sont en effet dotées de multi-processeurs particuliers qui possèdent un grand nombre d'unités de calcul. Ces unités sont taillées pour permettre d'effectuer une même opération en parallèle pour un très grand nombre d'entrées différentes. L'opération de ré-initialisation de la FDN se prêtait particulièrement à ce type de parallélisation. Les travaux publiés dans la Référence [9] montrent bien que malgré l'utilisation d'un algorithme de force brute consistant à projeter chaque nœud du maillage EF sur chaque segment ou triangle d'un maillage surfacique reconstruit de l'iso-contour zéro de la FDN, le temps de calcul passé à ré-initialiser est négligeable.

Suite à ces résultats remarquables, la possibilité d'exploiter la même technologie pour l'algorithme de remaillage a été explorée dans un stage de recherche de Master [23]. Cette étude n'a pas été concluante mais a permis d'identifier les limites de la parallélisation sur carte graphique. Bien que le remaillage consiste effectivement à réaliser la même opération pour un très grand nombre d'entrées différentes, cette opération requière un grand nombre d'informations sur la topologie des éléments. Le stage de recherche a permis de comprendre cette limite de la mémoire de la carte graphique [23].

Enfin, en préparation d'un stage de recherche dans le cadre du PRACE Summer of HPC 2021 [72], j'ai revu complètement la parallélisation de *FEMS* pour arriver à une nouvelle version parallélisée en mémoire distribuée. Cette nouvelle version a joué un rôle clé pour le travail de recherche sur la modélisation multi-échelle présenté au Chapitre 4. La parallélisation en

mémoire distribuée est en effet essentielle non seulement pour exploiter la puissance de calcul du supercalculateur de l'IMT Nord Europe et ses dizaines de nœuds de calcul, mais aussi pour répartir le volume de données entre les différents nœuds.

Ces efforts concernant la gestion du logiciel libre *FEMS* et sa parallélisation ne constituent pas le cœur de mes travaux de recherche mais ils y contribuent pourtant pour beaucoup. Il me semblait donc judicieux de les résumer dans ce chapitre.

Conclusion

Au-delà de l'objectif de modéliser des écoulements biphasés dans des domaines hétérogènes, les travaux de recherche présentés dans ce chapitre comportent de multiples contributions scientifiques.

Le domaine de calcul étant hétérogène, il est primordial de modéliser la présence d'obstacles dont la géométrie peut être fournie sous une forme paramétrique ou sous la forme d'une image 3D acquise par tomographie. Une méthodologie de génération de maillage basée sur les FDNs a été développée. Les FDNs peuvent en effet être calculées à partir d'une représentation paramétrique mais aussi directement sur une image. La robustesse de cette méthodologie de génération de maillage avec discrétisation explicite des obstacles a été démontrée pour diverses applications incluant notamment le calcul de propriétés élastiques et de perméabilité pour des composites à fibres longues tissées.

En ce qui concerne les écoulements biphasés, la méthode des FDNs avec interpolation EFs quadratique développée dans ces travaux permet de représenter implicitement l'interface liquide/gaz avec un réel gain en termes de précision. Cela permet de combler en grande partie les déficiences de la méthode des FDNs en termes de conservation de masse. L'approche d'adaptation de maillage revisitée avec une métrique de remaillage étendue à cette interpolation quadratique permet d'améliorer encore les gains à la fois en termes de précision et de temps de calcul.

Le modèle de tension de surface proposé est équilibré. L'originalité de cette approche réside dans l'équilibre intrinsèque entre la discrétisation utilisée pour le champ de pression et celle utilisée pour la FDN. La stabilisation VMEBR joue un rôle clé dans cet équilibre car elle rend possible l'utilisation d'une interpolation de même ordre pour la vitesse, la pression et la FDN. La méthode numérique développée dans ce travail est flexible et permet à la fois un couplage fort avec une résolution simultanée du système vitesse-pression et de la FDN, ou un couplage faible où ces équations sont résolues séparément. Dans le deuxième cas, une approche Lagrangienne avec un algorithme de mouvement de maillage prometteuse est proposée, notamment pour les problèmes où le nombre capillaire est très faible.

Tous ces développements numériques autour de la méthode des EFs ont été intégrés dans un logiciel libre. La gestion et la parallélisation de ce logiciel a constitué une part complémentaire non négligeable de ces travaux de recherche. Cet effort supplémentaire a permis de faciliter la génération des données utilisées dans le Chapitre 3, et de permettre l'exécution de calculs d'une complexité conséquente dans le Chapitre 4.

Chapitre 2

Modélisation de la rupture par champ de phase et transformée de Fourier rapide

Une des plus grandes illusions
qu'on puisse avoir en politique,
c'est de croire qu'on a bâti pour
l'éternité.

Jacques Bainville

Introduction	80
2.1 Principe de la méthode	83
2.1.1 Méthode	83
2.1.2 Exemple démonstratif	85
2.2 Causes des oscillations parasites et solutions	89
2.2.1 Analyse et solutions générales	90
2.2.2 Solutions pour les interfaces	93
2.3 Approche champ de phase pour la rupture	95
2.3.1 Modèle de Miehe	95
2.3.2 Modèle de Wu	104
Conclusion	110

Introduction

Les méthodes de génération de maillage telles que celles présentées dans la Section 1.1 sont d'un intérêt indéniable. Toutefois, leur mise en œuvre amène certaines difficultés qui poussent à envisager des voies alternatives :

- Les maillages produits peuvent comporter certains éléments de mauvaise qualité qui vont perturber localement la solution numérique, voire empêcher toute résolution numérique.
- La génération du maillage est une étape supplémentaire qui s'insère entre la construction de la géométrie ou la segmentation de l'image 3D (si la géométrie provient d'une acquisition par tomographie) et le calcul en lui-même.
- L'implémentation efficace et notamment la parallélisation de ces algorithmes n'est pas évidente (voir Section 1.3).

La méthode numérique basée sur la Transformée de Fourier Rapide (TFR) a connu une popularité croissante depuis son invention en 1994 [73]. Cette méthode se base sur deux ingrédients fondamentaux : les fonctions de Green et la TFR. Elle repose sur un maillage voxelisé, évitant ainsi toute étape de génération ou d'adaptation de maillage. Cela constitue à la fois un avantage et un inconvénient, comme précisé dans la suite. De plus, cette méthode de résolution ne nécessite pas d'assembler une matrice globale comme dans la méthode des Éléments Finis (EFs). Toutes les opérations sont locales à un voxel, à part la TFR. Cela est d'autant plus avantageux pour la parallélisation, car il existe des bibliothèques libres très efficaces permettant d'effectuer une TFR en parallèle sur un multi-processeur, une carte graphique ou un supercalculateur [74].

J'ai pu m'intéresser à la méthode numérique basée sur la TFR pendant mon post-doctorat à la Northwestern University. Des travaux avaient également été entrepris à l'IMT Nord Europe, de sorte qu'une thèse de doctorat sur cette méthode a pu démarrer peu après mon arrivée. Cette thèse s'est intégrée parfaitement dans mes travaux de recherche sur la modélisation numérique des phénomènes mécaniques fortement non linéaires dans les matériaux hétérogènes, puisqu'il s'agissait de modéliser l'endommagement et la rupture pour ces matériaux avec la méthode numérique basée sur la TFR.

L'objectif final de ce chapitre est ainsi de modéliser la rupture de matériaux fragiles ou quasi-fragiles comme les composites à matrice polymère. Ce chapitre est la suite logique du Chapitre 1. En effet, en admettant qu'il soit possible de prédire la morphologie et la distribution de la porosité dans ces matériaux composites suite à leur mise en œuvre, la problématique suivante est la prédiction des propriétés finales des structures en fonction de cette porosité.

La méthode numérique basée sur la TFR est choisie pour atteindre cet objectif, et ce en raison des avantages cités précédemment. Cette méthode charrie toutefois un certain nombre d'inconvénients, parmi lesquels figure la présence d'oscillations parasites dans les champs mécaniques calculés. Diverses explications peuvent être trouvées dans la littérature quant aux sources de ces oscillations :

- Dans la Référence [75], il est suggéré que l'approximation de la transformée de Fourier par une transformée discrète amène une erreur de troncature significative qui se manifeste sous forme d'oscillations. Le théorème de Shannon requiert que le nombre de points de discrétisation par unité de longueur soit supérieur au double du gradient maximal des champs mécaniques représentés. S'il s'agit d'étudier les champs de déformations ou de contraintes dans un domaine composé de plusieurs matériaux, ce gradient maximal est infini aux interfaces entre les différents matériaux et il est donc impossible de satisfaire le théorème de Shannon. L'erreur de troncature est en effet significative.

- Dans la Référence [76], le phénomène de Gibbs est mentionné comme explication possible. Ce phénomène est caractérisé par l'apparition d'oscillations dans un champ discret au voisinage des discontinuités.
- Il est bien connu dans le cas des EFs qu'une discrétisation en hexaèdres avec un seul point d'intégration par élément mène à des modes de déformation parasites dits modes de sablier. La méthode numérique basée sur la TFR repose sur une discrétisation avec des voxels, qui sont des hexaèdres, et un champ de déformation constant par voxel. Des modes de sablier ont été observés dans la littérature avec cette méthode [77].
- La discrétisation des interfaces avec un maillage voxélisé est bien entendu une source d'oscillations qui a été identifiée dans la littérature [78].

Face à tant d'explications possibles et le grand nombre de solutions proposées pour les atténuer, un travail d'analyse et de hiérarchisation semble nécessaire.

La modélisation numérique de l'endommagement et de la rupture est un champ de recherche très large en soit [14]. La modélisation par champ de phase est une piste particulièrement intéressante et popularisée assez récemment [79, 80, 81]. Elle s'inspire des modèles d'endommagement continu, qui évitent à la fois les difficultés numériques liées à la représentation explicite d'une discontinuité évolutive dans une discrétisation, et celles liées à la prédiction des phénomènes d'initiation et de branchement [14]. En effet, dans ces modèles les fissures sont représentées implicitement par une variable d'endommagement continue, qui permet également de modéliser la formation et la croissance de micro-fissures et de micro-porosités en plus des (macro-)fissures [82]. Ces modèles ont une déficience bien connue qui est la dépendance des prédictions vis-à-vis de la discrétisation [83, 84]. Cette dépendance peut être levée grâce à une régularisation consistant à introduire une variable d'endommagement non locale obtenue par une opération de lissage local ou par la résolution d'une équation de réaction-diffusion [83, 84].

Les modèles de champ de phase peuvent être vus comme une approche variationnelle aux modèles d'endommagement non locaux. Ces modèles sont basés sur une formulation unifiée où il n'y a qu'une seule variable d'endommagement avec une régularisation complètement intégrée [80, 81].

Ces modèles de champ de phase sont particulièrement intéressants pour une résolution par la méthode numérique basée sur la TFR, car il semble difficile de représenter explicitement une fissure dans un maillage voxélisé. L'implémentation d'un modèle de champ de phase avec la méthode numérique basée sur la TFR a néanmoins peu été abordée dans la littérature, à l'exception de travaux conduits à l'IMT Nord Europe avant mon arrivée [85].

Ces travaux se basent sur une simplification de l'équation de réaction-diffusion pour le champ de phase. L'influence potentielle de cette simplification sur les résultats a été signalée dans la littérature [86], mais n'a pas été évaluée numériquement.

Le modèle de champ de phase utilisé dans la Référence [85] repose par ailleurs sur l'introduction d'une longueur de régularisation. Cette longueur constitue une propriété matériau additionnelle à définir. Bien que la définition de cette longueur de régularisation à l'échelle d'une structure ait été assez largement discutée dans la littérature [83], son utilisation à l'échelle mésoscopique ou microscopique est moins bien comprise [14].

La méthode numérique basée sur la TFR et un exemple démonstratif issu de mes travaux de post-doctorat sont présentés en Section 2.1.

Une analyse des causes des oscillations parasites dans les solutions calculées par cette méthode et des solutions pour les réduire est résumée en Section 2.2. Un travail plus spécifique sur les oscillations liées à la discrétisation irrégulière des interfaces par un maillage voxélisé est

également présenté.

L'extension de la méthode à la modélisation de la rupture par champ de phase est présentée dans la Section 2.3. Cette extension est revisitée pour un modèle de champ de phase assez novateur s'affranchissant de la définition de la longueur de régularisation en tant que propriété matériau, et donc particulièrement intéressant pour les matériaux hétérogènes.

2.1 Principe de la méthode

La méthode numérique basée sur la TFR est présentée dans la Sous-section 2.1.1. Une application démontrant clairement l'intérêt de cette approche est présentée dans la Sous-section 2.1.2.

2.1.1 Méthode

Le domaine de calcul est le pavé $\Omega = [0, L_1] \times [0, L_2] \times [0, L_3]$, avec $(L_1, L_2, L_3) \in \mathbb{R}^{3+}$. Il s'agit de résoudre le problème d'équilibre en petites déformations

$$\left\{ \begin{array}{l} -\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}, \mathbf{x} \in \Omega, \\ \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \mathbb{C}(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}), \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) = \nabla^{\text{sym}} \mathbf{u}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u}(\mathbf{x}) + \nabla^T \mathbf{u}(\mathbf{x})), \\ \mathbf{u}(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\varepsilon}^M \cdot \mathbf{x} + \mathbf{u}^\#(\mathbf{x}), \\ \mathbf{u}^\# \begin{pmatrix} 0 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \mathbf{u}^\# \begin{pmatrix} L_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}, \mathbf{u}^\# \begin{pmatrix} x_1 \\ 0 \\ x_3 \end{pmatrix} = \mathbf{u}^\# \begin{pmatrix} x_1 \\ L_2 \\ x_3 \end{pmatrix}, \mathbf{u}^\# \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ 0 \end{pmatrix} = \mathbf{u}^\# \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ L_3 \end{pmatrix}. \end{array} \right. \quad (2.1)$$

L'inconnue à trouver est le vecteur de déplacement \mathbf{u} . Ce problème fait intervenir le champ de déformation $\boldsymbol{\varepsilon}$, le champ de contraintes de Cauchy $\boldsymbol{\sigma}$ et le tenseur de rigidité \mathbb{C} . Le vecteur de déplacement se décompose en une partie linéaire et une partie périodique. La partie linéaire est fonction d'une déformation macroscopique $\boldsymbol{\varepsilon}^M$ qui est une donnée du problème, tout comme le tenseur de rigidité. Par soucis de simplicité, la loi de Hooke est utilisée dans cette partie, ce qui correspond à un matériau au comportement élastique linéaire. De nombreuses études démontrant l'applicabilité de cette méthode à des lois de comportement non linéaires en petites et grandes déformations peuvent être trouvées dans la littérature [87].

Le problème d'équilibre de l'Équation (2.1) est en réalité un problème d'homogénéisation, comme détaillé dans le Chapitre 4. Cette partie concerne sa résolution par la méthode numérique basée sur la TFR. Il s'agit d'un problème linéaire avec coefficients hétérogènes car le tenseur de rigidité \mathbb{C} est fonction de \mathbf{x} . Autrement dit, le domaine est composé de différents matériaux.

La première étape consiste à introduire un tenseur de rigidité \mathbb{C}^0 correspondant à un matériau de référence purement fictif :

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} &\Leftrightarrow -\nabla \cdot (\mathbb{C}(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x})) = \mathbf{0}, \\ &\Leftrightarrow -\nabla \cdot ((\mathbb{C}(\mathbf{x}) - \mathbb{C}^0) : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x})) = \nabla \cdot (\mathbb{C}^0 : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x})), \\ &\Leftrightarrow \nabla \cdot (\mathbb{C}^0 : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x})) = -\nabla \cdot ((\mathbb{C}(\mathbf{x}) - \mathbb{C}^0) : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x})). \end{aligned}$$

Si le champ de polarisation $\boldsymbol{\tau}$ est introduit, un problème linéaire avec coefficients homogènes et un second membre est obtenu :

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot (\mathbb{C}^0 : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x})) = -\nabla \cdot \boldsymbol{\tau}(\mathbf{x}), \mathbf{x} \in \Omega, \\ \boldsymbol{\tau}(\mathbf{x}) = (\mathbb{C}(\mathbf{x}) - \mathbb{C}^0) : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}), \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) = \nabla^{\text{sym}} \mathbf{u}(\mathbf{x}), \\ \mathbf{u}(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\varepsilon}^M \cdot \mathbf{x} + \mathbf{u}^\#(\mathbf{x}), \\ \mathbf{u}^\# \begin{pmatrix} 0 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \mathbf{u}^\# \begin{pmatrix} L_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}, \mathbf{u}^\# \begin{pmatrix} x_1 \\ 0 \\ x_3 \end{pmatrix} = \mathbf{u}^\# \begin{pmatrix} x_1 \\ L_2 \\ x_3 \end{pmatrix}, \mathbf{u}^\# \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ 0 \end{pmatrix} = \mathbf{u}^\# \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ L_3 \end{pmatrix}. \end{array} \right. \quad (2.2)$$

La résolution par une fonction de Green repose sur le problème simplifié :

$$\begin{cases} \nabla \cdot (\mathbb{C}^0 : \mathbf{G}^0(\mathbf{x})) = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \delta(\mathbf{x}), \mathbf{x} \in \Omega, \\ \int_{\Omega} \mathbf{G}^0 d\Omega = 0, \end{cases} \quad (2.3)$$

avec $\delta(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1, \mathbf{x} = \mathbf{0}, \\ 0, \mathbf{x} \neq \mathbf{0}, \end{cases}$ la fonction δ de Dirac. Il est aisé de démontrer que si \mathbf{G}^0 est solution du problème (2.3), alors la solution du problème (2.2) peut s'écrire

$$\varepsilon(\mathbf{x}) = \varepsilon^M - (\mathbf{G}^0 * \nabla \cdot \boldsymbol{\tau})(\mathbf{x}), \quad (2.4)$$

avec $*$ l'opérateur de convolution. Il est opportun de rappeler qu'un opérateur différentiel à coefficients homogènes peut être rentré dans une convolution et transféré indifféremment sur l'un ou l'autre des opérandes, et que la fonction δ de Dirac est l'élément neutre de la convolution. Cela permet ainsi de vérifier que

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\mathbb{C}^0 : \varepsilon(\mathbf{x})) &= \nabla \cdot (\mathbb{C}^0 : (\varepsilon^M - (\mathbf{G}^0 * \nabla \cdot \boldsymbol{\tau})(\mathbf{x}))) \\ &= -(\nabla \cdot (\mathbb{C}^0 : \mathbf{G}^0) * \nabla \cdot \boldsymbol{\tau})(\mathbf{x}) \\ &= -\left(\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \delta(\mathbf{x}) * \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} \right)(\mathbf{x}) \\ &= -\nabla \cdot \boldsymbol{\tau}(\mathbf{x}). \end{aligned}$$

Ce résultat démontre que la formule de l'Équation (2.4) est bien solution du problème (2.2). Pour utiliser cette formule, il faut disposer d'une solution au problème (2.3). Cette solution \mathbf{G}^0 est la fonction de Green associée au problème (2.2). Elle est calculable aisément en appliquant la transformée de Fourier \mathcal{F} :

$$\begin{aligned} \mathcal{F}(\nabla \cdot (\mathbb{C}^0 : \mathbf{G}^0))(\boldsymbol{\xi}) &= J \boldsymbol{\xi} \cdot \mathcal{F}(\mathbb{C}^0 : \mathbf{G}^0) \\ &= J \boldsymbol{\xi} \cdot (\mathbb{C}^0 : \mathcal{F}(\mathbf{G}^0)), \\ &= J \boldsymbol{\xi} \cdot (\mathbb{C}^0 : \widehat{\mathbf{G}}^0), \end{aligned}$$

$$\mathcal{F}\left(\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \delta\right)(\boldsymbol{\xi}) = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix},$$

avec $J = \sqrt{-1}$ et $\widehat{\mathbf{G}}^0 = \mathcal{F}(\mathbf{G}^0)$. Le problème (2.3) est donc équivalent dans l'espace de Fourier à

$$\begin{cases} J \boldsymbol{\xi} \cdot (\mathbb{C}^0 : \widehat{\mathbf{G}}^0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, & \boldsymbol{\xi}^2 \neq 0, \\ \widehat{\mathbf{G}}^0 = \mathbf{0}, & \boldsymbol{\xi}^2 = 0. \end{cases}$$

Ce problème peut sembler difficile à inverser mais en faisant un choix intelligent pour le matériau de référence, cela devient aisé. Par exemple, pour $\mathbb{C}_{ijkl}^0 = \delta_{ik} \delta_{jl}$ le résultat est

$$\widehat{\mathbf{G}}_{ij}^0 = \begin{cases} -\frac{\xi_j J}{\xi^2}, & \boldsymbol{\xi}^2 \neq 0, \\ 0, & \boldsymbol{\xi}^2 = 0. \end{cases}$$

Il est assez pratique de réécrire la solution (2.4) sous la forme

$$\varepsilon(\mathbf{x}) = \varepsilon^M - (\mathbf{G}^0 * \nabla \cdot \boldsymbol{\tau})(\mathbf{x}) = \varepsilon^M - (\nabla \cdot \mathbf{G}^0 * \boldsymbol{\tau})(\mathbf{x}) = \varepsilon^M - (\boldsymbol{\Gamma}^0 * \boldsymbol{\tau})(\mathbf{x}), \quad (2.5)$$

où $\widehat{\boldsymbol{\Gamma}}^0 = \mathbf{I} \otimes \mathcal{J}\xi \cdot \widehat{\mathbf{G}}^0$ est appelé opérateur de Green, avec \mathbf{I} la matrice identité. Dans la Référence [73], le matériau de référence est choisit sous la forme $\mathbb{C}_{ijkl}^0 = \mu^0(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}) + \lambda^0\delta_{ij}\delta_{kl}$, ce qui mène à l'opérateur de Green

$$\widehat{\boldsymbol{\Gamma}}_{ijkl}^0 = \frac{(\delta_{ki}\xi_l\xi_j + \delta_{li}\xi_k\xi_j + \delta_{kj}\xi_l\xi_i + \delta_{lj}\xi_k\xi_i)}{4\mu_0\xi^2} - \frac{\lambda_0 + \mu_0}{\mu_0(\lambda_0 + 2\mu_0)} \frac{\xi_i\xi_j\xi_k\xi_l}{\xi^4}. \quad (2.6)$$

Cette approche basée sur une fonction ou un opérateur de Green nécessite un artifice initial qui est l'introduction du champ de polarisation $\boldsymbol{\tau}$ comme second membre, alors que celui-ci dépend en réalité de la solution. Le prix à payer pour cet artifice est la nécessité d'utiliser un algorithme itératif pour résoudre le problème initial (2.1).

Différents algorithmes ont été proposés dans la littérature pour cette résolution, dont les méthodes Newton-Krylov [87] qui sont particulièrement intéressantes pour les problèmes où le comportement du matériau est non linéaire (*i.e.*, \mathbb{C} dépend de ε). Dans la Référence [73], l'algorithme de point fixe suivant est proposé :

Initialisation :

$$\begin{aligned} (a_0) \quad & \varepsilon^1(\mathbf{x}) = \varepsilon^M \\ (b_0) \quad & \boldsymbol{\sigma}^1(\mathbf{x}) = \mathbb{C}(\mathbf{x}) : \varepsilon^1(\mathbf{x}) \end{aligned}$$

Itération ($i + 1$) : ε^i et $\boldsymbol{\sigma}^i$ connus

$$\begin{aligned} (a) \quad & \boldsymbol{\tau}^i(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\sigma}^i(\mathbf{x}) - \mathbb{C}^0 : \varepsilon^i(\mathbf{x}) \\ (b) \quad & \widehat{\boldsymbol{\tau}}^i = \mathcal{F}(\boldsymbol{\tau}^i) \\ (c) \quad & \widehat{\varepsilon}^{i+1}(\boldsymbol{\xi}) = \begin{cases} -\widehat{\boldsymbol{\Gamma}}^0(\boldsymbol{\xi}) : \widehat{\boldsymbol{\tau}}^i(\boldsymbol{\xi}), & \xi^2 \neq 0, \\ \varepsilon^M, & \xi^2 = 0, \end{cases} \\ (d) \quad & \varepsilon^{i+1} = \text{Re}\{\mathcal{F}^{-1}(\widehat{\varepsilon}^{i+1})\} \\ (e) \quad & \boldsymbol{\sigma}^{i+1}(\mathbf{x}) = \mathbb{C}(\mathbf{x}) : \varepsilon^{i+1}(\mathbf{x}) \\ (f) \quad & \text{Test de convergence} \end{aligned} \quad (2.7)$$

Cet algorithme repose sur une transformée de Fourier et une transformée de Fourier inverse (dont seule la partie réelle est gardée). L'objectif est de convertir la convolution en simple produit et de pouvoir utiliser la formule de l'Équation (2.6) qui nous fournit l'opérateur de Green directement dans l'espace de Fourier. Cette transformation n'a d'intérêt que si elle peut être calculée rapidement. Pour cela, la TFR est utilisée, ce qui nous restreint à des grilles de calcul régulières, c'est-à-dire des maillages voxélisés.

Il est important de noter que la seule opération globale est la TFR, toutes les autres opérations étant locales à un voxel. Par ailleurs, la résolution numérique se fait directement sur le champ de déformation, et satisfait naturellement les conditions aux limites périodiques.

2.1.2 Exemple démonstratif

La méthode numérique basée sur la TFR constitue la sous-couche fondamentale de l'APA sur laquelle j'ai travaillé pendant mon post-doctorat et qui est abordée au Chapitre 3. J'ai

donc découvert et étudié en profondeur la méthode numérique basée sur la TFR pendant mon post-doctorat à la Northwestern University, ce qui m'a été fort utile pour le co-encadrement de la thèse de doctorat de Xiao MA [88]. J'ai notamment intégré à cette méthode une loi modélisant le comportement élasto-plastique avec endommagement des résines époxy [12]. J'ai aussi travaillé sur l'extension de cette méthode aux déformations finies et en particulier avec un modèle de plasticité de von Mises multiplicatif afin de modéliser la plasticité pendant la mise en forme de métaux [15].

Je me restreint à présenter dans cette partie certains travaux issus de la Référence [13] et réalisés dans le cadre d'une collaboration avec Bridgestone Corporation. La méthode numérique basée sur la TFR a été utilisée pour calculer la rigidité du nano-composite présenté dans la Figure 2.1. Ce nano-composite est composé d'une matrice en caoutchouc et de particules de Silice.

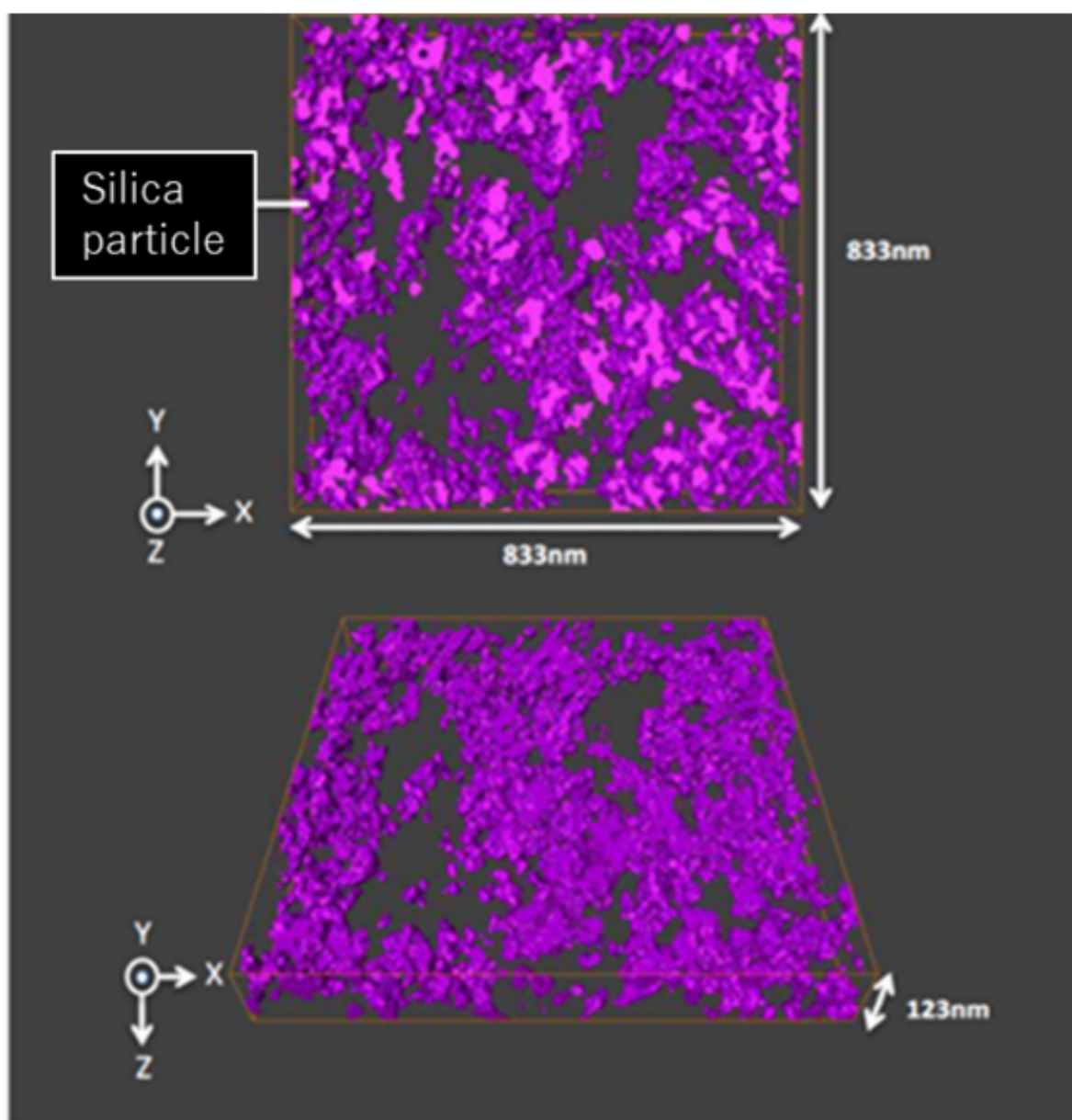


FIGURE 2.1 – Image du nano-composite acquise par micro-tomographie 3D haute résolution à transmission d'électron. Image(s) issue(s) de la Référence [13].

Le comportement des particules de Silice peut être modélisé simplement par une loi de comportement élastique linéaire isotrope. Le caoutchouc est quant à lui un matériau dont le comportement est visco-élastique pour de petites déformations, ce qui signifie que sa réponse mécanique dépend de la fréquence à laquelle il est sollicité. Cette réponse peut être caractérisée par une Analyse Mécanique Dynamique (AMD). Cela consiste à appliquer une contrainte sinusoïdale à une certaine fréquence. La déformation résultante est déphasée en raison du comportement visco-élastique du matériau. L'angle de phase δ caractérise ce déphasage et est généralement présenté sous la forme d'une courbe montrant l'évolution de $\tan(\delta)$ en fonction de la fréquence. À partir de cette courbe, les propriétés élastiques du matériau peuvent être obtenues pour chaque fréquence.

Pour nos calculs, à défaut d'utiliser une loi de comportement visco-élastique, nous avons simplement utilisé une loi de comportement élastique linéaire isotrope pour la matrice caoutchouc et les particules de Silice, et fait un calcul par fréquence. Nous avons ainsi pu utiliser la méthode numérique basée sur la TFR avec l'Algorithme 2.7.

Nous avons supposé pour les particules un module de Young très élevé de 300 MPa et un coefficient de Poisson de 0.19. Pour la matrice caoutchouc, le coefficient de Poisson a été fixé à 0.499 pour obtenir un comportement incompressible et la rigidité a été directement fournie par une AMD effectuée sur des éprouvettes composées de caoutchouc pur, *i.e.*, sans particules.

Nous nous sommes restreint à un volume de calcul de $513 \times 513 \times 75$ voxels, ce qui correspond à un huitième du volume présenté dans la Figure 2.1. Les voxels sont de côté 1.62 nm. Nous avons réalisé les calculs pour 17 fréquences différentes.

La courbe de $\tan(\delta)$ calculée par la méthode numérique basée sur la TFR est comparée aux données expérimentales mesurées par une AMD sur des éprouvettes de nano-composite dans la Figure 2.2. Une légère différence est observable entre la courbe expérimentale et la courbe calculée. L'explication la plus largement répandue dans la littérature est la présence d'une couche composée d'un troisième matériau autour des particules, et dont le comportement ne correspond ni à la matrice ni aux particules. Dans la Référence [13], nous avons proposé une démarche numérique permettant d'identifier par analyse inverse les propriétés élastiques de ce matériau dit d'*interphase* pour chaque fréquence.

L'intérêt de la méthode numérique basée sur la TFR au sein d'une telle démarche est le temps de calcul. En effet, les calculs avec cette méthode nous ont pris entre 100 h et 200 h pour une fréquence, là où un calcul par éléments finis avec un logiciel commercial sur le même maillage voxelisé aurait pris au moins 1000 fois plus de temps d'après nos collaborateurs de Bridgestone Corporation.

Cet exemple d'application démontre assez bien les avantages de la méthode numérique basée sur la TFR :

- une fois segmentée, une image 3D acquise par tomographie peut aisément servir de grille de calcul, sans nécessité de générer ou adapter un maillage,
- il est facile de faire des coupes dans l'image initiale pour effectuer des calculs sur un sous-volume,
- la méthode peut être implémentée aisément dans n'importe quel langage de programmation en s'appuyant sur une librairie existante pour le calcul de la TFR,
- les temps de calcul sont raisonnables, mêmes pour des volumes conséquents.

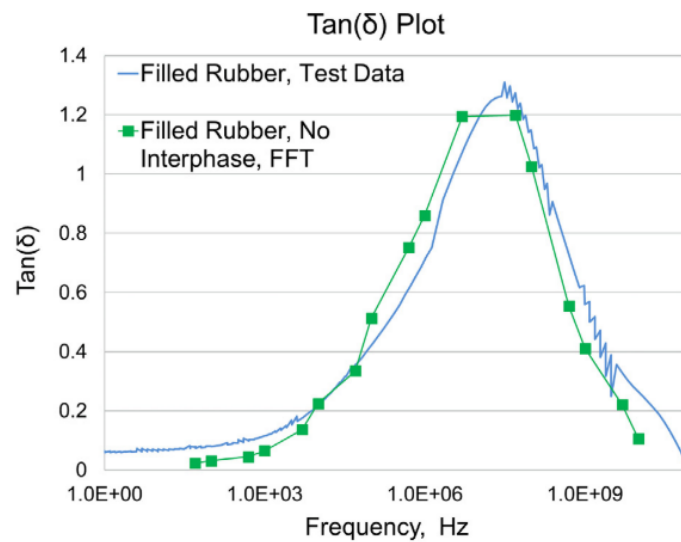


FIGURE 2.2 – Évolution de $\tan(\delta)$ en fonction de la fréquence pour le nano-composite. La courbe bleue représente les données expérimentales mesurées par AMD. La courbe verte représente les résultats de calcul par la méthode numérique basée sur la TFR. Image(s) issue(s) de la Référence [13].

2.2 Causes des oscillations parasites et solutions

Cette Section repose essentiellement sur des travaux publiés dans la Référence [10].

Un des principaux inconvénients de la méthode numérique basée sur la TFR est la présence d'oscillations parasites dans les solutions, comme illustré dans la Figure 2.3. Cet inconvénient est problématique pour l'objectif visé dans ce chapitre car les critères de rupture dépendent des champs locaux et sont donc particulièrement sensibles aux oscillations.

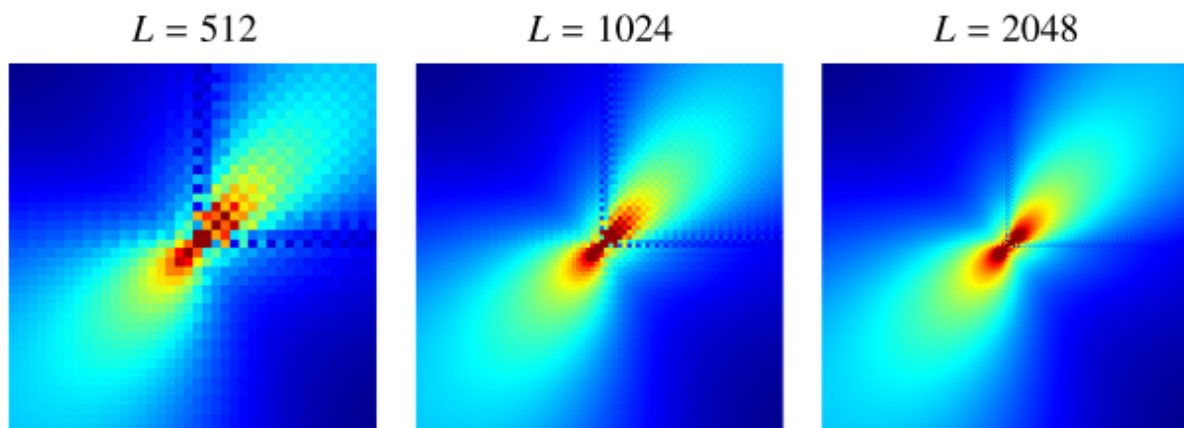


FIGURE 2.3 – Exemple d'oscillations parasites pour un champ de contraintes de cisaillement calculé avec la méthode numérique basée sur la TFR en utilisant différentes résolutions de grilles : 512×512 , 1024×1024 et 2048×2048 . Image(s) issue(s) de la Référence [89].

Dans la thèse de Xiao MA [88], nous avons conduit une investigation approfondie afin d'analyser les sources de ces oscillations. Pour cela, nous avons créé les trois modèles présentés dans la Figure 2.4, où le module de Young et le coefficient de Poisson correspondent à des fibres de verre dans la partie rouge et une matrice époxy dans la partie bleue.

Le chargement appliqué est une tension uni-axiale dans la direction x montrée dans la Figure 2.4. Cela signifie que seule la composante ε_{xx}^M de la déformation macroscopique est imposée, tandis que pour les autres composantes c'est la contrainte macroscopique σ qui est imposée, et ce à une valeur nulle. Cela requière une légère modification de l'Algorithme 2.7. Les détails de cette modification peuvent être trouvés dans la littérature [75, 90].

Le modèle A étant uni-dimensionnel, il devrait mener à un champ de contrainte homogène mais un champ de déformation discontinu. Dans le modèle B, quatre zones de concentration des contraintes sont rajoutées. Dans le modèle C, la discrétisation en zig-zag de l'interface est rajoutée en raison du maillage voxélisé.

L'analyse des oscillations parasites sur les trois modèles et pour différentes variantes de la méthode numérique basée sur la TFR est présentée dans la Sous-section 2.2.1. Un travail spécifique aux oscillations liées à la discrétisation irrégulière des interfaces est présenté dans la Sous-section 2.2.2.

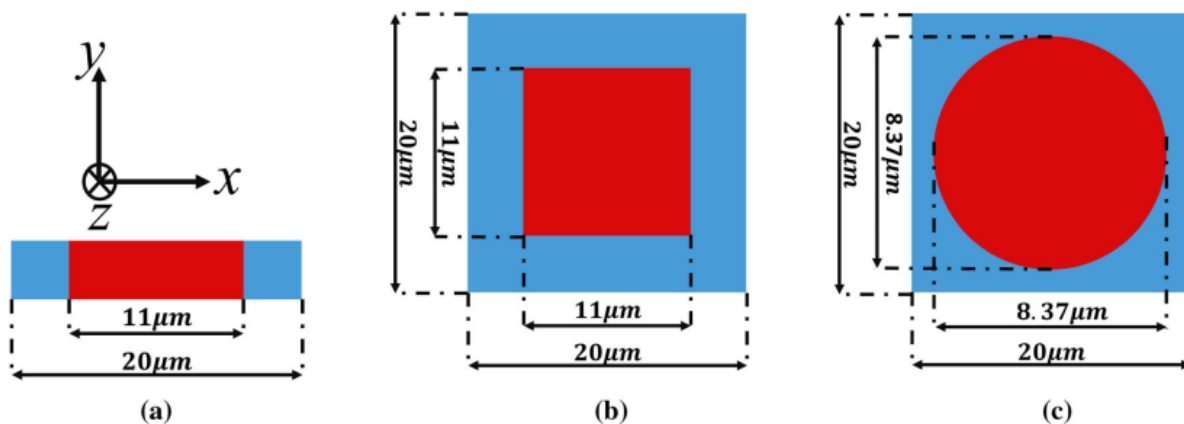


FIGURE 2.4 – Illustration des trois modèles utilisés pour l’analyse des oscillations parasites : (a) modèle A, (b) modèle B et (c) modèle C. Les trois modèles sont discrétisés avec différents maillages voxélisés utilisant une résolution identique dans la direction x et y , et un seul voxel dans la direction z . Image(s) issue(s) de la Référence [10].

2.2.1 Analyse et solutions générales

Nous avons conduit notre analyse avec la méthode numérique basée sur la TFR originale telle que présentée dans la Sous-section 2.1.1, mais aussi avec deux variantes proposées dans la littérature. La première variante, appelée méthode de Willot, s’inspire de la méthode des différences finies et notamment d’un schéma dit *tourné* [89]. La discrétisation des opérateurs divergence et gradient est modifiée, ce qui a pour conséquence de mener à un opérateur de Green différent. De manière similaire, la seconde variante, appelée méthode de Schneider, consiste à s’inspirer de la méthode des EFs et mène à un opérateur de Green différent selon qu’une intégration réduite (un point d’intégration par voxel) soit utilisée ou une intégration complète (huit points d’intégration par voxel) [89].

Dans le cas réduit, les deux variantes sont équivalentes et mènent au même résultat, qui doit théoriquement correspondre avec un calcul par la méthode des EFs avec intégration réduite. Dans le cas complet, la méthode de Schneider nécessite de modifier l’Algorithme 2.7 afin d’effectuer les calculs huit fois par voxel. L’opérateur de Green est lui aussi modifié et discrétisé en huit points d’intégration par voxel. Cette méthode doit théoriquement mener au même résultat qu’un calcul par la méthode des EFs avec intégration complète. Nous avons implémenté toutes ces variantes dans un code *Python*.

Comme métrique pour évaluer la précision de ces différentes variantes, nous avons analysé le saut $D_j = \varepsilon_{j+1} - \varepsilon_j$ de la première composante du champ de déformation le long d’une ligne déterminée. Nous avons ensuite calculé pour chaque variante α l’erreur absolue $MD_j = |D_j^\alpha - D_j^{REF}|$ par rapport à une solution de référence *REF* calculée par la méthode des EFs sur le même maillage voxélisé. Enfin, nous avons calculé une erreur absolue moyenne \overline{MD} en moyennant MD sur toute une ligne.

Pour les modèles A et B, la solution de référence a été obtenue par la méthode des EFs avec intégration complète. Pour le modèle C, la solution de référence a été obtenue par la méthode des EFs avec intégration réduite mais un maillage non voxélisé adapté à la géométrie et de résolution équivalente.

Nous observons dans la Figure 2.5 que la méthode numérique basée sur la TFR mène systématiquement à un résultat exact à la précision machine près pour le modèle A, et ce quelle que

soit la variante. Le champ de contraintes obtenu est bien homogène, et le champ de déformation est bien discontinu. Par conséquent, ce modèle nous a permis d'éliminer les explications basées sur le théorème de Shannon ou le phénomène de Gibbs.

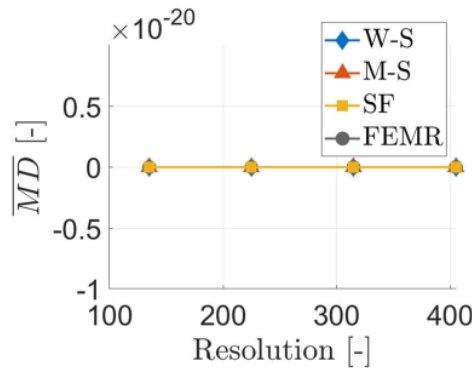


FIGURE 2.5 – Erreur absolue moyenne \overline{MD} le long d'une ligne horizontale pour le modèle A en utilisant différentes résolutions. Les variantes sont notées *M-S* pour la méthode originale basée sur l'Équation (2.6), *W-S* pour la méthode de Willot et *SF* pour la méthode de Schneider avec intégration complète. La solution obtenue par la méthode des EFs avec intégration réduite est notée *FEMR*. Image(s) issue(s) de la Référence [10].

En ce qui concerne le modèle B, les résultats sont présentés dans la Figure 2.6. Nous observons que la méthode de Willot correspond bien avec la méthode des EFs avec intégration réduite, et mène à de meilleurs résultats que la méthode originale. Les modes de déformations parasites ont un rôle non négligeable dans ce modèle, puisque la méthode de Schneider mène à de meilleurs résultats que la méthode des EFs avec intégration réduite. Cela nous a permis de confirmer la présence des modes de sablier dans la méthode numérique basée sur la TFR.

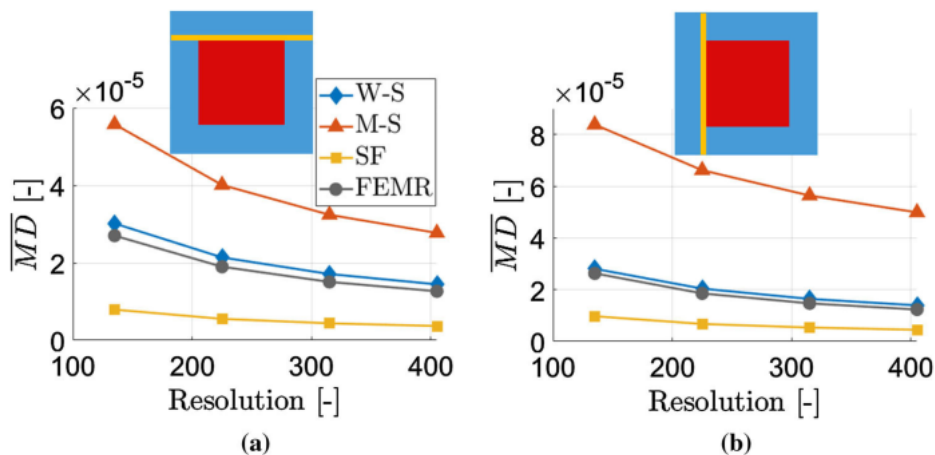


FIGURE 2.6 – Erreur absolue moyenne \overline{MD} pour le modèle B en utilisant différentes résolutions : (a) le long d'une ligne horizontale et (b) le long d'une ligne verticale. Les variantes sont notées *M-S* pour la méthode originale basée sur l'Équation (2.6), *W-S* pour la méthode de Willot et *SF* pour la méthode de Schneider avec intégration complète. La solution obtenue par la méthode des EFs avec intégration réduite est notée *FEMR*. Image(s) issue(s) de la Référence [10].

Les résultats pour le modèle C sont présentés dans la Figure 2.7. La correspondance entre

la méthode de Willot et la méthode des EFs avec intégration réduite est retrouvée, ainsi que la correspondance entre la méthode de Schneider et la méthode des EFs avec intégration complète. De manière surprenante, c'est la méthode originale qui semble conduire à de meilleurs résultats. Cela est dû au fait que pour le modèle C c'est la discrétisation en *zig-zag* de l'interface qui est la cause dominante des oscillations, et qu'aucune des variantes considérées n'a été créée pour gérer cet aspect du problème.

En outre, en comparant les échelles entre la Figure 2.6 et la Figure 2.7, il apparaît que la discrétisation irrégulière de l'interface mène à des erreurs plus grandes que les modes de sablier.

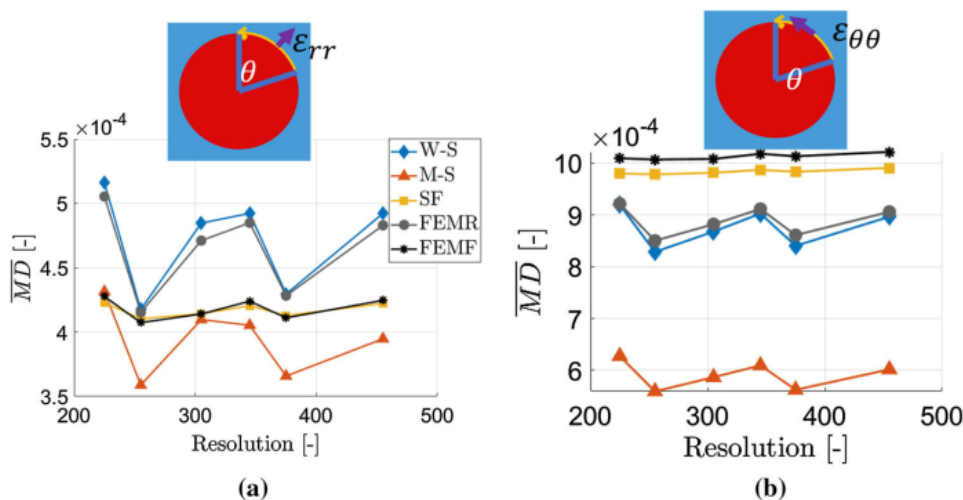


FIGURE 2.7 – Erreur absolue moyenne \overline{MD} le long de l'interface pour le modèle C en utilisant différentes résolutions : (a) composante radiale du champ de déformation et (b) composante tangentielle du champ de déformation. Les variantes sont notées *M-S* pour la méthode originale basée sur l'Équation (2.6), *W-S* pour la méthode de Willot et *SF* pour la méthode de Schneider avec intégration complète. Les solutions obtenues par la méthode des EFs sont notées *FEMR* pour l'intégration réduite et *FEMF* pour l'intégration complète. Image(s) issue(s) de la Référence [10].

Pour résumer, cette analyse sur trois modèles nous a permis de confirmer la présence d'oscillations parasites dans les solutions calculées par la méthode numérique basée sur la TFR. Les deux causes que nous avons pu confirmer sont l'utilisation d'une intégration réduite et d'une discrétisation voxélisée de l'interface. La méthode de Schneider peut sembler plus intéressante car elle élimine totalement les modes de sablier dus à l'intégration réduite, mais le surcôt lié aux huit points d'intégration par voxel ne nous a pas semblé justifier son utilisation. En effet, les oscillations dues à l'intégration réduite sont d'une amplitude bien inférieure à celles dues à la discrétisation irrégulière de l'interface.

En ce qui concerne la comparaison entre la méthode originale et celle de Willot, les analyses présentées dans cette partie semblent montrer que la méthode de Willot a peu d'intérêt, notamment sur le modèle C. Nous avons conduit des analyses complémentaires dans la Référence [10] qui nous ont révélé que les erreurs à l'interface peuvent effectivement être parfois supérieures avec la méthode de Willot par rapport à la méthode originale, mais sur l'ensemble du domaine la méthode de Willot est globalement plus précise.

Étant donné qu'aucune des méthodes envisagées dans cette partie ne traite réellement le problème lié à la discrétisation en *zig-zag* de l'interface, nous nous sommes intéressé dans un second temps aux méthodes traitant spécifiquement ce problème.

2.2.2 Solutions pour les interfaces

Afin de réduire les oscillations dues à la discrétisation irrégulière de l'interface, la méthode des voxels composites a été proposée dans la littérature [91]. Dans le modèle C, la discrétisation en *zig-zag* est causée par la nécessité d'attribuer un matériau (fibre ou matrice) unique à chaque voxel. La méthode des voxels composites consiste à autoriser la présence de deux matériaux à l'intérieur d'un voxel. La fraction volumique occupée localement par chaque matériau à l'intérieur du voxel est utilisée pour calculer une réponse mécanique homogénéisée localement. Il est possible pour cela d'utiliser la loi des mélanges ou tout autre approche analytique permettant de calculer la réponse mécanique du matériau dans ce voxel composite.

Les auteurs de la Référence [91] ont obtenu leurs meilleurs résultats avec une approche basée sur la théorie classique des laminés. Cette approche n'est pas détaillée dans cette partie, mais il est important de mentionner qu'elle nécessite de connaître non seulement la fraction volumique mais aussi le vecteur normal à l'interface dans chaque voxel.

Pour calculer ces deux informations locales, les auteurs de la Référence [91] ont proposé de sous-diviser chaque voxel traversé par l'interface en sous-voxels. Un matériau (fibre ou matrice) est alors attribué à chaque sous-voxel et différentes moyennes sont calculées pour obtenir la fraction volumique et le vecteur normal pour le voxel. Cette approche est assez simple à mettre en œuvre lorsque l'interface est fournie sous forme paramétrique. Par exemple, pour le modèle C, le centre et le rayon du cercle sont connus, ce qui permet facilement d'attribuer un matériau à chaque sous-voxel. Dans le cas général, si la géométrie est fournie sous la forme d'une image acquise par tomographie, cela peut être plus ardu.

Dans la thèse de Xiao MA [88], nous avons proposé une approche alternative s'appuyant sur les Fonctions De Niveau (FDNs, Équation (1.4)) et les fonctions de Heaviside régularisées (Équation (1.21)). Nous utilisons directement la valeur de la fonction de Heaviside régularisée dans chaque voxel comme fraction volumique locale, et le gradient de la fonction de Heaviside régularisée comme vecteur normal local.

Comme mentionné dans la Sous-section 1.1.2, l'intérêt des FDNs est qu'elles peuvent facilement être calculées pour toute géométrie, que celle-ci soit représentée paramétriquement ou sous la forme d'une image. Le calcul de fonctions de Heaviside régularisées ne pose pas non plus de grande difficulté, si ce n'est la définition de l'épaisseur de la couche de transition où des voxels composites vont être introduits. Nous avons choisi une épaisseur de deux voxels afin d'avoir systématiquement au moins un voxel composite à l'interface, et au maximum un voxel côté matrice et un voxel côté fibre. Cette approche diffère avec la méthode des voxels composites originale, qui se restreint seulement aux voxels traversés par l'interface.

Un exemple de résultat pour le modèle C est présenté dans la Figure 2.8. Cette figure montre bien l'intensité des oscillations et leur réduction avec les voxels composites.

Nous avons conduit des analyses plus poussées dans la Référence [10] afin de vérifier que notre approche basée sur les FDNs donne des résultats comparables à l'approche voxels composites originale de la Référence [91]. Cela nous a permis de conclure que la combinaison de la méthode de Willot avec la méthode des voxels composites basée sur une FDN est une combinaison intéressante en termes de précision, de simplicité de mise en œuvre et de temps de calcul.

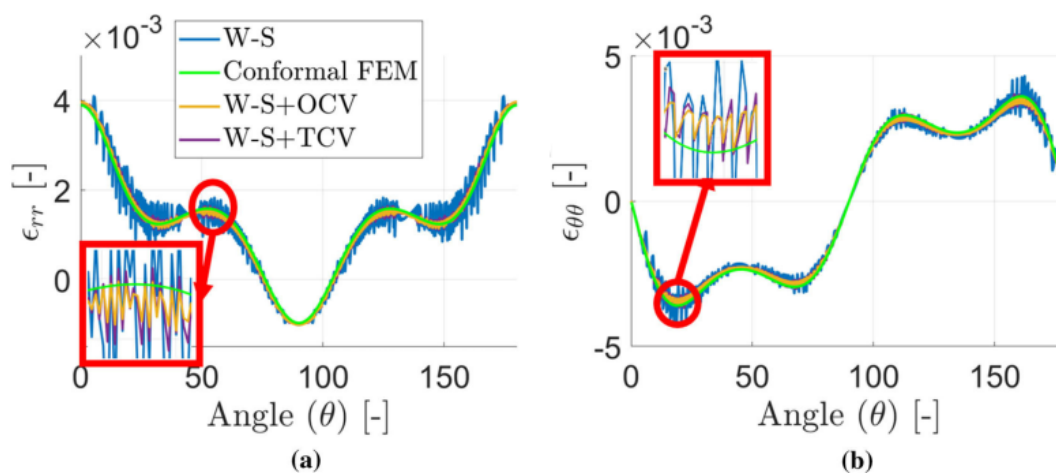


FIGURE 2.8 – Champ de déformation le long de l’interface pour le modèle C en utilisant une résolution de $375 \times 375 \times 1$ voxels : (a) composante radiale du champ de déformation et (b) composante tangentielle du champ de déformation. La méthode de Willot est systématiquement utilisée pour l’opérateur de Green. Les variantes sont notées *W-S* pour la méthode sans voxels composites, *W-S+TCV* pour la méthode des voxels composites originale et *W-S+OCV* pour la méthode des voxels composites que nous avons proposée. La solution *Conformal FEM* est celle obtenue par la méthode des EFs avec intégration réduite et un maillage adapté à l’interface et de résolution équivalente. Image(s) issue(s) de la Référence [10].

2.3 Approche champ de phase pour la rupture

L'Algorithme 2.7 suppose un comportement linéaire du matériau. Cet algorithme s'applique néanmoins sans grande difficulté aux comportements non linéaires, bien que cela puisse augmenter significativement le nombre d'itérations de point fixe. La modélisation par champ de phase introduit une variable supplémentaire, le champ de phase d , et une équation supplémentaire à résoudre pour cette variable. La résolution de cette équation par la méthode numérique basée sur la TFR n'est pas triviale mais a déjà été traitée dans des travaux à l'IMT Nord Europe antérieurs à mon arrivée et à la thèse de doctorat de Xiao MA [85].

La méthode de résolution était basée sur une version simplifiée de l'équation d'évolution du champ de phase. Cette simplification a été levée dans la thèse de doctorat de Xiao MA [88] et son influence sur les résultats a été évaluée. L'algorithme de résolution avec et sans simplification est présenté dans la Sous-section 2.3.1.

Les premières tentatives d'application de ce modèle de champ de phase sur des matériaux hétérogènes et en particulier des composites a très vite montré des limites. Celles-ci étaient dues à la dépendance des résultats vis-à-vis de la longueur de régularisation introduite par le modèle. Cela nous a amené à nous intéresser à un autre modèle de champ de phase où cette longueur de régularisation joue le rôle de paramètre numérique et non matériau. Ces travaux sont résumés dans la Sous-section 2.3.2.

2.3.1 Modèle de Miehe

Cette Sous-section repose essentiellement sur des travaux publiés dans la Référence [6].

Le modèle implémenté dans la Référence [85] est le modèle de Miehe [80, 81]. Ce modèle est brièvement présenté dans le Paragraphe 2.3.1.1. Les détails de l'approche variationnelle permettant de le construire peuvent être trouvés dans la littérature Référence [80, 81].

La méthode numérique basée sur la TFR pour résoudre les équations de ce modèle est présentée dans le Paragraphe 2.3.1.1. La simplification utilisée dans la Référence [85] implique notamment une légère modification de l'algorithme.

Des résultats de simulation montrant l'intérêt de l'implémentation du modèle complet, sans simplification, sont présentés dans le Paragraphe 2.3.1.3.

2.3.1.1 Modèle

Le modèle de Miehe repose sur une décomposition additive en partie tension et compression du champ de déformation :

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \sum_{n=1}^3 \varepsilon_n \mathbf{p}_n \otimes \mathbf{p}_n = \boldsymbol{\varepsilon}^+ + \boldsymbol{\varepsilon}^-,$$

où ε_n et \mathbf{p}_n désignent respectivement les valeurs propres et les vecteurs propres du tenseur de déformation. Les parties tension $\boldsymbol{\varepsilon}^+$ et compression $\boldsymbol{\varepsilon}^-$ peuvent être obtenues par les relations

$$\boldsymbol{\varepsilon}^+ = \sum_{n=1}^3 \langle \varepsilon_n \rangle^+ \mathbf{p}_n \otimes \mathbf{p}_n, \text{ et } \boldsymbol{\varepsilon}^- = \sum_{n=1}^3 \langle \varepsilon_n \rangle^- \mathbf{p}_n \otimes \mathbf{p}_n,$$

où $\langle w \rangle^+ = \frac{w + |w|}{2}$ est l'opérateur partie positive et $\langle w \rangle^- = \frac{w - |w|}{2}$ l'opérateur partie négative. Cette décomposition additive du tenseur de déformation permet de n'atténuer la rigidité du

matériau que dans les points du domaine où le chargement est dominé par la tension, de sorte que la présence d'une fissure n'affecte pas la rigidité du matériau en compression. Le tenseur des contraintes de Cauchy est ainsi donné par

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t) = g(d(\mathbf{x}, t)) (\lambda(\mathbf{x}) \langle \text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}, t)) \rangle^+ \mathbf{I} + 2\mu(\mathbf{x}) \boldsymbol{\varepsilon}^+(\mathbf{x}, t)) + (\lambda(\mathbf{x}) \langle \text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}, t)) \rangle^- \mathbf{I} + 2\mu(\mathbf{x}) \boldsymbol{\varepsilon}^-(\mathbf{x}, t)), \quad (2.8)$$

où g est la fonction de dégradation énergétique donnée par $g(d) = (1 - d)^2$, avec d le champ de phase. Les paramètres de Lamé λ et μ varient spatialement en raison de l'hétérogénéité du matériau.

La décomposition additive intervient aussi dans l'expression de l'énergie de déformation initiale

$$\phi_0^+(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2} \lambda(\mathbf{x}) (\langle \text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}, t)) \rangle^+)^2 + \mu(\mathbf{x}) \boldsymbol{\varepsilon}^+(\mathbf{x}, t) : \boldsymbol{\varepsilon}^+(\mathbf{x}, t),$$

qui permet de définir la variable d'histoire du modèle de champ de phase

$$\mathcal{H}(\mathbf{x}, t) = \max_{s \leq t} \phi_0^+(\mathbf{x}, s).$$

L'utilisation de cette variable d'histoire permet de garantir l'irréversibilité de l'endommagement $\dot{d} \geq 0$ et de restreindre les valeurs de d dans l'intervalle $[0, 1]$. Cette variable intervient dans la loi d'évolution du champ de phase

$$g'(d(\mathbf{x}, t)) \mathcal{H}(\mathbf{x}, t) + \frac{G_c(\mathbf{x})}{l_c(\mathbf{x})} d(\mathbf{x}, t) - \nabla \cdot (G_c(\mathbf{x}) l_c(\mathbf{x}) \nabla d(\mathbf{x}, t)) = 0, \mathbf{x} \in \Omega. \quad (2.9)$$

Cette loi fait intervenir le taux de dissipation d'énergie critique de Griffith G_c et la longueur de régularisation l_c , qui sont toutes deux des propriétés du matériau. Elles varient spatialement en raison de l'hétérogénéité du matériau.

Par rapport aux modèles d'endommagement continu, le modèle de champ de phase a l'intérêt de rassembler plusieurs opérations dans une seule équation : l'évolution de la variable d'endommagement d , sa régularisation avec le terme de diffusion et son irréversibilité avec la variable d'histoire \mathcal{H} .

Dans la Référence [85], l'Équation (2.9) a été simplifiée sous la forme

$$g'(d(\mathbf{x}, t)) \mathcal{H}(\mathbf{x}, t) + \frac{G_c(\mathbf{x})}{l_c(\mathbf{x})} d(\mathbf{x}, t) - G_c(\mathbf{x}) l_c(\mathbf{x}) \Delta d(\mathbf{x}, t) = 0, \mathbf{x} \in \Omega, \quad (2.10)$$

ce qui revient à négliger le terme $\nabla \cdot (G_c(\mathbf{x}) l_c(\mathbf{x})) \cdot \nabla d(\mathbf{x}, t)$. Ce terme est nul dans le cas d'un matériau homogène mais il peut avoir une influence non négligeable dans le cas d'un matériau hétérogène.

2.3.1.2 Méthode numérique

Bien que ce travail se restreigne à des analyses en statique, les simulations sont conduites sur plusieurs incréments de temps correspondants en réalité à des incréments de chargement (le temps est purement fictif). Il est visible dans l'Équation (2.8) que le problème d'équilibre à résoudre pour $\boldsymbol{\varepsilon}$ dépend de d à travers la fonction de dégradation g . De même, dans l'Équation (2.9), l'équation à résoudre pour d dépend de $\boldsymbol{\varepsilon}$ à travers la variable d'histoire \mathcal{H} . Pour résoudre ce problème, un couplage faible est adopté dans cette section, ce qui implique l'utilisation d'un pas de temps assez petit. Le problème d'équilibre est d'abord résolu avec le champ de phase calculé au pas de temps précédent, puis la déformation obtenue est utilisée pour résoudre l'équation d'évolution du champ de phase.

Avec ce couplage faible, l'Algorithme 2.7 peut être utilisé pour résoudre le problème d'équilibre. La seule modification à faire est le calcul de la contrainte, qui doit reposer sur l'Équation (2.8). Celle-ci ne pose pas de difficulté malgré la non linéarité de l'Équation (2.8) causée par la séparation entre tension et compression. Afin de réduire le nombre d'itérations, le schéma de point fixe est accéléré avec l'algorithme d'Anderson. Celui-ci est déjà implémenté dans le logiciel *AMITEX*, qui a été utilisé dans les développements précédents [85]. L'opérateur de Green de l'Équation (2.6) est utilisé dans cette section.

Le seul verrou à lever est donc la résolution numérique de l'Équation (2.9). Pour cela, l'approche basée sur les fonctions de Green et la TFR présentée dans la Section 2.1 peut servir d'inspiration. Pour cela, il s'agit de remplacer dans un premier temps $g'(d) = -2(1 - d)$ par son expression dans l'Équation (2.9) pour obtenir

$$\left(2\mathcal{H}(\mathbf{x}, t) + \frac{G_c(\mathbf{x})}{l_c(\mathbf{x})}\right)d(\mathbf{x}, t) - \nabla \cdot (G_c(\mathbf{x})l_c(\mathbf{x})\nabla d(\mathbf{x}, t)) = 2\mathcal{H}(\mathbf{x}, t).$$

Deux opérateurs peuvent être identifiés dans le membre gauche de cette équation. Ils correspondent aux parties réaction et diffusion, et comportent tous deux des coefficients hétérogènes. Pour les éliminer du membre gauche les fonctions $A(\mathbf{x}) = 2\mathcal{H}(\mathbf{x}, t) + \frac{G_c(\mathbf{x})}{l_c(\mathbf{x})}$ et $Q(\mathbf{x}) = G_c(\mathbf{x})l_c(\mathbf{x})$ et les constantes de référence

$$A^0 = \frac{\max_{\mathbf{x} \in \Omega} A(\mathbf{x}) + \min_{\mathbf{x} \in \Omega} A(\mathbf{x})}{2} \text{ et } Q^0 = \frac{\max_{\mathbf{x} \in \Omega} Q(\mathbf{x}) + \min_{\mathbf{x} \in \Omega} Q(\mathbf{x})}{2}$$

sont introduites. Ensuite les opérateurs avec coefficients homogènes dans le membre gauche sont insérés pour obtenir

$$A^0 d(\mathbf{x}, t) - Q^0 \Delta d(\mathbf{x}, t) = 2\mathcal{H}(\mathbf{x}, t) - (A(\mathbf{x}) - A^0)d(\mathbf{x}, t) + \nabla \cdot ((Q(\mathbf{x}) - Q^0)\nabla d(\mathbf{x}, t)).$$

Cela permet d'identifier le champ de polarisation

$$\eta(\mathbf{x}) = 2\mathcal{H}(\mathbf{x}, t) - (A(\mathbf{x}) - A^0)d(\mathbf{x}, t) + \nabla \cdot ((Q(\mathbf{x}) - Q^0)\nabla d(\mathbf{x}, t)).$$

Dans l'espace de Fourier, la solution

$$\widehat{d} = \frac{\widehat{\eta}}{A^0 + Q^0 \xi^2}$$

est ainsi obtenue. De même que dans la Section 2.1, la dépendance du champ de polarisation vis-à-vis de la solution nous amène à utiliser un algorithme de point fixe :

Initialisation :

$$\begin{aligned}
 (a_0) \quad & d^1(\mathbf{x}) = 0 \\
 (b_0) \quad & A(\mathbf{x}) = 2\mathcal{H}(\mathbf{x}, t) + \frac{G_c(\mathbf{x})}{l_c(\mathbf{x})} \text{ et } Q(\mathbf{x}) = G_c(\mathbf{x})l_c(\mathbf{x}) \\
 (c_0) \quad & A^0 = \frac{\max_{\mathbf{x} \in \Omega} A(\mathbf{x}) + \min_{\mathbf{x} \in \Omega} A(\mathbf{x})}{2} \text{ et } Q^0 = \frac{\max_{\mathbf{x} \in \Omega} Q(\mathbf{x}) + \min_{\mathbf{x} \in \Omega} Q(\mathbf{x})}{2}
 \end{aligned}$$

Itération ($i + 1$) :

$$\begin{aligned}
 & d^i \text{ connu} \\
 (a) \quad & \eta^i(\mathbf{x}) = 2\mathcal{H}(\mathbf{x}, t) - (A(\mathbf{x}) - A^0) d^i(\mathbf{x}, t) + \nabla \cdot ((Q(\mathbf{x}) - Q^0) \nabla d^i(\mathbf{x}, t)) \\
 (b) \quad & \tilde{\eta}^i = \mathcal{F}(\eta^i) \\
 (c) \quad & \tilde{d}^{i+1} = \frac{\tilde{\eta}^i}{A^0 + Q^0 \xi^2} \\
 (d) \quad & d^{i+1} = \text{Re}\{\mathcal{F}^{-1}(\tilde{d}^{i+1})\} \\
 (e) \quad & \text{Test de convergence}
 \end{aligned} \tag{2.11}$$

La simplification entre l'Équation (2.9) et l'Équation (2.10) n'a aucune influence visible sur l'algorithme car le membre gauche provient des termes de référence qui reposent systématiquement sur des coefficients constants. C'est dans le calcul du champ de polarisation que cette simplification influe. Avec la simplification, en effet, nous obtenons dans l'étape (a) de l'Algorithme 2.11

$$\begin{aligned}
 \eta^i &= 2\mathcal{H} - (A - A^0) d^i + (Q - Q^0) \Delta d^i \\
 &= 2\mathcal{H} - (A - A^0) d^i - (Q - Q^0) \mathcal{F}^{-1}(\xi^2 \mathcal{F}(d^i)),
 \end{aligned}$$

tandis que sans simplification nous avons

$$\begin{aligned}
 \eta^i &= 2\mathcal{H} - (A - A^0) d^i + \nabla \cdot ((Q - Q^0) \nabla d^i) \\
 &= 2\mathcal{H} - (A - A^0) d^i + \mathcal{F}^{-1}(J\xi \mathcal{F}((Q - Q^0) \mathcal{F}^{-1}(J\xi \mathcal{F}(d^i)))).
 \end{aligned}$$

Ce calcul implique un aller-retour supplémentaire vers l'espace de Fourier dans le cas sans simplification.

2.3.1.3 Résultats

Les simulations présentées dans cette partie sont basées sur un cas test avec deux moitiés de fibres plus ou moins proches l'une de l'autre. L'étude de l'influence de la distance entre les fibres sur la réponse mécanique de ce matériau a été fondamentale pour comprendre les limites de la méthode simplifiée. L'étude du rôle de cette distance par rapport à la longueur de régularisation du modèle de Miehe a également été d'une importance capitale puisqu'elle a motivé le travail sur le modèle de Wu qui est présenté dans la Sous-section 2.3.2.

Le modèle avec les deux moitiés de fibres écartées de $3.29 \mu\text{m}$ est montré dans la Figure 2.9. Ce modèle est discrétisé avec une grille de $225 \times 225 \times 1$ voxels, ce qui correspond à une taille de voxel de 88.9 nm . Des fibres de verre avec un module de Young de 74 GPa , un coefficient de Poisson de 0.2 et un taux de dissipation d'énergie critique de 60 N mm^{-1} sont considérées, ainsi qu'une matrice époxy avec un module de Young de 4650 MPa , un coefficient de Poisson de 0.35 et un taux de dissipation d'énergie critique de 0.96 N m^{-1} .

La longueur l_c est supposée homogène et différentes simulations avec des valeurs allant de $0.54 \mu\text{m}$ à $3.30 \mu\text{m}$ sont conduites. Dans tous les cas, la valeur de l_c satisfait le critère de Miehe, qui impose que l_c soit supérieure à deux fois la taille de voxel.

Le chargement appliqué est une tension uni-axiale dans la direction x montrée dans la Figure 2.9, avec un pas de chargement de 5×10^{-7} .

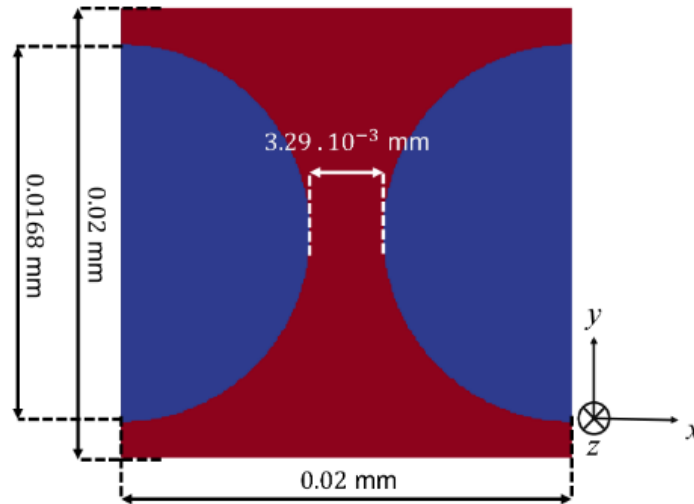


FIGURE 2.9 – Modèle utilisé pour étudier l’influence de la simplification de la loi d’évolution du champ de phase. Les fibres sont en bleu et la matrice en rouge. Image(s) issue(s) de la Référence [6].

Avec les valeurs de G_c utilisées pour la matrice et les fibres, la fissuration des fibres est quasi-impossible dans ce cas test, et ce quelle que soit la valeur de l_c . Avec la méthode simplifiée, pourtant, un endommagement des fibres est observable, avec une valeur maximale du champ de phase d dans les fibres non nulle et même croissante avec une longueur l_c plus grande. Cela est démontré par la Table 2.1.

l_c	$0.54 \mu\text{m}$	$0.81 \mu\text{m}$	$1.30 \mu\text{m}$	$2.20 \mu\text{m}$	$3.30 \mu\text{m}$
$\max_{x \in \text{fibres}} d(x)$	0.15	0.24	0.38	0.56	0.68

TABLE 2.1 – Champ de phase maximal calculé à l’intérieur des fibres à l’état final (*i.e.*, après rupture) avec la méthode simplifiée pour différentes valeurs de la longueur de régularisation.

La Figure 2.10 montre bien qu’avec une valeur de l_c de plus en plus grande, il y a clairement un endommagement des fibres. Il semble même que le champ de phase soit uni-dimensionnel, avec une évolution dans la direction x et aucun changement visible dans la direction y , et ce malgré la présence des fibres.

L’endommagement des fibres est d’autant plus clair dans la Figure 2.11, qui montre l’évolution du champ de phase le long d’une ligne horizontale. Clairement, un endommagement des fibres est observable, même avec la valeur de l_c la plus petite. Cet endommagement des fibres est plus intense avec une valeur de l_c plus grande. Ce phénomène semble s’apparenter à de la diffusion.

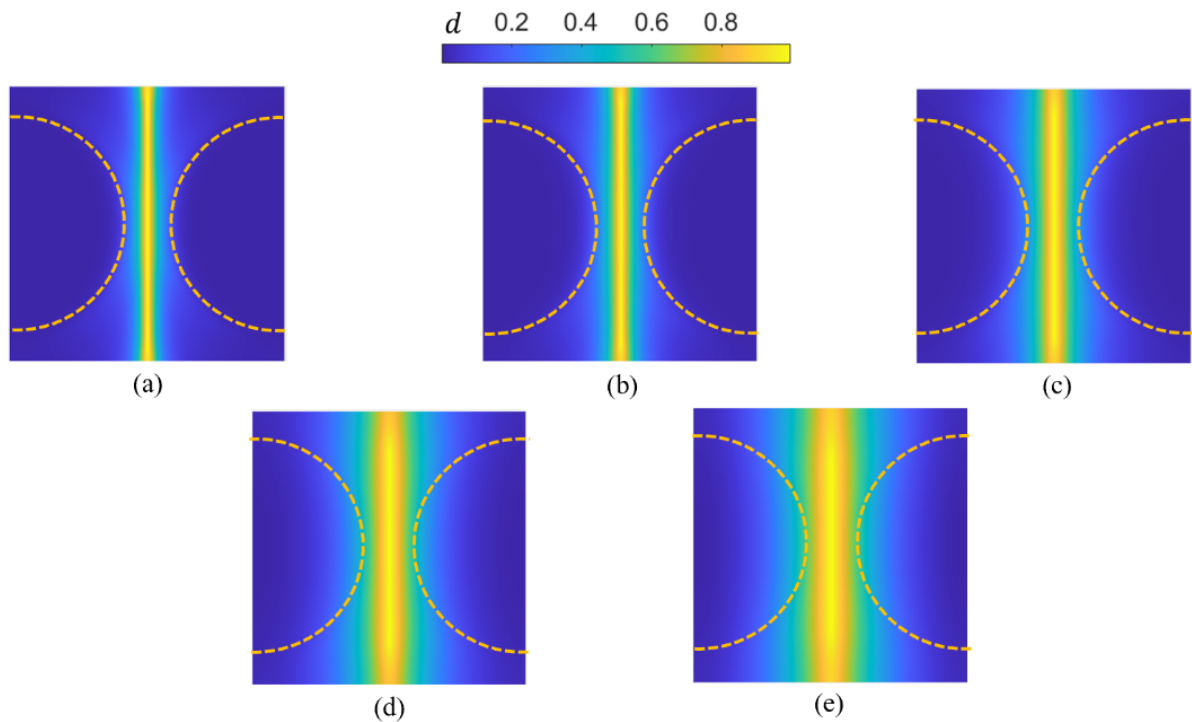


FIGURE 2.10 – Champ de phase à l'état final (*i.e.*, après rupture) pour les différentes simulations avec la méthode simplifiée et une longueur l_c de : (a) $0.54 \mu\text{m}$, (b) $0.81 \mu\text{m}$, (c) $1.30 \mu\text{m}$, (d) $2.20 \mu\text{m}$ et (e) $3.30 \mu\text{m}$. L'interface fibres/matrice est délimitée en pointillés. Image(s) issue(s) de la Référence [6].

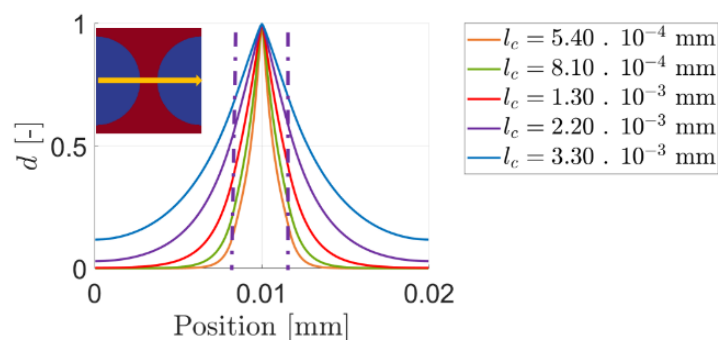


FIGURE 2.11 – Évolution du champ de phase le long d'une ligne horizontale à l'état final (*i.e.*, après rupture) pour les différentes simulations avec la méthode simplifiée. L'interface fibres/matrice est délimitée en pointillés. Image(s) issue(s) de la Référence [6].

Pour vérifier cette hypothèse, des valeurs de G_c encore plus grandes sont utilisées pour les fibres. Les résultats sont présentés dans la Figure 2.12. Clairement, une diffusion de l'endommagement de la matrice vers les fibres est observable, et ce même en utilisant une valeur absurdement grande pour le taux de dissipation d'énergie critique des fibres. De fait, cette propriété ne semble pas influencer les résultats, ce qui indique que la valeur de 60 N mm^{-1} utilisée dans les premières simulations était déjà assez grande.

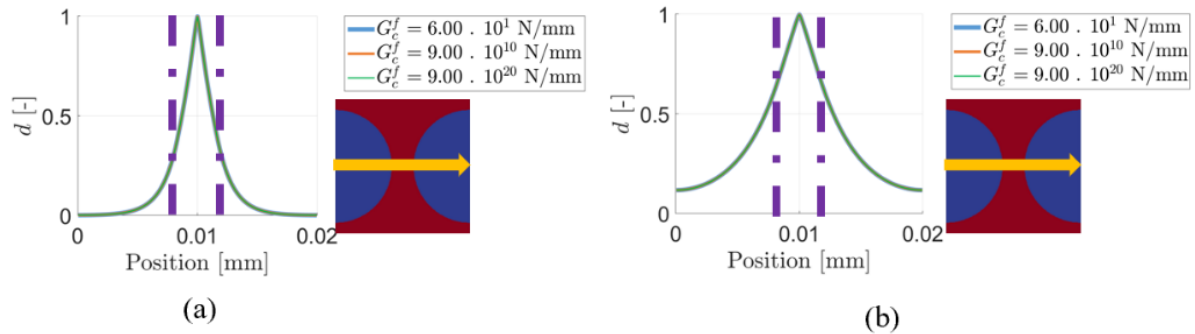


FIGURE 2.12 – Évolution du champ de phase le long d'une ligne horizontale à l'état final (*i.e.*, après rupture) pour les simulations avec la méthode simplifiée, un taux de dissipation d'énergie critique des fibres encore plus grand et une valeur de l_c de : (a) $1.30 \mu\text{m}$ et (b) $3.30 \mu\text{m}$. L'interface fibres/matrice est délimitée en pointillés. Image(s) issue(s) de la Référence [6].

L'intérêt est porté dans les simulations suivantes vers la formulation complète. Le premier résultat est que la valeur maximale du champ de phase d dans les fibres reste nulle quelle que soit la valeur de l_c , et ce à la précision machine près.

Les champs de phase après rupture pour la méthode complète sont montrés dans la Figure 2.13. La comparaison avec la Figure 2.10 montre bien l'influence de la simplification. Avec la méthode complète, le champ de phase varie dans les deux directions. En effet, les fibres semblent constituer un goulot d'étranglement restreignant l'endommagement dans la direction horizontale au centre du domaine.

La Figure 2.14 démontre clairement que la méthode complète permet d'obtenir une transition nette entre le champ de phase dans la matrice et celui dans les fibres. L'influence de l_c sur cette transition est complètement éliminée.

Il convient aussi de s'intéresser à la réponse macroscopique calculée avec ces simulations à l'échelle des fibres. Les courbes contrainte-déformation pour les deux méthodes et les différentes valeurs de l_c sont présentés dans la Figure 2.15. Ces courbes démontrent l'influence non négligeable de la diffusion de l'endommagement à travers les interfaces dans la méthode simplifiée sur la réponse mécanique macroscopique. La méthode complète semble donc essentielle pour la modélisation numérique de la rupture dans les matériaux hétérogènes, et ce à un niveau local comme global. D'autres exemples et analyses peuvent être trouvés dans la Référence [6].

Au-delà de cette influence de la simplification de la loi d'évolution du champ de phase, la Figure 2.15 révèle aussi une limite du modèle de Miehe. En effet, la résistance à la rupture prédite par les simulations dépend de la valeur de l_c . Ainsi, une résistance au-dessus de 30 MPa pour $l_c = 0.54 \mu\text{m}$ et $3.30 \mu\text{m}$ est observable, et une résistance en-dessous de 30 MPa pour les autres valeurs de l_c . Cette influence de l_c sur les résultats est bien connue pour le modèle de Miehe, et a suscité un intérêt pour des modèles s'affranchissant de cette limite dans la littérature récente.

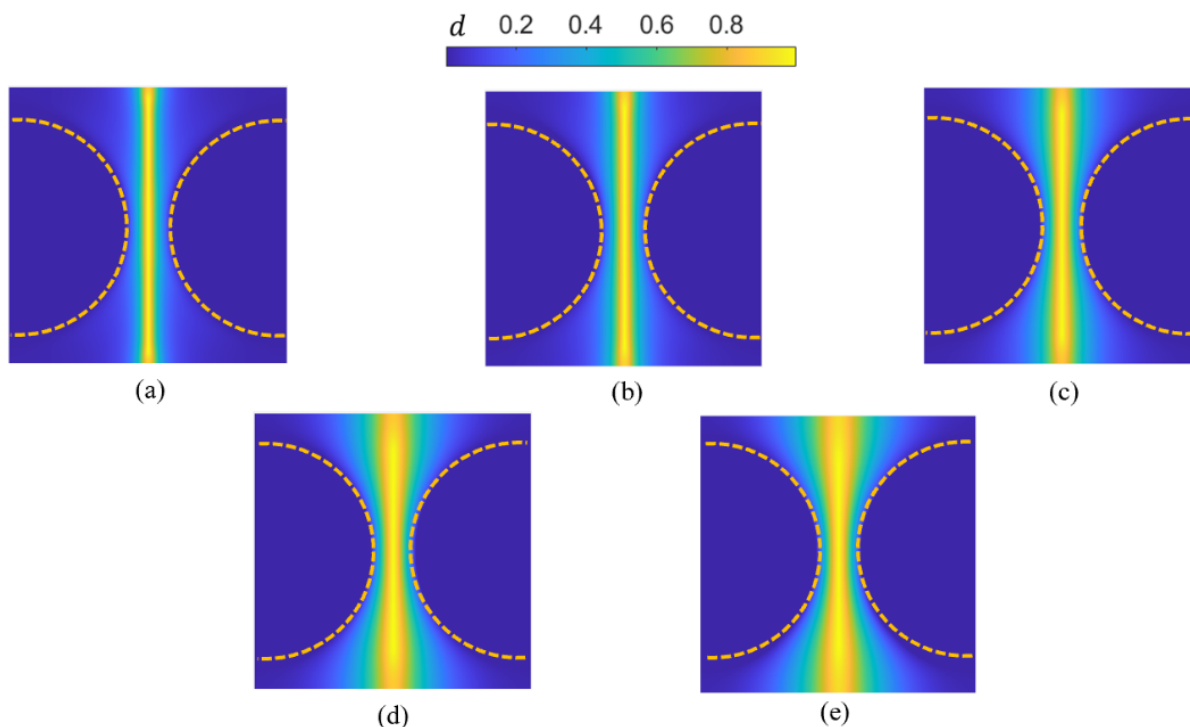


FIGURE 2.13 – Champ de phase à l'état final (*i.e.*, après rupture) pour les différentes simulations avec la méthode complète et une longueur l_c de : (a) $0.54 \mu\text{m}$, (b) $0.81 \mu\text{m}$, (c) $1.30 \mu\text{m}$, (d) $2.20 \mu\text{m}$ et (e) $3.30 \mu\text{m}$. L'interface fibres/matrice est délimitée en pointillés. Image(s) issue(s) de la Référence [6].

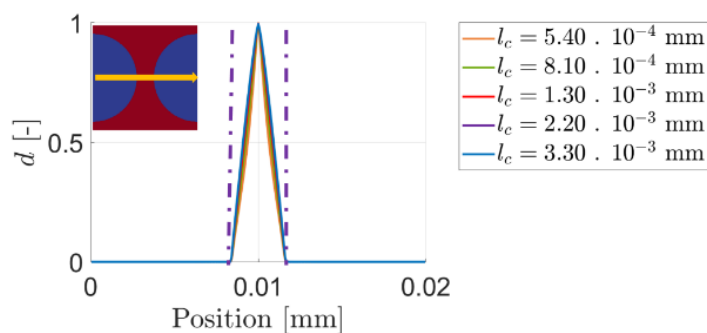


FIGURE 2.14 – Évolution du champ de phase le long d'une ligne horizontale à l'état final (*i.e.*, après rupture) pour les différentes simulations avec la méthode complète. L'interface fibres/matrice est délimitée en pointillés. Image(s) issue(s) de la Référence [6].

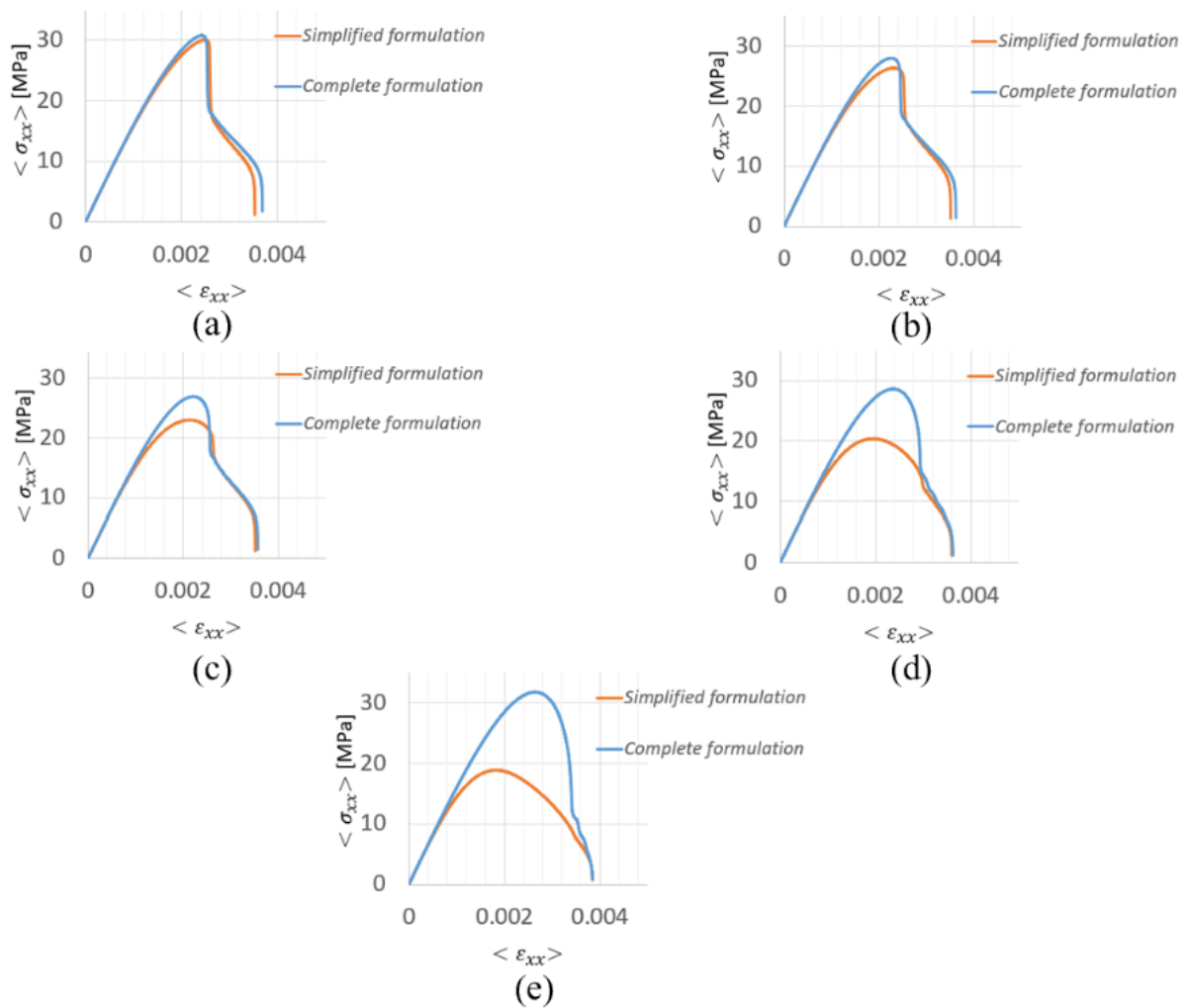


FIGURE 2.15 – Courbes contrainte-déformation pour les différentes simulations avec les deux méthodes et une longueur l_c de : (a) $0.54 \mu\text{m}$, (b) $0.81 \mu\text{m}$, (c) $1.30 \mu\text{m}$, (d) $2.20 \mu\text{m}$ et (e) $3.30 \mu\text{m}$. Image(s) issue(s) de la Référence [6].

2.3.2 Modèle de Wu

Cette Sous-section repose essentiellement sur des travaux publiés dans la Référence [88].

Suite à l'analyse de la Sous-section 2.3.1, dans cette partie le modèle de Wu complet [92] est considéré, sans simplification. Ce modèle a attiré notre attention pendant la thèse de Xiao MA [88] pour plusieurs de ses propriétés prometteuses :

- La longueur de régularisation l_c y joue le simple rôle de paramètre numérique, et a une influence négligeable sur les résultats tant au niveau local que global à condition qu'elle soit assez petite.
- Il intègre la résistance à la rupture du matériau σ_c .
- Il est construit sur la base d'une loi cohésive. Même dans le cas simple d'une loi bilinéaire, le champ de phase reste nul tant que la résistance à la rupture n'a été atteinte nulle part dans le domaine. Par conséquent, la réponse du matériau reste purement élastique avant l'initiation de la fissure. Cela n'est pas le cas dans le modèle de Miehe.

Pour pouvoir comparer nos résultats avec ceux de la Référence [92], nous avons utilisé une formulation hybride où il y a une séparation entre tension et compression dans la définition de l'énergie de déformation initiale mais pas dans celle du tenseur des contraintes de Cauchy. Nous avons aussi opté pour la loi cohésive bilinéaire.

Ce modèle est brièvement présenté dans le Paragraphe 2.3.2.1. Sa résolution numérique avec la méthode basée sur la TFR est détaillée dans le Paragraphe 2.3.2.2, et des résultats démontrant ses propriétés intéressantes sont présentés dans le Paragraphe 2.3.2.3.

2.3.2.1 Modèle

Sans séparation entre tension et compression, nous avons pour le tenseur des contraintes de Cauchy

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t) = g(d(\mathbf{x}, t)) (\lambda(\mathbf{x}) \text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}, t)) \mathbf{I} + 2\mu(\mathbf{x}) \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}, t)), \quad (2.12)$$

où la fonction de dégradation énergétique est donnée par

$$g(d(\mathbf{x}, t)) = \frac{(1 - d(\mathbf{x}, t))^2}{(1 - d(\mathbf{x}, t))^2 + a_1(\mathbf{x})d(\mathbf{x}, t)(1 - \frac{1}{2}d(\mathbf{x}, t))}, \quad a_1(\mathbf{x}) = \frac{4}{\pi l_c(\mathbf{x})} \frac{E(\mathbf{x})G_c(\mathbf{x})}{\sigma_c(\mathbf{x})}.$$

L'énergie de déformation initiale est définie par

$$\phi_0^+(\mathbf{x}, t) = \frac{(\langle \sigma_1(\mathbf{x}, t) \rangle^+)^2}{2E(\mathbf{x})},$$

où σ_1 est la contrainte principale maximale et E le module de Young. Cette formule correspond à un critère de rupture de Rankine avec séparation entre tension et compression. La variable d'histoire du modèle Wu est dans ce cas

$$\mathcal{H}(\mathbf{x}, t) = \max \left(\frac{(\sigma_c(\mathbf{x}))^2}{2E(\mathbf{x})}, \max_{s \leq t} \phi_0^+(\mathbf{x}, s) \right),$$

et l'équation d'évolution du champ de phase est

$$g'(d(\mathbf{x}, t)) \mathcal{H}(\mathbf{x}, t) + \frac{2}{\pi} \frac{G_c(\mathbf{x})}{l_c(\mathbf{x})} (1 - d(\mathbf{x}, t)) - \nabla \cdot \left(\frac{2}{\pi} G_c(\mathbf{x}) l_c(\mathbf{x}) \nabla d(\mathbf{x}, t) \right) = 0, \quad \mathbf{x} \in \Omega. \quad (2.13)$$

2.3.2.2 Méthode numérique

L'implémentation de ce modèle avec la méthode numérique basée sur la TFR n'a pas été abordée dans la littérature et a donc constitué une contribution importante de la thèse de Xiao MA [88]. La difficulté provient du fait que même avec un couplage faible, l'Équation (2.13) qui définit l'évolution du champ de phase de Wu est non linéaire en raison de la non linéarité de la fonction de dégradation g et de sa dérivée g' .

Nous avons trouvé que l'Algorithme 2.11 ne peut être adapté à ce modèle. Un contre-exemple en 1D est proposé dans la Référence [88] pour démontrer qu'un algorithme de point fixe ne peut résoudre l'Équation (2.13). Après diverses tentatives infructueuses avec différentes approches, nous avons opté pour une résolution avec un algorithme de type Newton-Krylov [87]. Pour éviter que le doctorant soit confronté à des difficultés insurmontables en essayant d'implémenter cet algorithme dans le logiciel *AMITEX*, nous avons développé un code *Python* pour le modèle de Wu. Cela nous a aussi permis d'envisager un couplage fort avec un schéma de minimisation alternée [79].

Ce schéma repose sur le même mécanisme de séparation entre la résolution du problème d'équilibre et celle de l'équation d'évolution du champ de phase. Nous résolvons ainsi d'abord le problème d'équilibre avec un champ de phase gelé, puis nous résolvons l'équation d'évolution avec un champ de déformation gelé. Le changement par rapport au couplage faible, c'est qu'au lieu de passer à l'incrément de temps suivant, nous recommençons la procédure, et ce jusqu'à vérifier un certain critère de convergence. Contrairement au couplage faible, cette procédure permet de s'assurer que le système est à l'équilibre à la fin d'un incrément de temps [79]. En outre, la fissure peut se propager en un seul incrément de temps bien au-delà de ce qui est possible avec un couplage faible, ce qui permet d'utiliser un pas de temps plus grand [79].

L'algorithme de Newton-Krylov pour la résolution de l'Équation (2.13) à chaque itération du schéma de minimisation alternée consiste en deux boucles imbriquées. La première est celle de l'algorithme de Newton-Raphson qui repose sur une linéarisation de l'équation sous la forme

$$\begin{cases} R'(d^i)\delta d^{i+1} = -R(d^i), \delta d^{i+1} = d^{i+1} - d^i, \\ R(d^i) = g'(d^i)\mathcal{H} + \frac{2}{\pi} \frac{G_c}{l_c} (1 - d^i) - \nabla \cdot \left(\frac{2}{\pi} G_c l_c \nabla d^i \right), \\ R'(d)\delta d^{i+1} = g''(d^i)\mathcal{H}\delta d^{i+1} - \frac{2}{\pi} \frac{G_c}{l_c} \delta d^{i+1} - \nabla \cdot \left(\frac{2}{\pi} G_c l_c \nabla \delta d^{i+1} \right). \end{cases}$$

Ce problème linéaire est résolu par un schéma de gradient conjugué. Celui-ci requière pour le calcul de $R(d^i)$ et de $R'(d)\delta d^{i+1}$ deux allers-retours vers l'espace de Fourier à l'aide de la TFR. La procédure pour ce calcul est la même que celle décrite dans le Paragraphe 2.3.1.2 pour le modèle de Miehe sans simplification.

Pour résumer, nous avons développé une résolution numérique du modèle de Wu avec la méthode basée sur la TFR qui pour un incrément de temps prend la forme de trois boucles imbriquées :

- En une itération du schéma de minimisation alternée, le problème d'équilibre est d'abord résolu pour trouver un nouveau champ de déformation avec un champ de phase gelé, puis l'équation d'évolution du champ de phase est résolue avec un champ de déformation gelé.
- L'équation d'évolution du champ de phase est résolue avec un algorithme de type Newton-Krylov où à chaque itération de Newton-Raphson, un problème linéaire est résolu par un schéma de gradient conjugué.
- Chaque itération du schéma de gradient conjugué repose sur des TFR et des TFR inverses pour calculer le terme de diffusion.

Une présentation plus détaillée de ces algorithmes peut être trouvée dans la Référence [88]. Le modèle de Wu a également été implémenté dans le logiciel *FEMS* afin de fournir des données de comparaison avec une approche EFs se rapprochant de celle proposée dans la Référence [92]. Cette implémentation repose elle aussi sur un schéma de minimisation alternée avec un algorithme de Newton-Raphson pour la résolution de l'équation d'évolution du champ de phase.

2.3.2.3 Résultats

Les simulations présentées dans la suite se basent sur un domaine contenant deux fibres similaire à celui utilisé dans le Paragraphe 2.3.1.3. Ce domaine est montré dans la Figure 2.9. La discrétisation est la même que dans le Paragraphe 2.3.1.3, bien que la géométrie ne soit pas exactement la même. Les propriétés matériaux sont les mêmes que dans le Paragraphe 2.3.1.3, à l'exception du taux de dissipation d'énergie critique pour la matrice qui est fixé à 3 N m^{-1} .

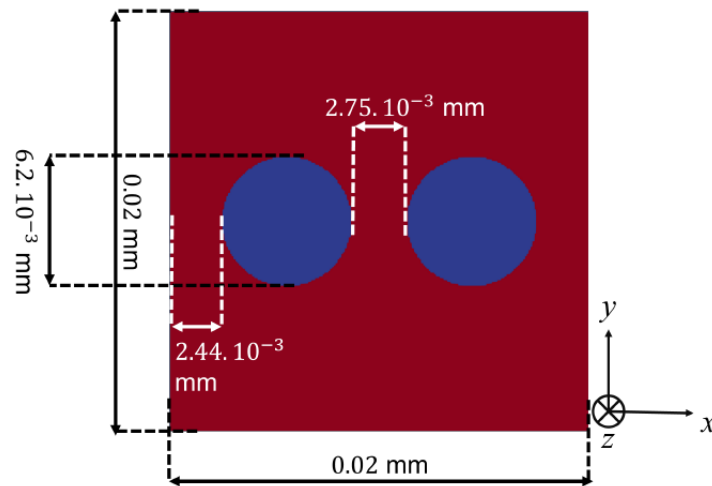


FIGURE 2.16 – Modèle utilisé pour étudier le modèle de Wu. Les fibres sont en bleu et la matrice en rouge. Image(s) issue(s) de la Référence [88].

Les courbes contrainte-déformation pour ce modèle avec le champ de phase de Wu résolu par la méthode numérique basée sur la TFR sont présentées dans la Figure 2.17. Nous observons que la dépendance des résultats globaux vis-à-vis de la longueur de régularisation est éliminée avec le modèle de Wu, notamment en ce qui concerne la résistance à la rupture.

Nous nous intéressons également au comportement du modèle et de son implémentation lorsque la distance l_f entre les fibres varie. Les courbes contrainte-déformation avec différentes distances l_f mais une longueur fixe $l_c = 0.5 \mu\text{m}$ sont présentées dans la Figure 2.18. Deux tendances contradictoires sont observables.

Pour des ratios $\frac{l_f}{l_c}$ entre 3.74 et 3.06, la rupture survient plus tôt lorsque la distance entre les fibres diminue. Cela s'explique par le fait que la concentration des contraintes devient plus intense dans la région entre les fibres.

Pour des ratios $\frac{l_f}{l_c}$ inférieurs à 3.06, toutefois, la tendance inverse est observée puisque la rupture survient plus tard lorsque la distance diminue. Cela s'explique par la comparaison entre la distance entre les fibres et la largeur de bande de régularisation de la fissure dans le modèle de

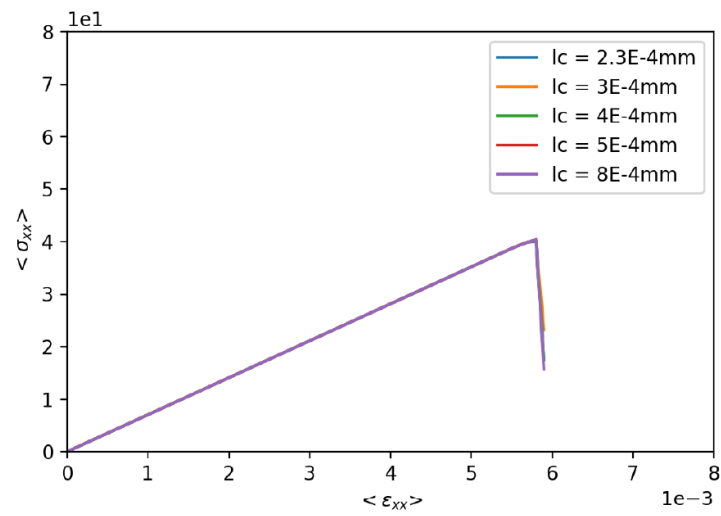


FIGURE 2.17 – Courbes contrainte-déformation pour les simulations avec le modèle de Wu et différentes longueurs l_c . Image(s) issue(s) de la Référence [88].

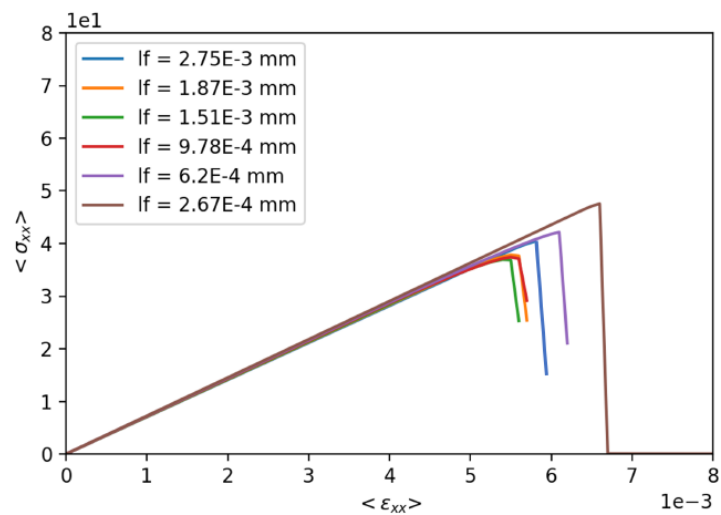


FIGURE 2.18 – Courbes contrainte-déformation pour les simulations avec le modèle de Wu et différentes distances l_f . Image(s) issue(s) de la Référence [88].

Wu, qui est égale à πl_c [92]. Ainsi, lorsque $\frac{l_f}{l_c} < \pi \approx 3.14$, la bande de régularisation de la fissure inclut une partie des fibres, comme montré dans la Figure 2.19. L'endommagement des fibres est quasi-impossible en raison de propriétés mécaniques différentes.

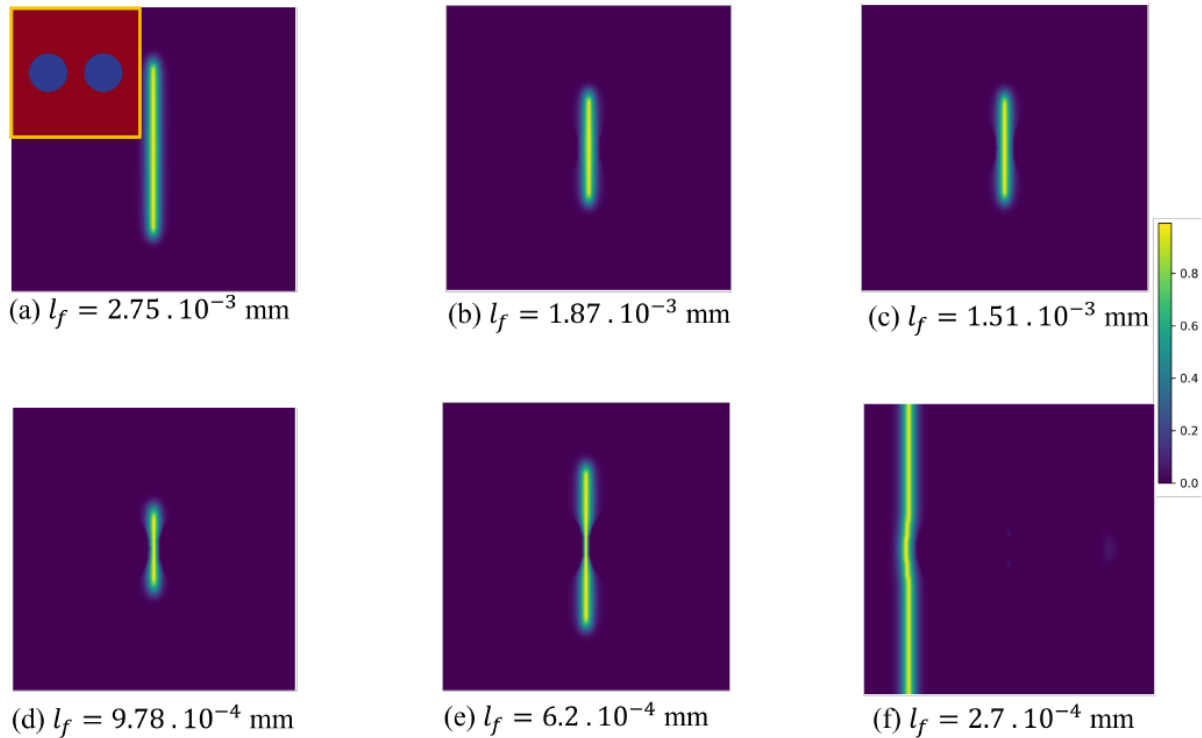


FIGURE 2.19 – Champ de phase à l'état final (*i.e.*, après rupture) pour les simulations avec le modèle de Wu et différentes distances l_f . Image(s) issue(s) de la Référence [88].

L'intérêt du modèle de Wu par rapport à celui de Miehe est que le cas $l_f < \pi l_c$ peut être évité en utilisant une valeur de l_c plus petite. Cette longueur joue en effet le simple rôle de paramètre numérique et n'a pas d'influence sur les résultats tant qu'elle est assez petite. Garantir la condition $l_f < \pi l_c$ tout en assurant une taille de voxel assez petite par rapport à l_c , comme c'est requis dans le modèle de Wu [92], a néanmoins la conséquence d'augmenter significativement le coût des calculs.

En conclusion, ces travaux sur la modélisation de la rupture par champ de phase avec la méthode numérique basée sur la TFR nous a permis de revisiter à la fois les modèles et leurs implémentations. Nous avons ainsi amélioré l'implémentation précédente en levant une simplification qui avait une influence non négligeable sur les résultats, tant au niveau local que global.

Nous nous sommes aussi intéressés à un modèle de champ de phase où la résistance à la rupture fait partie des propriétés matériau et où la longueur de régularisation devient un paramètre numérique. L'implémentation numérique de ce modèle avec la méthode basée sur la TFR a nécessité un changement complet de schéma, puisque ce modèle introduit une loi d'évolution du champ de phase non linéaire qui ne se prête pas à une résolution par point fixe. Notre implémentation avec un schéma de minimisation alternée et un algorithme de type Newton-Krylov nous a permis d'obtenir des résultats démontrant l'intérêt de ce modèle pour les matériaux hétérogènes. Il apparaît en effet que la réponse mécanique tant au niveau global que local ne

dépend pas de la valeur de l_c tant que celle-ci est choisie assez petite, notamment par rapport à la distance entre les fibres.

Conclusion

La méthode numérique basée sur la TFR a été abordée dans ce chapitre en vue de modéliser des mécanismes de rupture dans des matériaux hétérogènes fragiles ou quasi-fragiles comme les composites à matrice polymère. Certaines propriétés intrinsèques à cette méthode ont pu être exploitées. D'une part, l'algorithme de résolution qui a été développé ne repose que sur la TFR et des opérations locales à un voxel, et ne nécessite pas l'assemblage d'une matrice globale. D'autre part, une simulation sur une image 3D acquise par tomographie a été conduite, et ce sans aucune opération de génération ou d'adaptation du maillage voxélisé.

Certains inconvénients problématiques de la méthode numérique basée sur la TFR ont été abordés, et notamment les oscillations parasites présentes dans les solutions. Celles-ci peuvent en effet être particulièrement gênantes pour des applications à la mécanique de la rupture. Une analyse basée sur trois modèles bien choisis a permis d'évaluer les causes des oscillations et de les hiérarchiser en termes d'importance. La cause majeure qui a été identifiée est la discrétisation irrégulière des interfaces en raison du maillage voxélisé.

La méthode des voxels composites a été abordée pour atténuer ces oscillations, et son efficacité a été démontrée sur les trois modèles. Une méthode des voxels composites alternative basée sur les FDNs a été proposée. Cette approche originale fournit des résultats comparables à l'approche initiale, et ce pour une mise en œuvre facilitée grâce aux FDNs. L'application de cette méthode améliorée à des représentations non paramétriques de la géométrie comme les images 3D acquises par tomographie est notamment simplifiée.

Pour modéliser les mécanismes de rupture, une approche par champ de phase déjà implémentée avec la méthode numérique basée sur la TFR dans des travaux antérieurs a été présentée. Ces travaux précédents ont été revisités, avec une attention particulière quant à la résolution numérique de l'équation d'évolution du champ de phase. L'influence d'une simplification opérée dans les travaux précédents a en effet été évaluée et une implémentation complète (*i.e.*, sans simplification) a été développée. Les résultats démontrent que la simplification mène à une diffusion anormale de l'endommagement entre les composantes du matériau et justifient donc l'intérêt de l'implémentation complète.

En outre, le modèle de champ de phase développé dans les travaux antérieurs reposait sur l'introduction d'une longueur de régularisation comme propriété matériau supplémentaire. La définition de cette longueur pour des matériaux hétérogènes et la dépendance des résultats tant au niveau local que global vis-à-vis de celle-ci était problématique. Un modèle de champ de phase alternatif a été étudié et implémenté avec la méthode numérique basée sur la TFR. Ce modèle étant basé sur une équation d'évolution non linéaire pour le champ de phase, l'algorithme de résolution de cette équation a été complètement revu. L'application de ce modèle à des matériaux hétérogènes démontre qu'il permet effectivement de s'affranchir de la dépendance des résultats locaux et globaux vis-à-vis de la longueur de régularisation.

Chapitre 3

Réduction de modèle basée sur les données

Hélas ! le champ des erreurs n'a pas de limites et ce qui fut hier sagesse peut devenir, demain, folie.

Marc Bloch

Introduction	112
3.1 Analyse partitionnée auto-cohérente	115
3.1.1 Méthode	115
3.1.2 Résultats	119
3.2 Apprentissage profond	125
3.2.1 Compression	125
3.2.2 Prédiction	128
3.2.3 Résultats	130
Conclusion	142

Introduction

Comme démontré dans les chapitres 1 et 2, la modélisation numérique des phénomènes mécaniques fortement non linéaires dans des milieux hétérogènes implique un coût de calcul conséquent. Cela est problématique lorsque ces calculs doivent être répétés plusieurs fois, notamment dans le cadre d'une analyse de sensibilité, une démarche d'optimisation, une analyse des incertitudes ou encore une simulation multi-échelle (voir Chapitre 4). La parallélisation telle que présentée dans la Section 1.3 n'est alors plus suffisante et il convient d'envisager des voies alternatives permettant de réduire les coûts de calculs. Le point clé des méthodes de réduction de modèle abordées dans ce chapitre est l'exploitation de la redondance partielle des calculs.

Les approches qui nous intéressent dans ce chapitre sont celles qui consistent à :

- Générer des données avec une approche conventionnelle comme la méthode des Éléments Finis (EFs) ou la méthode numérique basée sur la Transformée de Fourier Rapide (TFR). Dans ce cadre, l'approche conventionnelle est dite Modèle d'Ordre Complet (MOC). Les données générées peuvent notamment consister en une large collection de champs de déplacement, de vitesse ou de contraintes obtenus pour différentes conditions aux limites.
- Compresser les données avec des approches issues de la science des données et plus largement de l'intelligence artificielle.
- Remplacer le MOC par un Modèle d'Ordre Réduit (MOR) où le nombre d'inconnues à résoudre pour calculer un résultat est fortement réduit grâce à la compression. Les prédictions peuvent être calculées par un MOR purement basé sur l'intelligence artificielle, comme par exemple un réseau de neurones profond, ou par un MOR hybride intégrant des principes fondamentaux de la mécanique.

Je me suis intéressé à ces MORs à partir de mon post-doctorat à la Northwestern University. Cette thématique à l'interface entre l'intelligence artificielle et la mécanique avait un intérêt fort pour l'IMT Nord Europe, de sorte qu'un post-doctorant a pu être recruté en 2021 pour explorer certaines pistes.

L'objectif final de ce chapitre est de mettre en œuvre une approche de réduction de modèle en trois étapes (génération, compression, prédiction). Les MOCs visés peuvent s'appuyer sur la méthode des EFs ou la méthode numérique basée sur la TFR. Le point commun est la forte non linéarité des phénomènes mécaniques à prédire.

La génération de la base de données peut être réalisée par échantillonnage aléatoire [93], processus Gaussien [93], séquence de Sobel [94] ou d'autres méthodes d'échantillonnage. Le nombre d'échantillons nécessaire avec ces méthodes pour couvrir suffisamment l'espace étant assez grand, des méthodes déterministes ont aussi été considérées par divers auteurs [95, 96]. Par exemple, au lieu d'utiliser un grand nombre de conditions de chargement aléatoires et arbitraires pour générer la base de données, il a été démontré dans la Référence [96] que des résultats assez fiables peuvent être obtenus pour une analyse élasto-plastique en petites déformations en utilisant seulement six chargements orthogonaux et de faible amplitude.

Parmi les méthodes de compression, la Décomposition Orthogonale aux valeurs Propres (DOP) a été très utilisée en mécanique numérique, et ce parfois sous le nom d'analyse en composantes principales, de décomposition en valeurs singulières ou encore de décomposition de Karhunen-Loève [97]. Cette méthode de compression consiste à remplacer chaque champ de la base de données par une combinaison linéaire des vecteurs propres. Les données sont ainsi projetées sur un espace réduit formé par les coefficients de cette combinaison linéaire. En outre,

les vecteurs propres sont des champs globaux, contrairement aux fonctions de forme EFs qui sont locales. Il est aussi possible de projeter tous les systèmes linéaires à résoudre pendant la simulation EFs sur l'espace réduit [95, 98, 99]. Si l'erreur de compression peut être minimisée de manière satisfaisante avec un faible nombre de vecteurs propres, alors un MOR permettant de réduire les temps de calcul de manière significative est obtenu.

La DOP comporte deux faiblesses majeures. Premièrement, c'est une méthode de compression linéaire qui se généralise assez mal aux problèmes non linéaires. La solution d'un problème de mécanique de la rupture peut par exemple difficilement s'écrire comme une combinaison linéaire de vecteurs propres obtenus à partir de solutions correspondant à d'autres conditions de sollicitation. C'est pourquoi des approches d'actualisation automatique ont été proposées afin de mettre à jour les vecteurs propres pendant la simulation [99]. Deuxièmement, lorsque la DOP est couplée à la méthode des EFs, seule la taille des problèmes linéaires à résoudre est réduite. Il faut rajouter un autre ingrédient au MOR s'il s'agit aussi de réduire le coût de calcul de l'intégration et de l'assemblage des systèmes linéaires. C'est pourquoi de nombreux chercheurs se sont intéressés à l'hyper-réduction [99] et à la méthode d'interpolation empirique discrète [100].

D'autres méthodes de compression linéaires ont aussi été essayées dans la littérature. Parmi les plus répandues en mécanique numérique il y a la décomposition canonique polyadique, aussi connue sous le nom de décomposition propre généralisée ou décomposition en valeurs singulières d'ordre supérieur [101]. Cette méthode est assez similaire à la DOP et peut se coupler à la méthode des EFs. La différence principale est que chaque dimension du problème est séparée de manière multiplicative. Cela se révèle assez utile pour l'introduction de paramètres additionnels dans le MOR, comme des variables de contrôle ou d'optimisation [102]. La décomposition propre généralisée partage toutefois les mêmes faibles faiblesses que la DOP en ce qui concerne la généralisation aux problèmes fortement non linéaires et à la nécessité d'une hyper-réduction. Il est important de mentionner que le couplage des différentes méthodes de compression avec d'autres méthodes conventionnelles que la méthode des EFs a aussi été étudié dans la littérature. L'analyse par champs de transformation non uniformes couple ainsi la méthode numérique basée sur la TFR avec la DOP [103]. Bien que cela ne supprime pas les faiblesses mentionnées pour un couplage avec la méthode des EFs, un lien intéressant entre les modèles à champ moyen et la compression est établi avec l'analyse par champs de transformation non uniformes.

Ce lien est exploité par l'Analyse Partitionnée Auto-cohérente (APA), où la DOP est remplacée par un partitionnement par k-moyennes [96]. Cette approche repose sur un maillage voxélisé, où chaque voxel est associé à une partition. Comme dans la méthode numérique basée sur la TFR, le champ de déformation est la variable à résoudre, mais il est discrétisé au niveau des partitions au lieu des voxels. Ainsi, la déformation est supposée uniforme au sein d'une partition, ce qui réduit à la fois le nombre d'inconnues à résoudre et le coût de calcul de l'intégration dans le MOR.

Les méthodes de compression non linéaires basées sur des Réseaux de Neurones Artificiels (RNAs) profonds connaissent une popularité croissante en mécanique numérique. Parmi ces RNAs, les autoencodeurs sont particulièrement intéressants car ils permettent de reprendre le même fonctionnement en trois étapes que les approches basées sur la DOP [104, 105]. Un autoencodeur est un réseau de neurones à propagation avant qui associe un code d'une faible dimension à une entrée donnée et reconstruit ensuite la donnée à partir du code. Il est en outre possible de voir les autoencodeurs comme une généralisation de la DOP, puisqu'un autoencodeur avec une seule couche cachée et avec des fonctions d'activation linéaires est équivalent à une DOP [106]. Les autoencodeurs deviennent intéressants lorsqu'ils sont profonds et utilisent des fonctions d'activation non linéaires, car ils constituent alors une méthode de compression non

linéaire.

Les autoencodeurs ont récemment été utilisés en mécanique non linéaire, essentiellement en mécanique des fluides [107, 108]. Ces travaux se concentrent principalement sur la compression de données d'écoulements complexes. En outre, des MORs s'appuyant sur des autoencodeurs ont été développés pour prédire des écoulements non-stationnaires [109]. Le RNA est entraîné de sorte à prendre en entrée les solutions concaténées de n incréments de temps de la simulation, et à prédire en sortie la solution à l'incrément de temps $n + 1$. Afin de prédire la solution à l'incrément $n + 2$, il est nécessaire d'ajouter aux données d'entrée le résultat au temps $n + 1$. Dans ces approches, le MOR n'imité pas la procédure itérative du MOC. En effet, les approches conventionnelles de la mécanique des fluides numérique reposent en général sur les équations de Navier-Stokes. Selon l'ordre du schéma de discrétisation en temps, ces approches calculent la solution à l'incrément $n + 1$ à partir d'un faible nombre de solutions calculées aux instants précédents ($n, n - 1$, etc.).

Une approche similaire s'appuyant sur un couplage entre la DOP et un autoencodeur a aussi été développée pour modéliser les écoulements turbulents [110]. Ce MOR n'imité pas lui non plus la procédure itérative du MOC. Cet aspect est pourtant essentiel pour le remplacement des MOCs par des MORs s'appuyant sur l'apprentissage profond dans le milieu de l'ingénierie. De plus, ces travaux récents sur les autoencodeurs se concentrent principalement sur la mécanique des fluides, et des problèmes de mécanique fortement non linéaire comme les problèmes de mécanique de la rupture n'ont pas encore été abordés.

L'APA et mes contributions autour de cette méthode sont présentées en Section 3.1. Ayant identifié les limites du partitionnement en k -moyennes, qui est une méthode de compression linéaire, je me suis ensuite intéressé aux autoencodeurs. Un travail sur un problème de mécanique de la rupture est présenté dans la Section 3.2.

3.1 Analyse partitionnée auto-cohérente

Cette Section repose essentiellement sur des travaux publiés dans la Référence [15].

L'APA a été proposée initialement dans la Référence [96] sous l'hypothèse de petites déformations et pour des comportements élastiques ou élasto-plastiques. Mes travaux autour de cette méthode ont principalement concerné son extension aux grandes déformations avec une localisation plastique importante et à l'endommagement ductile. L'intégration de cette méthode dans un modèle multi-échelle a aussi fait partie de mes travaux, mais cela fait l'objet du Chapitre 4.

La version grandes déformations de l'APA est présentée dans la Sous-section 3.1.1, et quelques résultats sont présentés dans la Sous-section 3.1.2.

3.1.1 Méthode

L'APA est une méthode de réduction de modèle qui repose sur une méthode conventionnelle de fond qui est la méthode numérique basée sur la TFR [96]. Ainsi, certains éléments de la Section 2.1 peuvent être repris, et notamment le problème à résoudre qui est l'extension aux grandes déformations de l'Équation (2.1) en Lagrangien total :

$$\left\{ \begin{array}{l} -\nabla_{\mathbf{X}} \cdot \mathbf{P}(\mathbf{X}) = \mathbf{0}, \mathbf{X} \in \Omega_0, \\ \mathbf{P}(\mathbf{X}) = \mathbf{P}(\mathbf{F}(\mathbf{X})), \mathbf{F}(\mathbf{X}) = \mathbf{I} + \nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{u}(\mathbf{X}), \\ \mathbf{u}(\mathbf{X}) = (\mathbf{F}^M - \mathbf{I}) \cdot \mathbf{X} + \mathbf{u}^\#(\mathbf{X}), \\ \mathbf{u}^\# \begin{pmatrix} 0 \\ X_2 \\ X_3 \end{pmatrix} = \mathbf{u}^\# \begin{pmatrix} L_1 \\ X_2 \\ X_3 \end{pmatrix}, \mathbf{u}^\# \begin{pmatrix} X_1 \\ 0 \\ X_3 \end{pmatrix} = \mathbf{u}^\# \begin{pmatrix} X_1 \\ L_2 \\ X_3 \end{pmatrix}, \mathbf{u}^\# \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ 0 \end{pmatrix} = \mathbf{u}^\# \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ L_3 \end{pmatrix}. \end{array} \right. \quad (3.1)$$

Il est rappelé que $\mathbf{F}(\mathbf{X})$ est le gradient de déformation, $\mathbf{P}(\mathbf{X})$ est le premier tenseur des contraintes de Piola-Kirchhoff, Ω_0 est le domaine dans la configuration initiale (*i.e.*, non déformée), et $\nabla_{\mathbf{X}}$ désigne un gradient par rapport aux coordonnées de la configuration initiale.

L'APA repose sur deux différences majeures avec la méthode numérique basée sur la TFR, et qui sont l'utilisation d'un partitionnement et d'un schéma auto-cohérent.

3.1.1.1 Partitionnement

La première jambe de l'APA est le partitionnement. Celui-ci doit être bien pensé car tous les champs mécaniques (déformations et contraintes) seront discrétisés de sorte à être constants par partition. Il convient donc de mettre dans la même partition des voxels qui auront des déformations et des contraintes assez similaires quelles que soient les conditions de sollicitations. C'est pourquoi la base de données utilisée pour le partitionnement doit être assez représentative en termes de distribution des déformations et des contraintes.

Il s'agit d'un problème d'apprentissage non supervisé, et où l'objectif est de minimiser la similarité des champs mécaniques de la base de données au sein d'une même partition, ou de manière équivalente de maximiser la différence entre deux partitions distinctes. Cela peut s'effectuer avec diverses méthodes. De bons résultats ont été obtenus avec la méthode de partitionnement par K-moyennes [15, 96].

Des exemples de partitionnements sont présentés dans la Figure 3.1. Une remarque par rapport à cette illustration est que pour des domaines composés de différents constituants (matrice, inclusion, porosité, etc.), il est préférable de partitionner chaque constituant indépendant. Cela

évite de recourir à des lois de mélange à l'intérieur des partitions. Il est notable également que les partitions ne sont pas nécessairement connexes, ce qui ne pose pas de problème lors de la prédiction avec le schéma auto-cohérent.

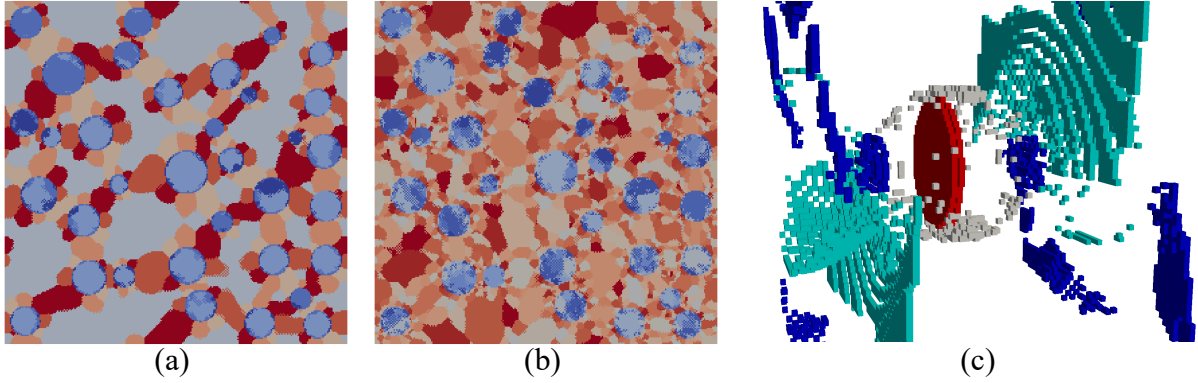


FIGURE 3.1 – Exemples de domaines de calculs discrétisés par des maillages pixelisés ou voxélisés puis partitionnés par K-moyennes : (a) exemple 2D avec 8 partitions, (b) exemple 2D avec 65 partitions, (c) exemple 3D avec 217 partitions où ne sont montrées que 2 partitions en bleu pour la matrice, 1 partition en rouge pour l'inclusion et 1 partition en gris pour la porosité. Image(s) issue(s) de la Référence [15].

3.1.1.2 Schéma auto-cohérent

Le partitionnement des voxels et la discrétisation avec un gradient de déformation constant par partition sont introduits :

$$\mathbf{F}(\mathbf{X}) \approx \sum_{k=1}^K \mathbf{F}^k \chi^k(\mathbf{X}), \mathbf{X} \in \Omega_0,$$

où K est le nombre de partitions, \mathbf{F}^k est la valeur du gradient déformation au sein de la partition k et χ^k est la fonction caractéristique de cette partition :

$$\chi^k(\mathbf{X}) = \begin{cases} 1, & \mathbf{X} \in \Omega_0^k, \\ 0, & \mathbf{X} \notin \Omega_0^k, \end{cases}$$

avec Ω_0^k la partie du domaine Ω_0 occupée par les voxels de la partition k . Avec le partitionnement, le champ de polarisation devient $\tau_0^k = \mathbf{P}^k - \mathbb{C}^0 : \mathbf{F}^k$. En effet, la déformation étant constante par partition, la contrainte l'est également, ce qui démontre clairement que l'APA réduit simultanément le nombre d'inconnues et le coût de l'intégration.

Par ailleurs, le matériau de référence est légèrement modifié afin de supprimer la symétrie, comme proposé dans la Référence [87]. L'opérateur de Green utilisé dans la suite est donc légèrement différent par rapport à celui de l'Équation (2.6). Les détails peuvent encore une fois être trouvés dans la Référence [87].

En passant en grandes déformations et en ajoutant le partitionnement, l'Équation (2.5) devient

$$\begin{aligned} \mathbf{F}(\mathbf{X}) &= \mathbf{F}^M - (\Gamma^0 * \tau)(\mathbf{X}), \mathbf{X} \in \Omega_0, \\ \Leftrightarrow \mathbf{F}(\mathbf{X}) &= \mathbf{F}^M - \int_{\Omega_0} \Gamma^0(\mathbf{X}, \mathbf{X}') : \tau(\mathbf{X}') d\mathbf{X}', \mathbf{X} \in \Omega_0, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\Leftrightarrow \mathbf{F}(\mathbf{X}) = \mathbf{F}^M - \int_{\Omega_0} \Gamma^0(\mathbf{X}, \mathbf{X}') : \left(\sum_{k'=1}^K \tau^{k'} \chi^{k'}(\mathbf{X}') \right) d\mathbf{X}', \mathbf{X} \in \Omega_0, \\
&\Leftrightarrow \mathbf{F}(\mathbf{X}) = \mathbf{F}^M - \sum_{k'=1}^K \left(\int_{\Omega_0} \Gamma^0(\mathbf{X}, \mathbf{X}') \chi^{k'}(\mathbf{X}') d\mathbf{X}' \right) : \tau^{k'}, \mathbf{X} \in \Omega_0, \\
&\Leftrightarrow \mathbf{F}(\mathbf{X}) = \mathbf{F}^M - \sum_{k'=1}^K \left(\Gamma^0 * \chi^{k'} \right) (\mathbf{X}) : \tau^{k'}, \mathbf{X} \in \Omega_0.
\end{aligned}$$

La multiplication par χ^k avec une moyenne sur Ω_0 permet d'arriver à

$$\begin{aligned}
\frac{1}{|\Omega_0|} \int_{\Omega_0} \mathbf{F}(\mathbf{X}) \chi^k(\mathbf{X}) d\mathbf{X} &= \frac{|\Omega_0^k|}{|\Omega_0|} \mathbf{F}^k = \frac{|\Omega_0^k|}{|\Omega_0|} \mathbf{F}^M - \sum_{k'=1}^K \left(\frac{1}{|\Omega_0|} \int_{\Omega_0} \chi^k(\mathbf{X}) \left(\Gamma^0 * \chi^{k'} \right) (\mathbf{X}) d\mathbf{X} \right) : \tau^{k'}, \\
&\Leftrightarrow \mathbf{F}^k = \mathbf{F}^M - \sum_{k'=1}^K \left(\frac{1}{|\Omega_0^k|} \int_{\Omega_0} \chi^k(\mathbf{X}) \left(\Gamma^0 * \chi^{k'} \right) (\mathbf{X}) d\mathbf{X} \right) : \tau^{k'}, \\
&\Leftrightarrow \mathbf{F}^k = \mathbf{F}^M - \sum_{k'=1}^K \mathbb{D}_{kk'}^0 : \tau^{k'}, \mathbb{D}^0 = \left(\frac{1}{|\Omega_0^k|} \int_{\Omega_0} \chi^k(\mathbf{X}) \left(\Gamma^0 * \chi^{k'} \right) (\mathbf{X}) d\mathbf{X} \right)_{k,k'=1\dots K}, \quad (3.2)
\end{aligned}$$

où \mathbb{D}^0 est appelé tenseur d'interaction. Il est calculé avec la TFR :

$$\mathbb{D}^0 = \left(\frac{1}{|\Omega_0^k|} \int_{\Omega_0} \chi^k(\mathbf{X}) \mathcal{F}^{-1} \left(\widehat{\Gamma}^0 \mathcal{F}(\chi^{k'}) \right) (\mathbf{X}) d\mathbf{X} \right)_{k,k'=1\dots K},$$

ce qui a un coût conséquent en termes de temps de calcul et de consommation mémoire, puisqu'il s'agit d'un tenseur dense. Il peut néanmoins être pré-calculé et la consommation mémoire peut être minimisée si le nombre de partitions est faible.

Il est notable que si le nombre de partitions K est égal au nombre de voxels, l'Équation (3.2) est celle de la méthode numérique basée sur la TFR pour les grandes déformations [87, 90]. Il s'agit en fait d'une version alternative de la méthode où une matrice (*i.e.*, le tenseur d'interaction) est assemblée en pré-calculant toutes les TFRs au lieu d'appliquer les TFRs à chaque itération de point fixe.

En pratique, le nombre de partitions étant réduit, l'Équation (3.2) mène à un problème sur-contraint. Il n'est pas possible de satisfaire à la fois la compatibilité, les conditions aux limites et l'équilibre. Il est rappelé que d'après l'Équation (3.1) la compatibilité impose que le champ de gradient de déformation dérive d'un champ de déplacement continu, que les conditions aux limites imposent que ce champ de déplacement soit composé d'une partie linéaire et d'une partie périodique, et que la partie linéaire soit déterminée par \mathbf{F}^M . Il est possible de réécrire cette dernière condition sous la forme

$$\frac{1}{|\Omega_0|} \sum_{k=1}^K |\Omega_0^k| \mathbf{F}^k = \mathbf{F}^M.$$

Cette condition peut être introduite sous forme de contrainte avec un multiplicateur de Lagrange \mathbf{F}^0 de manière à transformer l'Équation (3.2) en

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{F}^k + \sum_{k'=1}^K \mathbb{D}_{kk'}^0 : \left(\mathbf{P}(\mathbf{F}^{k'}) - \mathbb{C}^0 : \mathbf{F}^{k'} \right) - \mathbf{F}^0 = \mathbf{0}, k = 1 \dots K, \\ \frac{1}{|\Omega_0|} \sum_{k=1}^K |\Omega_0^k| \mathbf{F}^k = \mathbf{F}^M, \end{array} \right.$$

où le champ de polarisation a été remplacé par son expression. Ce système non linéaire peut être résolu avec un algorithme de Newton-Raphson [15].

Il est montré dans la Référence [96] que l'utilisation d'un schéma auto-cohérent permet d'approcher au mieux les conditions aux limites et l'équilibre, en sacrifiant partiellement la condition de compatibilité (le déplacement n'est pas continu aux frontières entre les partitions). Ce schéma auto-cohérent consiste à mettre à jour les paramètres de Lamé du matériau de référence λ^0 et μ^0 pendant la résolution. Cela ne nécessite pas de reconstruire complètement le tenseur d'interaction. Il est possible en effet de le décomposer sous la forme $\mathbb{D}^0 = f^1(\lambda^0, \mu^0)\mathbb{D}^1 + f^2(\lambda^0, \mu^0)\mathbb{D}^2$, où seules les fonctions non linéaires $f^1(\lambda^0, \mu^0)$ et $f^2(\lambda^0, \mu^0)$ doivent être recalculées à chaque mise à jour du matériau de référence, et où les tenseurs \mathbb{D}^1 et \mathbb{D}^2 peuvent être pré-calculés avec la TFR. Les détails sur cette décomposition peuvent être trouvés dans la Référence [15], où l'algorithme de l'APA pour les grandes déformations a été proposé :

Initialisation :

- (a₀) Calculer \mathbb{D}^1 et \mathbb{D}^2
- (b₀) Initialiser λ^0 et μ^0

Itération ($i + 1$) :

- (a) $\mathbb{D}^0 = f^1(\lambda^0, \mu^0)\mathbb{D}^1 + f^2(\lambda^0, \mu^0)\mathbb{D}^2$
- (b) Résoudre par un algorithme de Newton-Raphson :

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{F}^k + \sum_{k'=1}^K \mathbb{D}_{kk'}^0 : (\mathbf{P}(\mathbf{F}^{k'}) - \mathbb{C}^0 : \mathbf{F}^{k'}) - \mathbf{F}^0 = \mathbf{0}, k = 1 \dots K, \\ \frac{1}{|\Omega_0|} \sum_{k=1}^K |\Omega_0^k| \mathbf{F}^k = \mathbf{F}^M, \end{array} \right. \quad (3.3)$$
- (d) $\mathbf{P}^M = \frac{1}{|\Omega_0|} \sum_{k=1}^K |\Omega_0^k| \mathbf{P}^k$
- (e) $(\lambda^0, \mu^0) = \arg \min_{(\lambda^*, \mu^*)} \|\mathbf{P}^M - \mathbb{C}^* : (\mathbf{F}^0 - \mathbf{I})\|_2$
- (f) Test de convergence

Trois boucles sont imbriquées. Chaque itération du schéma auto-cohérent requière la résolution d'un problème non linéaire avec un algorithme de Newton-Raphson, et chaque itération de Newton-Raphson nécessite la résolution d'un système linéaire. Cette complexité de calcul conséquente est compensée par la faible valeur de K par rapport au nombre de voxels initial, et également par le pré-calcul des TFRs.

L'étape (e) est le point clé du schéma auto-cohérent, et consiste à trouver le matériau de référence optimal par rapport au comportement macroscopique calculé. Cette étape n'est pas évidente car le matériau de référence est supposé élastique linéaire isotrope. Cela constitue un point d'amélioration potentiel de la méthode. Il est notable toutefois que l'utilisation d'un matériau de référence élastique linéaire isotrope simplifie la mise à jour du tenseur d'interaction à chaque itération du schéma auto-cohérent.

3.1.2 Résultats

Dans l’Algorithme 3.3, il est possible d’utiliser tout type de loi de comportement pour la relation $\mathbf{P}^k = \mathbf{P}(\mathbf{F}^k)$ au sein d’une partition k . Comme expliqué dans le Paragraphe 3.1.1.1, si le domaine est composé de plusieurs matériaux aux comportements différents, la partie du domaine occupée par une partition ne peut être composée que d’un seul matériau. Cela facilite l’implémentation et l’utilisation de lois matériaux. J’ai ainsi intégré dans l’APA diverses lois hyperélastiques et également un modèle de plasticité de von Mises multiplicatif et un critère de rupture pour modéliser l’endommagement ductile. Les résultats présentés dans la suite concernent principalement l’endommagement ductile.

3.1.2.1 Plasticité

Dans cette partie, un domaine composé d’une matrice et d’inclusions est considéré. Un modèle de plasticité de von Mises multiplicatif [111] avec écrouissage isotrope linéaire est utilisé pour la matrice. Les inclusions sont supposées fragiles, bien que leur rupture ne soit pas modélisée. La géométrie du domaine avec les inclusions est présentée dans la Figure 3.2(a) tandis que les propriétés matériaux sont indiquées dans la Table 3.1. La Figure 3.2(a) montre bien la taille conséquente du maillage de $100 \times 100 \times 100$ voxels qu’il faut utiliser pour obtenir des résultats assez précis pour ce modèle avec la méthode numérique basée sur la TFR.

TABLE 3.1 – Propriétés matériaux pour les simulations avec comportement élasto-plastique

Propriété	Matrice	Inclusions	Porosités	Unité
Module de Young	70.0	400.0	70.0e-3	GPa
Coefficient de Poisson	0.33	0.2	0.0	—
Seuil de plasticité	400	—	—	MPa
Module d’écrouissage	1333	—	—	MPa

Les résultats de référence sont obtenus pour un chargement en tension unidirectionnelle jusqu’à 25% de déformation logarithmique avec des incréments de déformation de 0.001. La base de données pour le partitionnement par K-moyennes est simplement formée par le tenseur de gradient de déformation calculé pour le tout premier incrément de chargement de cette simulation. Pour un chargement aussi faible, la réponse du matériau est élastique linéaire. En outre, le temps de calcul consacré à la génération de la base de données et au partitionnement est négligeable. Le nombre de partitions est varié entre $k_1 = 1, 4, 16, 64, 256$ dans la matrice et $k_2 = 1, 1, 4, 13, 26$ dans les inclusions. Les courbes contrainte-déformation calculées par la méthode numérique basée sur la TFR et par l’APA avec les différents nombres de partitions sont présentées dans les Figures 3.2(b,c). Avec au moins 16 partitions dans la matrice, les résultats obtenus avec l’APA sont assez proches de la solution de référence.

L’influence du nombre de partitions sur le temps de calcul pour la partie prédiction avec l’Algorithme 3.3 est analysée dans la Figure 3.2(d). Il est concevable à partir de cette courbe qu’avec seulement quelques milliers de partitions, l’APA deviendrait plus coûteuse que la méthode numérique basée sur la TFR. Cela provient du fait que le tenseur d’interaction est une matrice dense où les TFRs sont pré-calculées, contrairement à la méthode numérique basée sur la TFR qui n’assemble pas de matrice. Cela n’est pas problématique puisqu’avec seulement 16 partitions dans la matrice, les prédictions sont déjà assez fiables, et ce pour un temps de calcul environ 1000 fois inférieur par rapport à la méthode numérique basée sur la TFR.

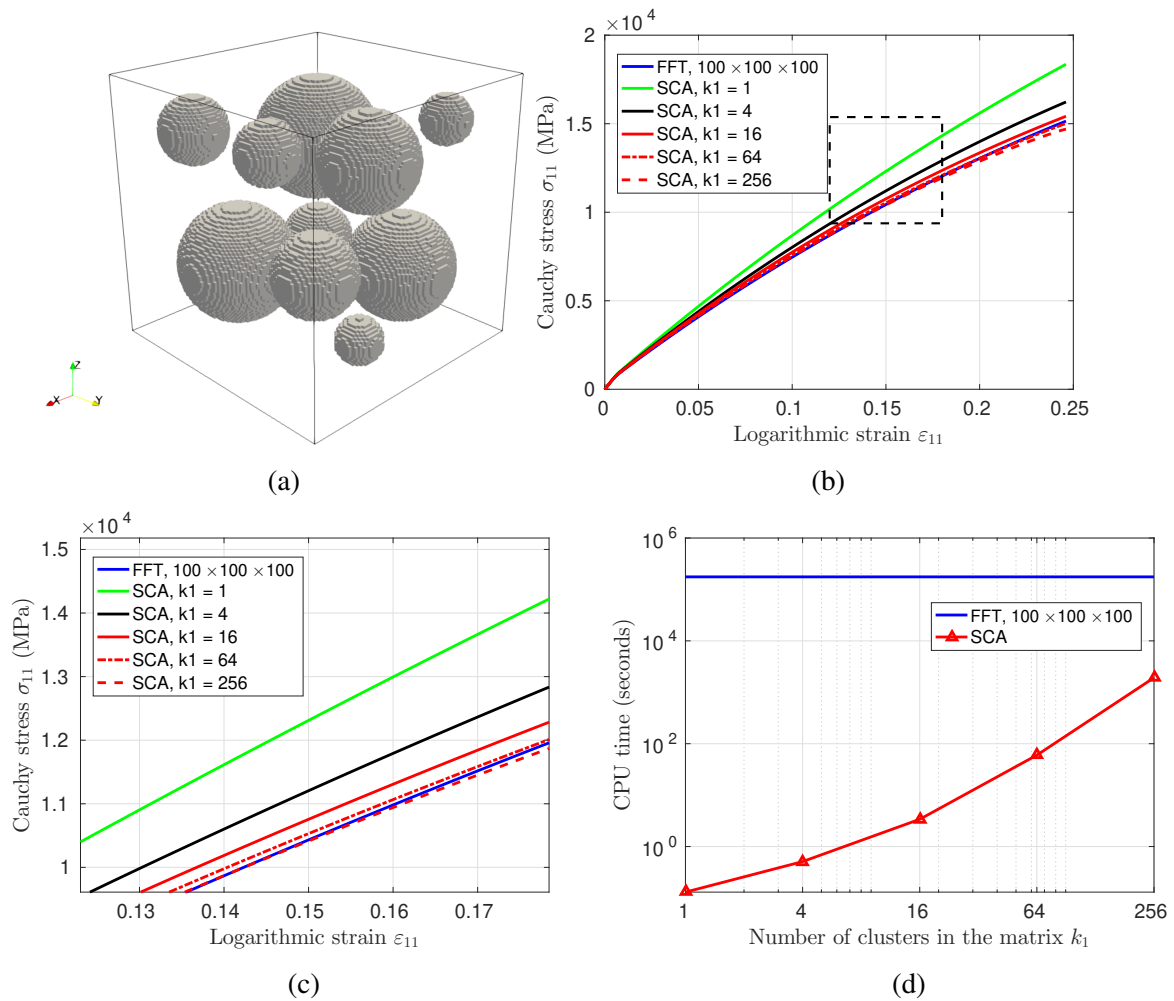


FIGURE 3.2 – Simulations avec inclusions : (a) Géométrie du domaine avec une fraction volumique d'inclusions de 20% ; (b) Courbes contrainte-déformation calculées par l'APA (SCA) avec différents nombres de partitions dans la matrice (k_1) et par la méthode numérique basée sur la TFR (FFT) avec un maillage de $100 \times 100 \times 100$ voxels ; (c) Zoom sur la zone rectangulaire marquée par des tirets dans (b) ; (d) Temps de calcul pour les différents résultats présentés dans (b). Image(s) issue(s) de la Référence [15].

Un deuxième jeu de simulations où les inclusions sont remplacées par des porosités est considéré. De même que la méthode numérique basée sur la TFR, l'APA nécessite la discrétisation des porosités afin de maintenir un maillage voxelisé (*i.e.*, sans trous). Le comportement des porosités doit donc être modélisé. Le même modèle hyperélastique que pour les inclusions y est utilisé mais avec une rigidité 1000 fois inférieure à celle de la matrice.

Le chargement est également modifié pour passer en tension uniaxiale et maintenir un état de contraintes constant pendant la simulation. Cela a nécessité une légère modification de l'Algorithme 3.3 afin de pouvoir imposer une déformation macroscopique pour la composante \mathbf{F}_{11}^M , et une contrainte macroscopique nulle pour les composantes restantes. Cette modification ne pose pas de difficulté particulière et est détaillée dans la Référence [15].

La comparaison entre la courbe contrainte-déformation de référence et celles calculées avec l'APA est présentée dans les Figures 3.3(a,b). Une convergence plus lente est observée en augmentant le nombre de partitions. Cela peut être expliqué par des déformations plastiques plus intenses localement par rapport au cas avec les inclusions.

Comme montré dans la Figure 3.3(c), malgré cette légère imprécision de l'APA, les temps de calcul restent très avantageux par rapport à la méthode numérique basée sur la TFR.

Ces premières simulations avec l'APA en grandes déformations et avec un modèle de plasticité multiplicatif démontrent bien le potentiel de l'APA pour réduire les temps de calcul. La base de données utilisée pour ces simulations est de taille assez faible, puisqu'elle ne contient qu'un seul champ de gradient de déformation. Ces simulations montrent néanmoins certaines limites, notamment en ce qui concerne la généralisation à différents types de sollicitations. Il est tout à fait imaginable d'utiliser une base de données plus grande et des approches d'actualisation automatique pour mettre à jour le partitionnement pendant la simulation, de manière similaire à ce qui a pu être développé pour la DOP [99].

3.1.2.2 Endommagement ductile

Les simulations réalisées dans cette partie sont liées à des projets de recherche et d'innovation à la Northwestern University autour de prothèses et de valves artificielles. Ces structures sont fabriquées à partir de tubes en Nickel-Titanium formés avec différents procédés et traitements thermo-mécaniques. L'intérêt est porté dans cette partie vers la mise en forme par tréfilage à froid et vers l'influence de ce procédé sur la microstructure des tubes et sur la durée de vie.

Un chargement de compression biaxiale est appliqué à une microstructure composée d'une inclusion déjà détachée de la matrice à l'état initial. Afin de prédire l'évolution de cette microstructure pendant la mise en forme, un critère de fragmentation d'inclusion est intégré dans l'APA. La microstructure après mise en forme prédite par l'APA est ensuite extraite à différentes étapes du tréfilage et est utilisée comme entrée pour un modèle de prédiction de la durée de vie [20]. Les détails et les résultats concernant la prédiction de la durée de vie ne sont pas repris dans la suite car mes contributions dans ce domaine étaient très modestes. Ils peuvent être trouvés dans la Référence [15].

Les propriétés matériaux restent les mêmes que dans la Table 3.1. Concernant l'inclusion, un critère de rupture de Tresca régularisé est introduit et couplé à un critère de taille pour modéliser sa rupture en fragments. Le critère de Tresca définit la contrainte de cisaillement σ_{Tresca} comme

$$\sigma_{Tresca} = \frac{1}{2} \max |\sigma_1 - \sigma_2|, |\sigma_2 - \sigma_3|, |\sigma_3 - \sigma_1|$$

où $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ sont les contraintes principales calculées au sein de chaque partition composant l'inclusion. La contrainte de cisaillement σ_{Tresca} est ensuite moyennée au niveau de l'inclusion,

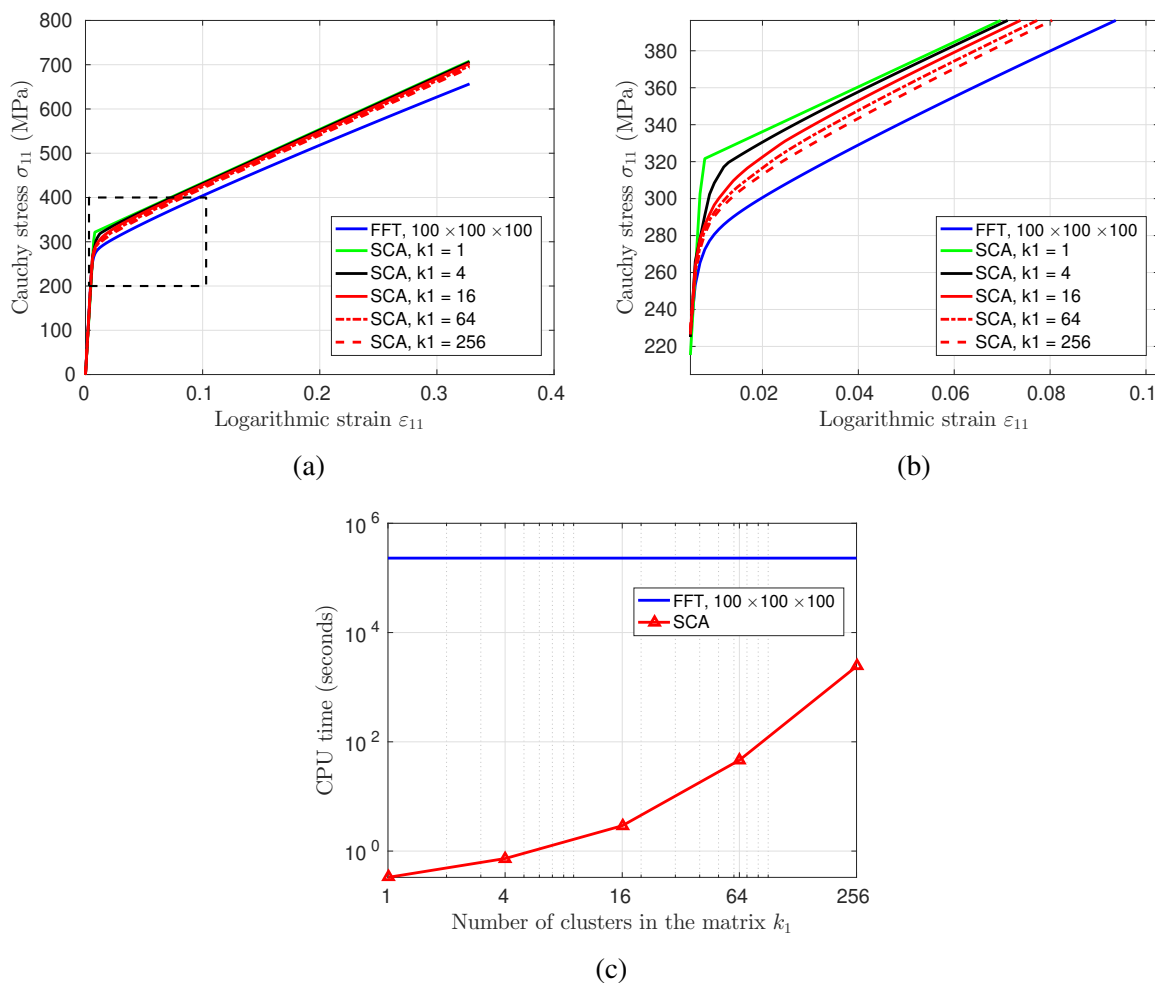


FIGURE 3.3 – Simulations avec porosités : (a) Courbes contrainte-déformation calculées par l'APA (SCA) avec différents nombres de partitions dans la matrice (k_1) et par la méthode numérique basée sur la TFR (FFT) avec un maillage de $100 \times 100 \times 100$ voxels ; (b) Zoom sur la zone rectangulaire marquée par des tirets dans (a) ; (c) Temps de calcul pour les différents résultats présentés dans (a). Image(s) issue(s) de la Référence [15].

ou du fragment d'inclusion s'il y a déjà eu rupture, et cette valeur moyennée $\bar{\sigma}_{Tresca}$ est comparée avec la résistance à la rupture σ_{Tresca}^c .

Le rayon équivalent de cette inclusion ou de ce fragment d'inclusion r est aussi comparé à une taille critique r^c . Si la résistance à la rupture a été atteinte et $r \geq r^c$, alors la partition contenant le barycentre pondéré par σ_{Tresca} de cette inclusion ou de ce fragment est changé en porosité. Les propriétés des critères de rupture sont données dans la Table 3.2.

TABLE 3.2 – Propriétés des critères de rupture pour la modélisation du tréfilage à froid

Propriété	Valeur	Unité
Résistance à la rupture	3000	MPa
Taille critique	0.17	mm

Le changement en porosité est illustré dans la Figure 3.4. En pratique, ce changement consiste à diminuer d'un facteur 1000 le module de Young dans cette partition, et ce sur plusieurs incréments de chargement. Cette procédure a lieu à la fin de chaque incrément de chargement après la prédiction avec l'APA des champs mécaniques. Comme montré dans la Figure 3.4, l'orientation de la fissure de fragmentation est prédéfinie et est orthogonale à la direction de tréfilage dans la configuration initiale. Cela nécessite de contraindre le partitionnement dans l'inclusion. L'algorithme de partitionnement par K-moyennes est ainsi utilisé dans la matrice et les porosités, tandis que l'inclusion est partitionnée dans la direction horizontale en disques d'une épaisseur de 3 voxels comme montré dans la Figure 3.4.

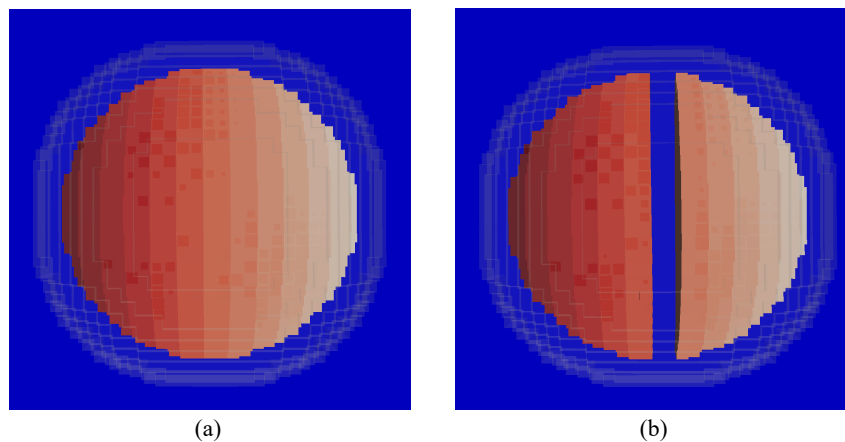


FIGURE 3.4 – Partitions (teintes de rouge) dans l'inclusion déjà détachée de la matrice : (a) avant fragmentation, (b) après fragmentation avec une partition changée en porosité. La direction de tréfilage est horizontale. Image(s) issue(s) de la Référence [15].

Un exemple de résultat est présenté dans la Figure 3.5. L'inclusion initialement ellipsoïdale a été fragmentée en deux après 45% de compression dans les directions orthogonales à la direction de tréfilage. Une localisation plastique dans la matrice autour de l'inclusion est également constatée. D'autres résultats avec différents niveaux de compression et différentes formes d'inclusion peuvent être trouvés dans la Référence [15], où des prédictions de la durée de vie sont également proposées.

Ces exemples démontrent l'applicabilité de l'APA à des problématiques réelles. Des questions demeurent néanmoins en ce qui concerne la construction de la base de données et la capacité

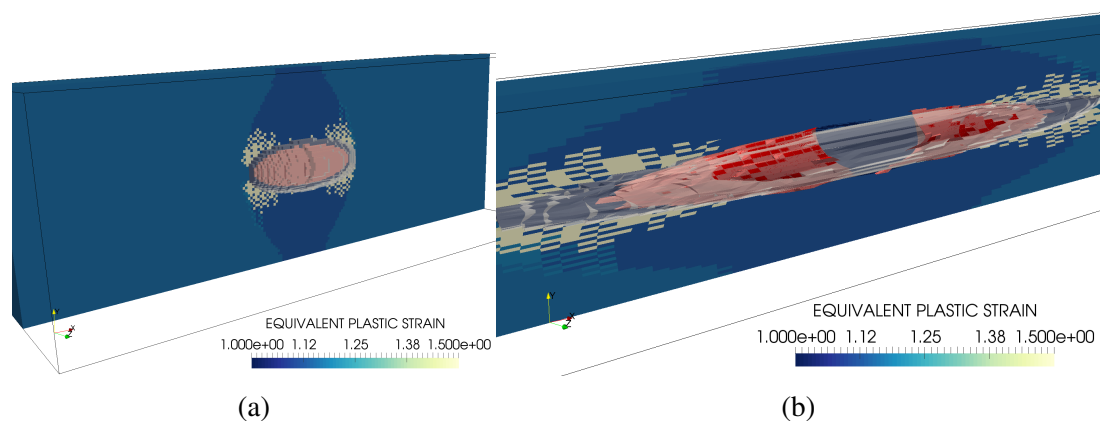


FIGURE 3.5 – Résultat d’une simulation de tréfilage à 45% de compression montrant les fragments d’inclusion en rouge, les porosités en gris, et la déformation plastique équivalente dans la matrice : (a) dans la configuration initiale, (b) dans la configuration déformée. Image(s) issue(s) de la Référence [15].

de la méthode à se généraliser à différents types de sollicitations pour de grandes déformations impliquant des phénomènes de localisation plastique ou de rupture. La précision des champs est également limitée, puisqu’ils sont considérés constants par partition. Le modèle de fragmentation repose par ailleurs sur un partitionnement qui impose d’emblée la forme de la fissure.

D’après mon expérience avec l’APA, cette méthode se prête surtout à la prédiction de quantités globales, comme les courbes contrainte-déformation ou la réponse macroscopique d’un matériau. La précision des champs au niveau local est limitée et ne permet pas de modéliser des phénomènes localisés de manière fiable. Le partitionnement qui réduit à la fois le nombre d’inconnues et le coût de l’intégration, contrairement aux approches basées sur la DOP qui nécessitent une hyper-réduction, constitue donc à la fois une force et une faiblesse de l’APA.

L’APA peut être placée dans la catégorie des approches champ moyen, catégorie au sein de laquelle elle s’illustre par l’exploitation d’un partitionnement reposant sur une base de données. Il est ainsi possible de modéliser des phénomènes assez complexes tant que seule la réponse macroscopique est d’intérêt, comme présenté dans la Section 4.1 [12]. Des réponses macroscopiques calculées par l’APA ont aussi été exploitées dans le cadre d’une analyse inverse reprenant les travaux de la Sous-section 2.1.2 [13]. L’APA permet alors de réduire grandement les temps de calcul par rapport à la méthode numérique basée sur la TFR.

Suite à ces travaux sur l’APA, je me suis intéressé à l’analyse par champs de transformation non uniformes [103] dans le cadre du stage de Konan ALLALY. Ces travaux ont révélé les limites de la DOP pour les phénomènes mécaniques non linéaires. Cela m’a poussé à m’intéresser à l’apprentissage profond pour la compression non linéaire.

3.2 Apprentissage profond

Cette Section repose essentiellement sur des travaux publiés dans la Référence [8].

De mes travaux sur l'APA, il est possible de tirer comme enseignement qu'une méthode reposant sur un partitionnement ne peut prédire précisément les champs complets et leurs variations dans le domaine. De la littérature assez large sur la DOP et d'autres méthodes de compression linéaires, il est possible d'identifier un certain nombre de difficultés de généralisation aux problèmes fortement non linéaires.

Cela m'a poussé à m'intéresser aux méthodes de compression non linéaires basées sur les RNAs profonds et en particulier les autoencodeurs. Les travaux détaillés dans cette partie sont issus d'une collaboration interne avec des chercheurs du CERI Systèmes Numériques de l'IMT Nord Europe. La première forme de cette collaboration a été un projet de recherche de Master 2, et ensuite le post-doctorat de Krushna SHINDE qui a mené à une publication [8].

Le principe de fonctionnement d'un autoencodeur est présenté dans la Sous-section 3.2.1. La Sous-section 3.2.2 décrit le MOR non linéaire développé pour résoudre des problèmes de rupture fragile fortement non linéaires. Dans la Sous-section 3.2.3, l'efficacité de l'autoencodeur pour la compression et du MOR pour la prédiction sont analysées pour des applications liées à la mécanique de la rupture.

3.2.1 Compression

Dans cette partie, les autoencodeurs sont présentés, et en particulier les autoencodeurs à convolution qui sont très intéressants pour la compression non linéaire. Un critère quantitatif est finalement proposé pour évaluer l'erreur de compression.

3.2.1.1 Autoencodeurs

Nous considérons M données $X_1, X_2, \dots, X_M \in \mathbb{R}^N$ et une matrice de données X de telle sorte que les X_1, X_2, \dots, X_M soient les lignes de cette matrice. Nous supposons que cette matrice est normalisée, *i.e.*, la moyenne sur chaque colonne est nulle et l'écart-type correspondant est égal à un.

L'autoencodeur le plus simple que nous pouvons concevoir est un réseau de neurones à propagation avant qui encode une donnée d'entrée $X_m \in \mathbb{R}^N$ (où N est le nombre de neurones d'entrée) en une représentation cachée H_m par l'opération

$$H_m = g(X_m W + b), n = 1 \dots N, \quad (3.4)$$

où $H_m \in \mathbb{R}^K$, avec K le nombre de neurones dans la couche cachée. Dans le cas d'un autoencodeur, K est la dimension d'encodage. En ce qui concerne la matrice de poids $W \in \mathbb{R}^{N \times K}$, la fonction d'activation g et le vecteur de biais $b \in \mathbb{R}^K$, il s'agit de notions communes à tous les RNAs. Comme illustré dans la Figure 3.6, la couche cachée représente la donnée d'entrée compressée. Elle est aussi appelée donnée encodée et l'espace associé est appelé espace latent ou espace réduit.

L'autoencodeur décode une reconstruction \tilde{X}_m depuis la représentation dans la couche cachée par l'opération

$$\tilde{X}_m = f(H_m V + c), \quad (3.5)$$

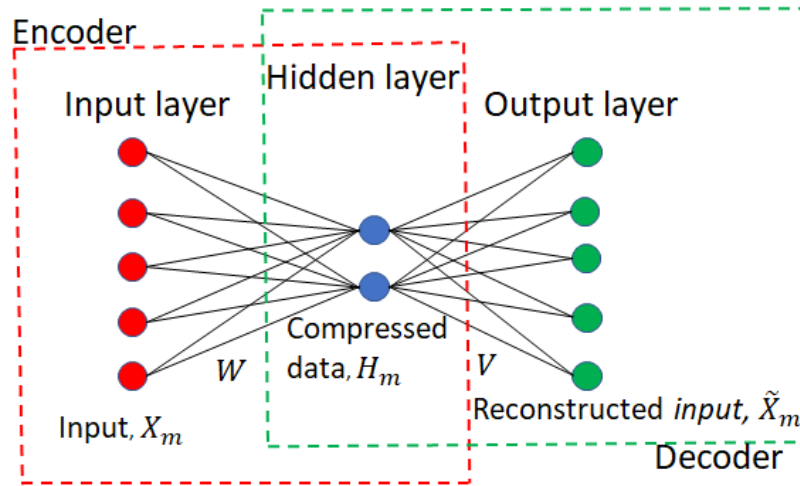


FIGURE 3.6 – Exemple d’autoencodeur simple avec une seule couche cachée. Image(s) issue(s) de la Référence [8].

où $V \in \mathbb{R}^{K \times N}$ est une autre matrice de poids, f est une autre fonction d’activation, et $c \in \mathbb{R}^N$ est un autre vecteur de biais. L’autoencodeur est entraîné dans l’objectif de minimiser une fonction de perte comme l’erreur carrée moyenne :

$$\min_{W, V, b, c} \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N (\tilde{X}_{mn} - X_{mn})^2, \quad (3.6)$$

qui assure que \tilde{X}_m soit proche de X_m , $m = 1 \dots M$. Cet autoencodeur est entraînable comme tout réseau de neurones à propagation avant en utilisant la rétropropagation du gradient. Comme montré dans la Figure 3.6, un autoencodeur peut être décomposé en deux parties : l’encodeur, qui associe à l’entrée $X_m \in \mathbb{R}^N$ sa représentation réduite $H_m \in \mathbb{R}^K$, $K \ll N$, et le décodeur, qui associe à la représentation réduite la reconstruction \tilde{X}_m .

3.2.1.2 Autoencodeurs à convolution profonds

Dans le réseau de neurones montré dans la Figure 3.6, chaque neurone de la couche L est connecté à tous les neurones de la couche $L - 1$. Ce type de couche est appelé couche totalement connectée ou couche dense. Un Réseau de Neurones à Convolution (RNC) contient des couches où les connexions sont plus efficaces pour des données d’entrée structurées comme les séries temporelles, les images 2D, les vidéos, etc. Pour ce type de données, les couches de convolution ont l’intérêt de réduire le coût en mémoire et en temps de calcul par rapport aux couches denses, ce qui devient d’autant plus avantageux pour la conception de réseaux de neurones profonds, *i.e.*, avec de nombreuses couches cachées.

D’une part, chaque neurone d’une couche de convolution L dépend d’un sous-ensemble des neurones de la couche $L - 1$. D’autre part, la notion de noyau ou filtre est essentielle pour les RNCs. En effet, pour chaque neurone de la couche L , le même filtre est appliqué au sous-ensemble de neurones correspondant dans la couche $L - 1$. Les RNCs bénéficient donc d’une interaction limitée entre les couches et d’un partage de paramètres entre les neurones des couches cachées, ce qui les rend attrayant pour les données de grandes dimensions. Les couches de convolution ont bien des avantages lorsque les données à traiter sont distribuées spatialement et représentées sous la forme d’images.

Dans la suite, un autoencodeur à convolution d'une forme semblable à celle montrée dans la Figure 3.7 est utilisé pour compresser des données. Les couches de convolution sont utilisées pour extraire des caractéristiques non linéaires des données de manière efficace, et ce dans l'objectif de trouver un espace réduit minimisant l'erreur de reconstruction. Ces couches sont utilisées à la fois dans l'encodeur et le décodeur, ce qui n'empêche pas d'exploiter également des couches denses là où cela est plus avisé.

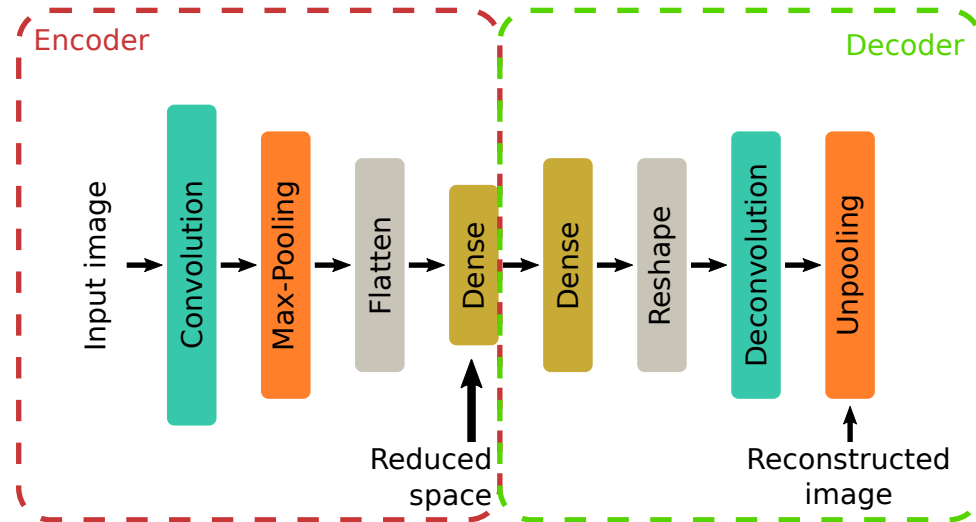


FIGURE 3.7 – Exemple d'autoencodeur à convolution. Image(s) issue(s) de la Référence [8].

Dans la Figure 3.7, l'encodeur prend comme entrée des tenseurs qui sont des images à plusieurs canaux de la forme (hauteur) \times (largeur) \times (nombre de canaux). Ensuite, il y a une couche de convolution avec un filtre de forme (hauteur du filtre) \times (largeur du filtre) \times (nombre de canaux du filtre) auquel est adossée une fonction d'activation afin de capturer les caractéristiques locales de l'image d'entrée. Les fonctions d'activation les plus utilisées dans les couches de convolution sont les fonctions sigmoid, tanh, relu, et elu.

La couche de convolution dans la Figure 3.7 est suivie d'une couche de mise en commun (Max-Pooling) afin de réduire la résolution de l'image et ainsi diminuer le nombre de poids. La sortie de la couche de mise en commun est linéarisée (Flatten) afin d'employer une couche dense qui calcule la représentation réduite.

Le décodeur part de la donnée compressée (*i.e.*, la sortie de l'encodeur) dont la forme est définie par la dimension de l'espace latent. Une première couche dense décompresse cette donnée compressée vers une taille plus large qui peut ensuite être mise sous la forme d'une image (Reshape). Elle est suivie d'une couche de convolution et d'une couche de séparation (Unpooling). Ces deux couches peuvent être fusionnées en une seule couche de convolution transposée (Conv2DTranspose) selon les implémentations.

L'encodeur et le décodeur permettent ainsi de compresser et décompresser une image.

3.2.1.3 Erreur de compression

Les autoencodeurs peuvent réduire la dimension des données et ensuite les reconstruire avec une certaine erreur de compression. Dans la suite, une analyse de la performance de cette méthode en termes de réduction de la dimension et de la reconstruction de données non linéaires est conduite. Cette analyse repose sur une séparation entre un jeu de données d'entraînement qui sert à trouver les poids et les biais du réseau de neurones, et un jeu de données de test qui est

totalemment inconnu du réseau de neurones. Trois critères sont évalués dans l'analyse. Le premier concerne la dimension de l'espace réduit. Le second concerne l'erreur de reconstruction pour les données du jeu de test. Pour mesurer celle-ci, l'erreur moyenne en norme L2 (RMSE) est utilisée :

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N (X_{mn} - \tilde{X}_{mn})^2} \quad (3.7)$$

où $X_m \in \mathbb{R}^N$ est une donnée normalisée et $\tilde{X}_m \in \mathbb{R}^N$ est la reconstruction, elle aussi normalisée. En raison de la normalisation, cette RMSE est un nombre sans dimension. Dernièrement, les temps de calcul requis pour l'entraînement des modèles et la reconstruction de données de test inédites sont mesurés.

3.2.2 Prédiction

Cette partie décrit le MOR, qui est une approche de prédiction originale basée sur l'apprentissage profond pour les problèmes fortement non linéaires de mécanique de la rupture fragile. L'initiation et la propagation de fissures dans une plaque 2D $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ est considérée. Une hétérogénéité y est introduite afin d'influencer la propagation de la fissure. Par exemple, la plaque peut être entaillée comme dans la Figure 3.8(a) et la fissure peut se propager différemment selon les conditions de chargement, comme montré dans la Figure 3.8(b).

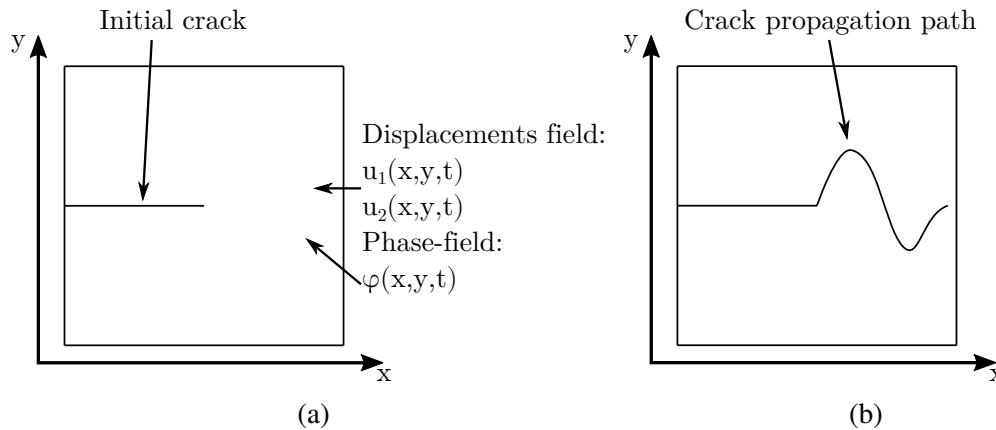


FIGURE 3.8 – Exemple représentatif de problème de rupture fragile : éprouvette avec une entaille. Image(s) issue(s) de la Référence [8].

Afin de varier les conditions de chargement aisément les déplacements u sont imposés sur tout le bord du domaine :

$$\begin{bmatrix} u_1(x, y, t) \\ u_2(x, y, t) \end{bmatrix} = G(t) \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}, \quad (x, y) \in \partial\Omega \quad (3.8)$$

où

$$G(t) = \begin{bmatrix} G_{xx}(t) & G_{xy}(t) \\ G_{yx}(t) & G_{yy}(t) \end{bmatrix} \quad (3.9)$$

avec $t \in [0, T]$, $T > 0$. Le cas particulier où G est fonction linéaire du temps correspond aux trajets de chargement proportionnels, tandis que les autres cas correspondent aux trajets non-proportionnels.

Le MOC utilisé pour générer les données et qui sert de fondement au MOR à développer est celui présenté dans la Sous-section 2.3.2. Il s'agit de l'implémentation EF dans *FEMS* du modèle de champ de phase de Wu [92]. Ce MOC repose sur une procédure itérative où chaque incrément de temps est résolu l'un après l'autre. Pour passer de l'instant t_n à l'instant t_{n+1} , il faut prédire en chaque point du domaine Ω les déplacements $u_1(x, y, t_{n+1})$ et $u_2(x, y, t_{n+1})$, et le champ de phase $\varphi(x, y, t_{n+1})$. Un bref résumé de ce MOC est proposé dans le Paragraphe 3.2.2.1.

Le MOC est utilisé pour construire une base de données pour un jeu de trajets de chargement généré aléatoirement. Pour chaque trajet et chaque incrément de temps t_n , le jeu de données contient la matrice de chargement $G(t_n)$ ainsi que les champs $u_1(x, y, t_n)$, $u_2(x, y, t_n)$ et $\varphi(x, y, t_n)$ qui sont moyennés sur chaque élément du maillage EFs. Puisque nous nous restreignons à des grilles Cartésiennes, ces moyennes résultent en une image 2D à trois canaux pour chaque incrément de temps. Ce jeu de données est présenté en détails dans le Paragraphe 3.2.2.2.

L'objectif est d'utiliser le MOC seulement pour générer des données pour un nombre limité de trajets de chargement, et ensuite de s'appuyer sur l'apprentissage profond pour faire des prédictions pour un nombre bien supérieur de trajets de chargement inédits. Cette approche ne peut être intéressante que si l'apprentissage profond est moins gourmand en ressources de calcul que le MOC pour les prédictions, et s'il calcule des prédictions au moins aussi fiables que celles du MOC. Comme mentionné précédemment, la stratégie proposée consiste à réduire d'abord la dimension du problème afin de n'avoir que quelques inconnues à prédire au lieu d'images 2D à trois canaux. La dépendance à l'histoire du modèle de champ de phase introduit une complexité additionnelle qui peut aussi être traitée par l'apprentissage profond. Le MOR non linéaire basé sur l'apprentissage profond est présenté dans le Paragraphe 3.2.2.3.

3.2.2.1 Modèle d'ordre complet

Le MOC utilisé dans ce travail sur l'apprentissage profond est celui présenté dans la Sous-section 2.3.2. Le problème d'équilibre est le même que celui de l'Équation (2.1), à l'exception des conditions aux limites qui ne reposent pas sur la décomposition du champ de déplacement en une partie linéaire et une partie périodique. Cette décomposition est remplacée par les conditions aux limites de l'Équation (3.8). Le tenseur des contraintes de Cauchy avec la fonction de dégradation non linéaire et l'équation d'évolution du champ de phase avec la variable d'histoire sont ceux décrits dans la Sous-section 2.3.2.

La seule différence est dans la méthode numérique, puisque nous nous appuyons sur une résolution par la méthode des EFs implémentée dans *FEMS*. Nous choisissons également une discrétisation en temps différente avec un couplage faible entre le champ de déplacement et le champ de phase. Dans un incrément de temps t_{n+1} , nous résolvons d'abord les équations d'équilibre en utilisant $g(\varphi(x, y, t_n))$ pour trouver $u(x, y, t_{n+1})$, et nous mettons ensuite à jour la variable d'histoire $\mathcal{H}(\sigma(u(x, y, t_{n+1})))$ afin de résoudre l'équation d'évolution du champ de phase et calculer $\varphi(x, y, t_{n+1})$. Cette stratégie restreint le pas de temps à de petites valeurs s'il s'agit d'obtenir des résultats précis.

3.2.2.2 Base de données

Le MOC basé sur un modèle de champ de phase résolu par la méthode des EFs va servir à générer des données pour l'apprentissage. Ces données sont des champs de déplacement et des

champs de phase. Le jeu de données est défini comme un tenseur :

$$X = \left(u_1^m(x_i, y_j, t_n), u_2^m(x_i, y_j, t_n), \varphi^m(x_i, y_j, t_n) \right)_{m=1 \dots N_L, n=1 \dots N_T, i=1 \dots N_x, j=1 \dots N_y}, \quad (3.10)$$

avec N_L le nombre de trajets de chargement, N_T le nombre de pas de temps, et $N_x \times N_y$ le nombre de pixels. Le jeu de données X correspond à différents trajets de chargement qui sont portés par le jeu de données

$$S = \left(G_{xx}^m(t_n), G_{xy}^m(t_n), G_{yx}^m(t_n), G_{yy}^m(t_n) \right)_{m=1 \dots N_L, n=1 \dots N_T}. \quad (3.11)$$

Pour une condition de chargement $S_{mn} \in \mathbb{R}^4$ à l'instant t_n , le champ de déplacement $u_1 \in \mathbb{R}^{N_x \times N_y}$, $u_2 \in \mathbb{R}^{N_x \times N_y}$, et le champ de phase $\varphi \in \mathbb{R}^{N_x \times N_y}$ forment une donnée $X_{mn} \in \mathbb{R}^{N_x \times N_y \times 3}$ qui est une image 2D à trois canaux. Comme décrit dans le Paragraphe 3.2.2.1, le MOC prédit X_{m+1} à partir de S_{m+1} et d'une variable d'histoire qui dépend de $(X_{mp})_{p \leq n}$, et ce à partir d'équations aux dérivées partielles basées sur la physique. Le MOR non linéaire basé sur les données et l'apprentissage profond présenté dans la Paragraphe 3.2.2.3 est conçu pour fonctionner de la même manière que le MOC.

3.2.2.3 Modèle d'ordre réduit basé sur les données

Afin de construire le MOR non linéaire basé sur les données, nous réduisons d'abord la dimension des images à trois canaux $X_{mn} \in \mathbb{R}^{N_x \times N_y \times 3}$ en utilisant la partie encodeur de l'auto-encodeur décrit dans la Sous-section 3.2.1. Le résultat est formé de représentations réduites $H_{mn} \in \mathbb{R}^K$, $K \ll N_x \times N_y \times 3$. Pour faire cela, il faut au préalable entraîner l'auto-encodeur sur le jeu de données d'entraînement.

L'étape suivante est de concevoir et entraîner un RNA pour lequel les entrées sont les conditions de chargement $(S_{mn})_{n=2 \dots N_T} \in \mathbb{R}^{(N_T-1) \times 4}$, et les sorties les représentations réduites $(H_{mn})_{n=2 \dots N_T} \in \mathbb{R}^{(N_T-1) \times K}$. La représentation réduite de l'état initial H_{m1} peut aussi être fournie en entrée, à moins qu'elle soit identique pour tous les trajets de chargement comme dans le cas présent.

Comme montré dans la Figure 3.9, l'approche d'apprentissage profond proposée fonctionne de manière récurrente. Un RNA prédit H_{m2} à partir d'une combinaison de H_{m1} et S_{m2} . Le même RNA avec exactement les mêmes poids et biais prédit H_{m3} à partir d'une combinaison de H_{m2} et S_{m3} , et ainsi de suite pour chaque incrément de temps. Par conséquent, la couche d'entrée du RNA a $K + 4$ neurones et la couche de sortie K neurones. Ce RNA peut ainsi calculer les représentations réduites pour des trajets de chargement inédits progressivement, instant après instant.

Les champs de déplacement et les champs de phase complets peuvent être reconstruits avec la partie décodeur de l'auto-encodeur. La combinaison de la procédure itérative avec le RNA reposant sur l'espace réduit et du décodeur forme le MOR non linéaire basé sur les données et imite le fonctionnement du MOC basé sur la méthode des EFs.

3.2.3 Résultats

Dans cette partie, l'auto-encodeur et le MOR sont déployés pour la modélisation d'un problème de rupture. Les deux réseaux de neurones ont été implémentés avec *Keras* [112], qui est l'interface de haut niveau de *TensorFlow 2* [113]. Les calculs ont été réalisés sur une machine avec un processeur *Intel(R) Xenon(R) E5-2630 V4* avec 10 CPUs (20 cœurs) et une carte graphique *Nvidia Tesla K80* (2496 cœurs). L'acquisition et la configuration de stations de calcul

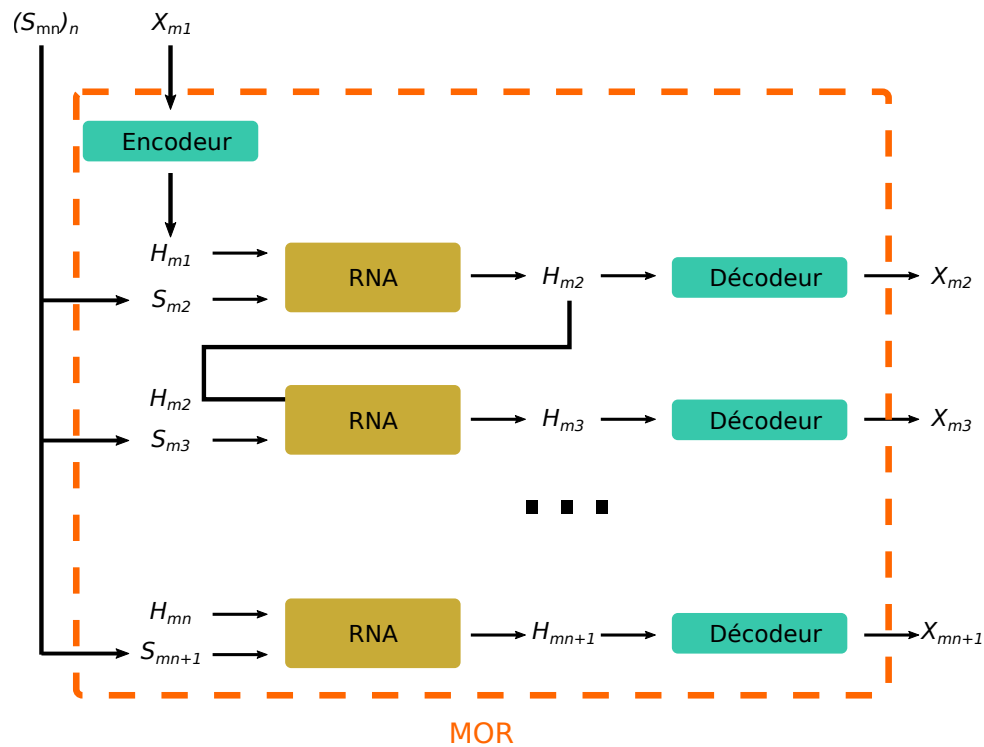


FIGURE 3.9 – MOR non linéaire basé sur les données reposant sur le même RNA à chaque incrément de temps pour modéliser la rupture. Image(s) issue(s) de la Référence [8].

équipées de cartes graphiques et de gros volumes d'espace mémoire et de stockage est un travail complémentaire indispensable à la recherche sur l'apprentissage profond.

Le problème considéré et les jeux de données sont présentés dans le Paragraphe 3.2.3.1. L'architecture de l'autoencodeur est détaillée dans le Paragraphe 3.2.3.2 et celle du MOR dans le Paragraphe 3.2.3.3. Les résultats sont ensuite présentés et analysés dans le Paragraphe 3.2.3.4 pour la partie compression prise à part, et dans le Paragraphe 3.2.3.5 en rajoutant la partie prédiction.

3.2.3.1 Jeux de données

La géométrie du problème est une plaque 2D carrée $\Omega = [0, 1] \times [0, 1] \text{mm}^2$ contenant une entaille et illustrée dans la Figure 3.10. Selon les conditions de chargement, la fissure peut se propager dans une infinité de directions. Pour des trajets de chargement non-proportionnels, la direction peut même varier pendant le chargement.

Le domaine est constitué d'un matériau fragile dont les propriétés élastiques sont $E = 210 \text{ GPa}$ et $\nu = 0.3$, et les propriétés de rupture sont $\sigma_c = 2445.42 \text{ MPa}$ et $G_c = 2.7 \text{ N mm}^{-1}$. La longueur de régularisation du modèle de champ de phase est fixée à $l_c = 0.04 \text{ mm}$ et la taille des éléments est de $\approx 0.016 \text{ mm}$, ce qui permet d'obtenir un maillage EFs quadrangulaire et structuré de 62×62 éléments. Une intégration complète avec quatre points d'intégration par élément est utilisée. L'entaille est introduite en dupliquant les nœuds. Cela change le nombre de nœuds du maillage EFs mais pas le nombre d'éléments et ne pose donc pas de problème pour le formatage des données sous forme d'images 62×62 .

La taille de maille et la longueur de régularisation sont choisies volontairement assez grandes pour obtenir des images d'une résolution raisonnable et limiter la taille de la base de données.

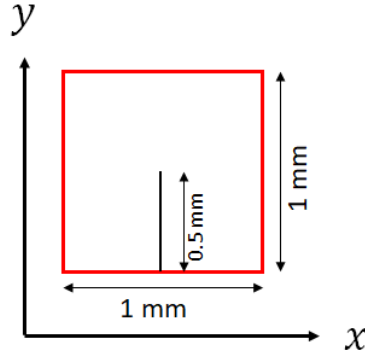


FIGURE 3.10 – Géométrie de la plaque entaillée. Les bords où les déplacements sont imposés d’après l’Équation (3.8) sont surlignés en rouge. Image(s) issue(s) de la Référence [8].

Pour la même raison, le nombre de pas de temps est de $N_T = 201$ (incluant l’état initial), avec le temps final $T = 0.02$ s. L’objectif principal est de montrer que l’autoencodeur et le MOR peuvent produire des résultats comparables à ceux du MOC. C’est pourquoi le fait que le MOC pourrait être plus précis avec un maillage et un pas de temps plus fins n’est pas problématique.

Nous construisons d’abord une base de données contenant les résultats calculés par le MOC pour 1024 trajets de chargement proportionnels générés aléatoirement, avec $\|G^m(T)\|_2^2 = T$, $m = 1 \dots N_L$. Nous incluons manuellement dans cette base de données huit trajets de chargement particuliers correspondant à

$$\begin{aligned} G^1(T) &= \begin{pmatrix} T & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, G^2(T) = \begin{pmatrix} 0 & T \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, G^3(T) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ T & 0 \end{pmatrix}, \\ G^4(T) &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & T \end{pmatrix}, G^5(T) = \begin{pmatrix} -T & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, G^6(T) = \begin{pmatrix} 0 & -T \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ G^7(T) &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -T & 0 \end{pmatrix}, G^8(T) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -T \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Cette base de données contient ainsi 205824 images (correspondant aux 1024 trajets de chargement avec 201 pas de temps) avec trois canaux de telle sorte que chaque image a une taille de 62×62 , *i.e.*, (1024,201,62,62,3). Cette base de données de presque 18 GB est divisée par rapport aux trajets de chargement en un jeu d’entraînement (157584 images correspondant à 784 trajets de chargement), un jeu de données de validation (17487 images correspondant à 87 trajets de chargement), et un jeu de données de test (30753 images correspondant à 153 trajets de chargement). Les huit trajets de chargement particuliers sont inclus dans le jeu de données d’entraînement. Toutes les images sont normalisées en soustrayant l’image moyenne et en divisant par l’image écart-type calculée sur le jeu de données d’entraînement.

Nous construisons ensuite une seconde base de données pour une évaluation plus approfondie des réseaux de neurones sur des données de test inédites. Cette base de données correspond à 100 trajets de chargement non-proportionnels générés aléatoirement. La procédure pour obtenir un trajet de chargement non-proportionnel consiste à : générer une courbe continue de sept segments de ligne d’une longueur égale à $\frac{T}{7}$ dans l’espace $(G_{xx}, G_{xy}, G_{yx}, G_{yy})$, et orientés aléatoirement ; calculer une B-spline cubique passant par les extrémités de ces segments ; interpoler les matrices $G^m(t_n)$, $n = 1 \dots 201$ à partir de la spline. Cela rajoute 20100 images utilisables comme jeu de données de test supplémentaire.

Les trajets de chargement proportionnels générés sont montrés dans les Figures 3.11(a) et 3.11(b),

et les trajets non-proportionnels dans les Figures 3.11(c) et 3.11(d).

Nous pouvons clairement voir qu'une grande variété de directions est considérée pour les trajets proportionnels, mais que la longueur des segments est toujours identique. Dans le cas non-proportionnel, la visualisation est plus difficile car les courbes sont emmêlées, mais leur longueur est également toujours à peu près identique.

3.2.3.2 Autoencodeur

L'autoencodeur utilisé pour la compression est présenté dans la Figure 3.12(a) pour la partie encodeur et la Figure 3.12(b) pour la partie décodeur.

La partie encodeur prend une entrée au format (62,62,3). Elle démarre avec deux couches de convolution, chacune suivie par une couche de mise en commun, et elle finit par une couche de linéarisation et une couche dense. L'encodeur montré dans la Figure 3.12(a) repose sur un espace latent de dimension 5.

La partie décodeur part d'une représentation réduite au format (5). Elle démarre par une couche dense et une couche de conversion au format image, et elle finit par deux couches de convolution transposée (Conv2DTranspose) et une couche de convolution reconvertissant l'image dans son format original (62,62,3).

Une fonction d'activation linéaire est utilisée dans la dernière couche dense de l'encodeur et la dernière couche de convolution du décodeur. Une fonction d'activation ELU est utilisée pour toutes les couches de convolution de l'encodeur, et toutes les couches de déconvolution du décodeur. La fonction de perte pour entraîner l'autoencodeur est l'erreur carrée moyenne.

Selon les applications (principalement en mécanique des fluides), différentes architectures d'autoencodeur ont été proposées dans la littérature [109]. L'architecture de la Figure 3.12 est assez similaire à celle proposée dans la Référence [114] pour des applications biomédicales. Nous avons optimisé notre architecture par rapport au format de nos images et aux types de données que nous avons.

3.2.3.3 Modèle d'ordre réduit basé sur les données

Comme expliqué dans le Paragraphe 3.2.2.3, le MOR est en réalité un réseau récurrent intégrant un RNA qui prédit les sorties progressivement, instant après instant. L'architecture de ce RNA consiste en des couches denses. Il prend une entrée au format $(K + 4)$. Ce format d'entrée résulte d'une combinaison de la dimension de l'espace latent K et du nombre de composantes de G (4). La couche d'entrée est suivie par trois couches denses cachées et une couche dense de sortie. Les trois couches cachées ont respectivement 216, 324, et 540 neurones, et utilisent une fonction d'activation ELU. La couche de sortie utilise une fonction d'activation linéaire pour calculer une sortie au format (K) .

L'entraînement du MOR consiste en réalité à entraîner le RNA qu'il intègre, comme montré dans la Figure 3.9. La fonction de perte pour cet entraînement est l'erreur carrée moyenne. Afin d'éviter le décodage répétitif des représentations réduites pendant l'entraînement, cette fonction de perte est calculée directement sur les représentations réduites, qui sont pré-calculées pour les jeux de données d'entraînement et de validation.

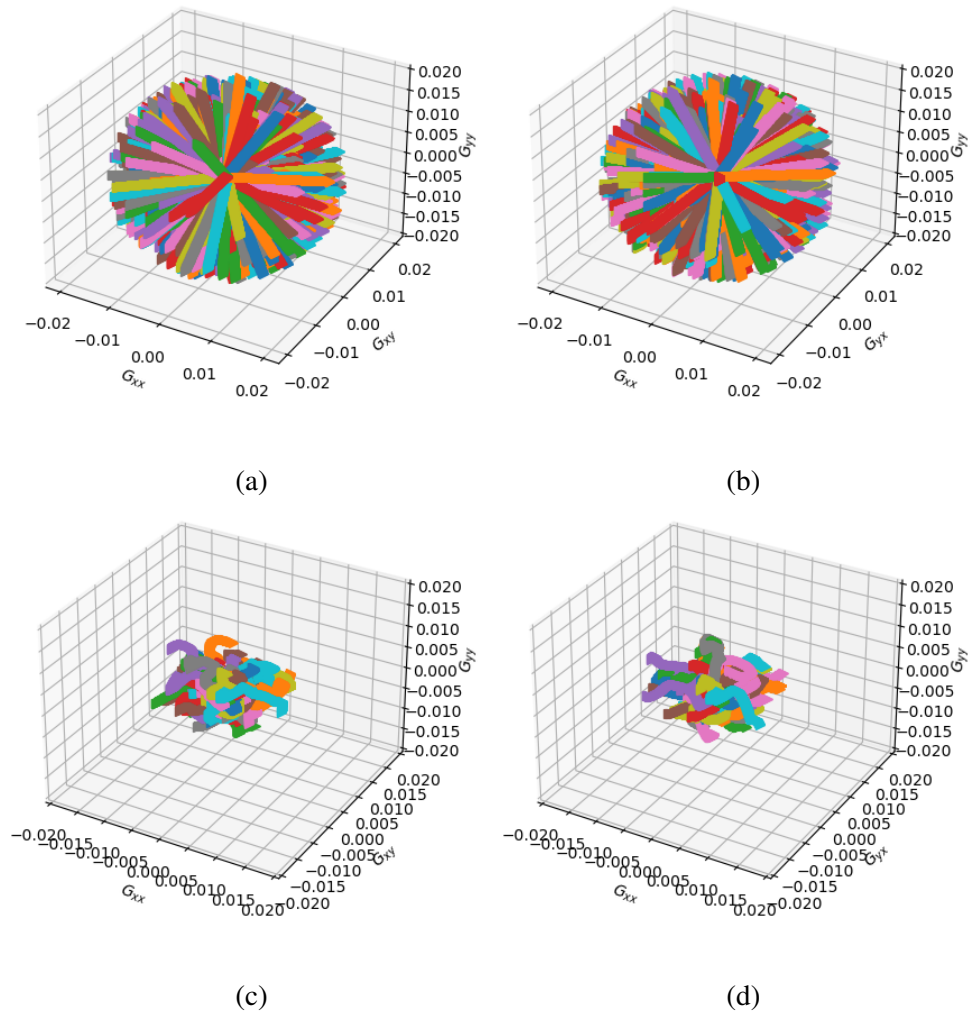


FIGURE 3.11 – Trajets de chargement générés : (a,b) 1024 trajets proportionnels, (c,d) 100 trajets non-proportionnels. Image(s) issue(s) de la Référence [8].

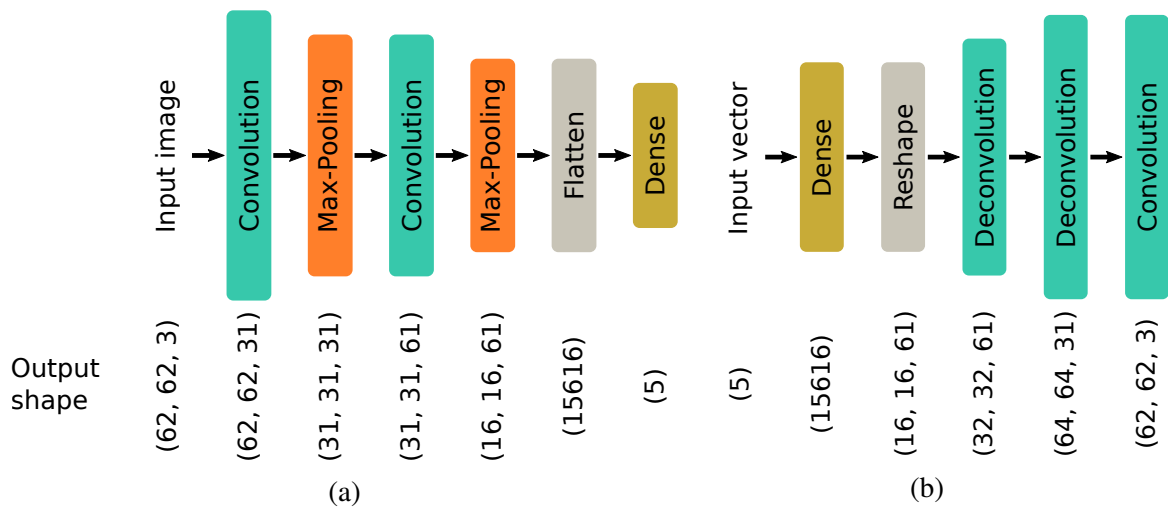


FIGURE 3.12 – Architecture de l’autoencodeur à convolution : (a) encodeur, (b) décodeur. Image(s) issue(s) de la Référence [8].

3.2.3.4 Reconstruction des fissures pour des trajets de chargement inédits

Dans cette partie, l'efficacité de l'autoencodeur est évaluée pour la compression de données non linéaires. Cette évaluation est réalisée pour différents niveaux de compression correspondant à différentes dimensions de l'espace latent. L'erreur de reconstruction et les temps de calcul sont tous deux analysés.

Nous obtenons une RMSE moyenne sur les 153 trajets de chargement proportionnels inédits du jeu de données de test de 0.0331 en utilisant un espace latent de dimension 5, 0.0234 avec une dimension de 10 et 0.0119 avec une dimension de 50. Il est rappelé que la RMSE est calculée sur les données normalisées. L'erreur très faible obtenue avec un espace latent de dimension 5 est donc un résultat assez prometteur.

L'erreur moyenne peut néanmoins dissimuler de fortes erreurs sur certaines images. La RMSE de chaque image est montrée dans la Figure 3.13. Nous pouvons observer la présence de plusieurs images ayant une RMSE supérieure à 0.05, et même de certaines images avec une RMSE supérieure à 0.5. Nous obtenons toutefois une diminution systématique de la RMSE avec un espace latent plus grand. Il est en fait possible de réduire la RMSE pour presque toutes les images en dessous de 0.2 en utilisant une dimension d'encodage de 50.

Il est intéressant d'analyser le pire résultat, qui est l'image associée au plus haut pic au milieu de la Figure 3.13. Cette image correspond au dernier pas de temps d'un trajet de chargement. Tous les champs non-normalisés pour cette image sont montrés dans la Figure 3.14. La propagation de la fissure en diagonal révèle que les conditions aux limites pour cette image sont dominées par du cisaillement. L'excès de contraintes en raison des conditions aux limites particulières utilisées pour générer le jeu de données mène à l'initiation et à la propagation de fissures supplémentaires le long du bord de la plaque.

L'autoencodeur a clairement des difficultés à apprendre la complexité du chemin de fissuration, notamment en ce qui concerne le champ de phase. Il est plus aisé d'analyser cela à partir de la Figure 3.15, qui montre le résultat obtenu par le MOC, et les champs d'erreur absolue sur les données non-normalisées par rapport au résultat obtenu par le MOC pour différentes dimensions d'espace latent.

La difficulté provient du champ de phase et de la propagation de la fissure le long du bord de la plaque. Avec un espace latent de dimension 5, l'autoencodeur sur-estime la rupture, comme le prouve la perte de deux régions sans fissure le long du bord après reconstruction. Ces deux régions sont retrouvées avec une dimension d'espace latent de 10 ou 50.

Étant donné que la présence d'une fissure le long du bord de la plaque a peu d'effet sur le champ de déplacement, ce dernier est reconstruit assez précisément par l'autoencodeur quelle que soit la dimension de l'espace latent. Les seules erreurs restantes et qui peuvent être réduites avec une représentation réduite plus riche sont dues au saut de déplacement le long de la fissure.

En ce qui concerne le temps de calcul, il est principalement dû à l'entraînement de l'autoencodeur. D'une part, ce temps d'entraînement est proche de 50 h avec une dimension de 5 et de 60 h avec 50. D'autre part, les simulations avec le MOC pour les 1024 trajets proportionnels prend environ 16 h (55 s par trajet) sur une station de calcul avec un processeur *Intel Xeon(R) W-2175* ayant 14 CPUs (28 cœurs). La génération des données et l'entraînement de l'autoencodeur prend donc plusieurs jours pour ce problème, avec une influence assez faible de la dimension de l'espace latent.

L'autoencodeur est relativement rapide une fois entraîné, puisque l'encodage et le décodage de

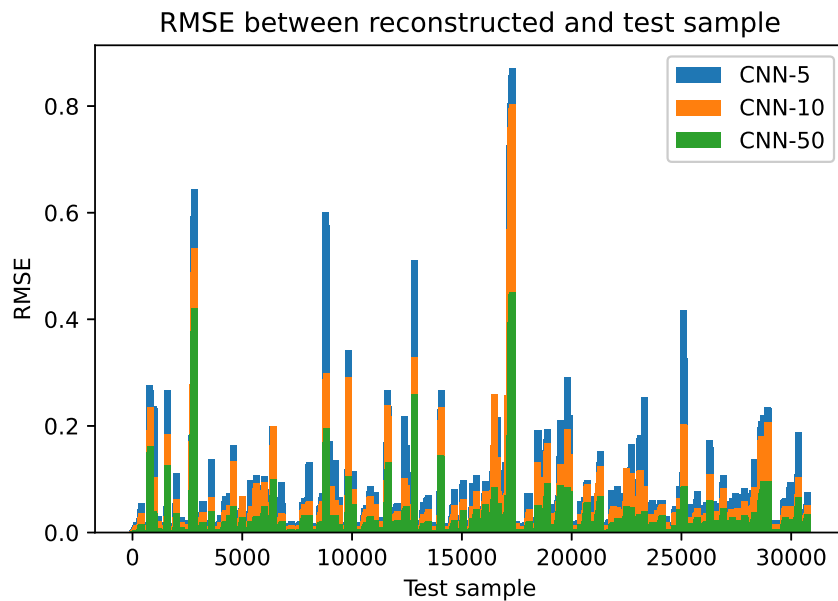


FIGURE 3.13 – RMSE entre chaque image reconstruite (CNN) et l’original (HFM) correspondant issu du jeu de test proportionnel pour différentes dimensions d’espace latent. Image(s) issue(s) de la Référence [8].

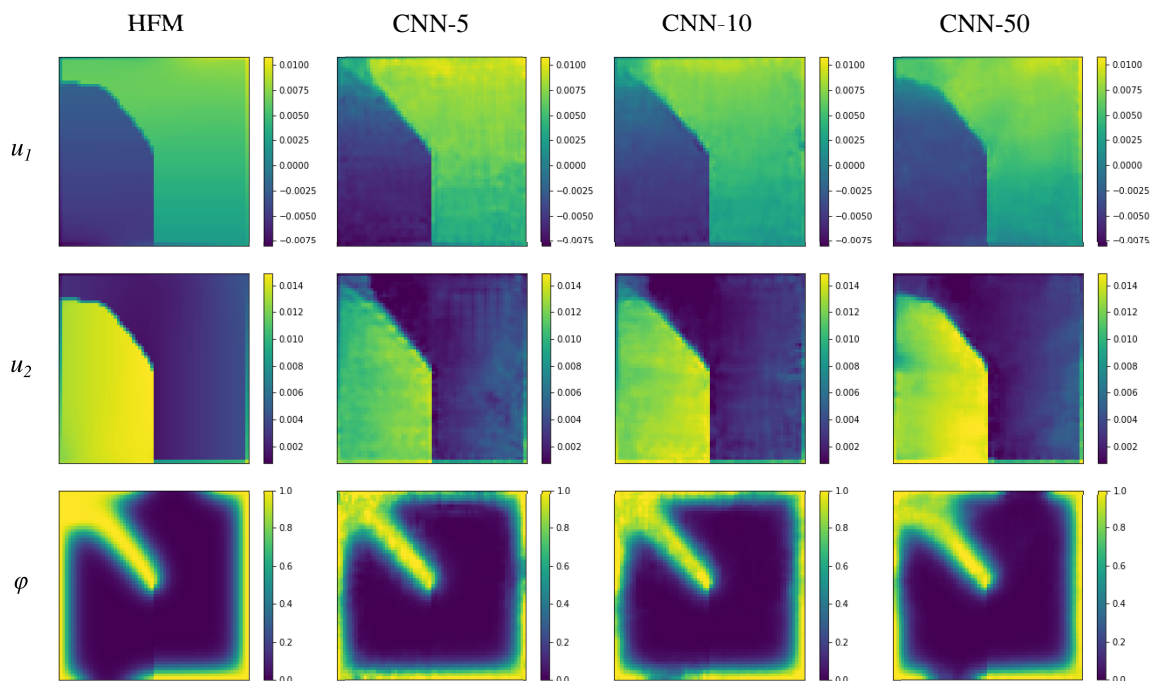


FIGURE 3.14 – Comparaison entre chaque image reconstruite (CNN) et l’original (HFM) correspondant issu du jeu de test proportionnel pour différentes dimensions d’espace latent. Chaque ligne correspond à un champ différent et chaque colonne à un résultat différent. Les déplacements sont en millimètres. Image(s) issue(s) de la Référence [8].

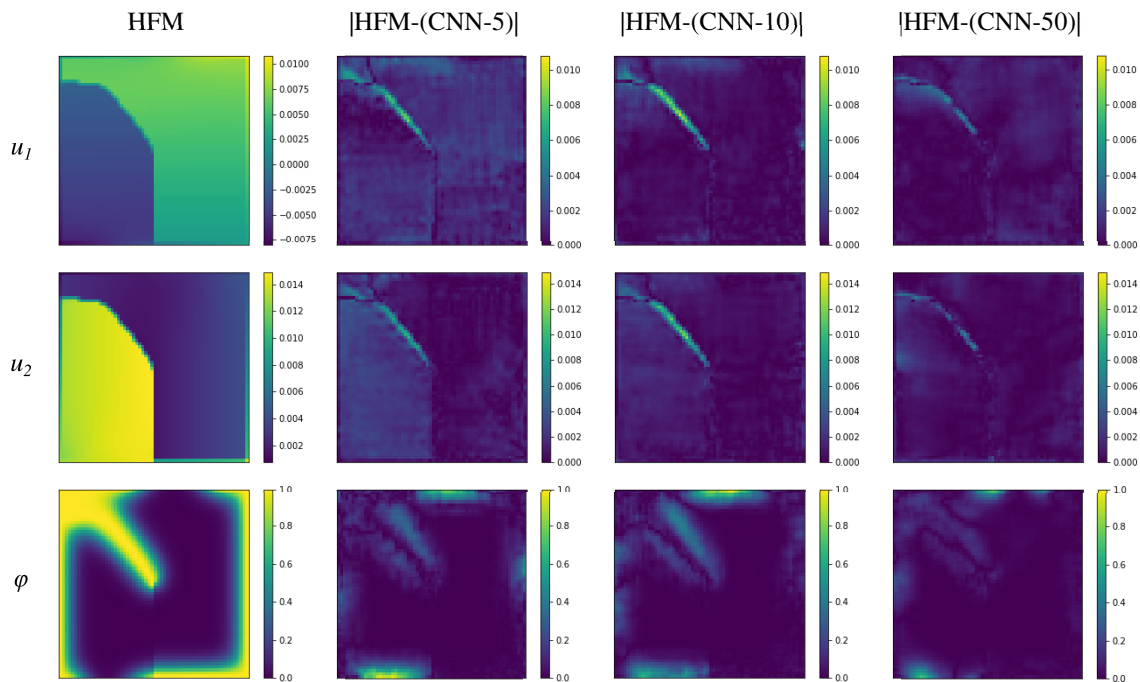


FIGURE 3.15 – Original (HFM) issu du jeu de test proportionnel et erreur absolue entre cet original et la reconstruction (CNN) obtenue pour différentes dimensions d’espace latent. Chaque ligne correspond à un champ différent et chaque colonne à un résultat différent. Les déplacements sont en millimètres. Image(s) issue(s) de la Référence [8].

201 images pour un trajet de chargement complet prend environ 1.3 s (6.5 ms par image). Ce temps de reconstruction varie peu en changeant la dimension de l’espace latent.

Pour résumer, bien que la RMSE moyenne soit déjà assez faible en utilisant un espace latent de dimension 5, des erreurs assez grandes sont obtenues sur certaines images. Ces erreurs peuvent être réduites en utilisant une dimension plus grande, et ce sans augmentation significative du temps d’entraînement ou de reconstruction. Afin de construire le MOR, nous choisissons donc une dimension d’espace latent de 50.

3.2.3.5 Prédiction des fissures pour des trajets de chargement inédits

Dans la suite, le MOR décrit dans la Figure 3.9 est déployé avec une dimension d’encodage de 50 pour l’espace réduit, et ce en s’appuyant sur l’autoencodeur déjà entraîné. De même que pour l’autoencodeur, afin d’entraîner le RNA intégré dans le MOR, nous utilisons seulement le jeu de données d’entraînement lié à des trajets de chargement proportionnels. Nous employons ensuite ce MOR entraîné pour calculer des prédictions pour des trajets de chargement inédits et proportionnels ou non-proportionnels.

Nous obtenons une RMSE moyenne pour les 153 trajets de chargement du jeu de test de 0.0559, ce qui est du même ordre que l’erreur de reconstruction avec la même dimension d’encodage (0.0119). Dans ce travail, même si l’autoencodeur met plus de temps à entraîner, sa première vocation est de produire un espace réduit servant de base pour le MOR. Ces résultats confirment que l’autoencodeur parvient avec succès à faciliter le calcul des prédictions. La distribution de la RMSE sur tout le jeu de test est montrée dans la Figure 3.16. Nous ob-

servons que le MOR mène à des erreurs systématiquement plus grandes en comparaison de l'autoencodeur. Cela n'est pas surprenant puisque le calcul d'une prédiction requière de traverser le RNA et ensuite le décodeur.

Il y a plus de cas pour lesquels la RMSE est supérieure à 0.5, et nous trouvons même certains cas pour lesquels elle est supérieure à 1. Cela montre que l'autoencodeur est un outil prometteur pour la compression de données issues de la mécanique non linéaire, mais il y a encore un travail de recherche à faire en ce qui concerne le MOR.

Il est intéressant de regarder encore une fois le même résultat montré précédemment dans la Figure 3.15. Nous trouvons en effet que l'erreur de prédiction est deux fois supérieure à l'erreur de reconstruction pour ce résultat, qui correspond par ailleurs au second pic le plus haut au milieu de la Figure 3.16. Les erreurs absolues en utilisant le MOR pour ce résultat sont montrées dans la Figure 3.17.

Contrairement à ce que les erreurs assez larges suggèrent, le MOR prédit assez précisément la propagation de la fissure en diagonal causée par le cisaillement. Les erreurs sont localisées le long du bord de la plaque pour le champ de phase, et sont relativement faibles pour le champ de déplacement.

Les capacités de l'autoencodeur et du MOR à prédire des chemins de fissuration complexes sont aussi évaluées pour 100 trajets de chargement non-proportionnels inédits. Nous trouvons une RMSE moyenne de 0.0124 pour la reconstruction et de 0.0887 pour la prédiction. Cette augmentation des erreurs s'explique par le fait que l'autoencodeur et le MOR ont tous deux été entraînés seulement sur des données issues de trajets de chargement proportionnels. Cette augmentation des erreurs n'est néanmoins pas significative, et démontre la robustesse et la bonne capacité de généralisation de l'approche proposée.

Les distributions d'erreur sont montrées dans la Figure 3.18. Pour ces trajets de chargement non-proportionnels, nous trouvons beaucoup de cas pour lesquels il n'y a pas d'initiation de fissure et donc une erreur proche de zéro à la fois pour l'autoencodeur et le MOR. Pour les cas restants, nous trouvons des erreurs qui sont du même ordre que celles trouvées pour des trajets de chargement proportionnels dans la Figure 3.16.

Nous choisissons encore une fois d'analyser le résultat avec la plus grande erreur de reconstruction. Les erreurs absolues pour ce résultat sont montrées dans la Figure 3.19. D'une part, cet exemple confirme que l'autoencodeur compresses très précisément les images, même pour des trajets de chargement non-proportionnels inédits. Il est effectivement important de rappeler qu'il n'y a aucun résultat avec une fissure courbe dans le jeu de données d'entraînement.

D'autre part, le MOR prédit une fissure droite dans une direction incorrecte, ce qui mène à des erreurs très grandes. L'amélioration de l'intégration de l'historique de chargement dans le MOR semble nécessaire afin d'améliorer les résultats. Cela pourrait être réalisé avec le développement d'un autoencodeur pour la variable d'histoire du modèle de champ de phase et l'introduction de cette variable compressée dans le MOR. Cela sera considéré dans des travaux futurs.

Pour finir, en ce qui concerne les temps de calcul, nous avons un temps d'entraînement du MOR qui est négligeable, puisqu'il est de seulement 40 min. Une fois l'entraînement terminé, le temps passé à prédire des représentations réduites et à les décoder est très limité, puisqu'il est proche de 0.22 s par trajet de chargement. Le MOR proposé est donc bien moins coûteux que le MOC, avec une réduction du temps de calcul d'un facteur d'au moins 250.

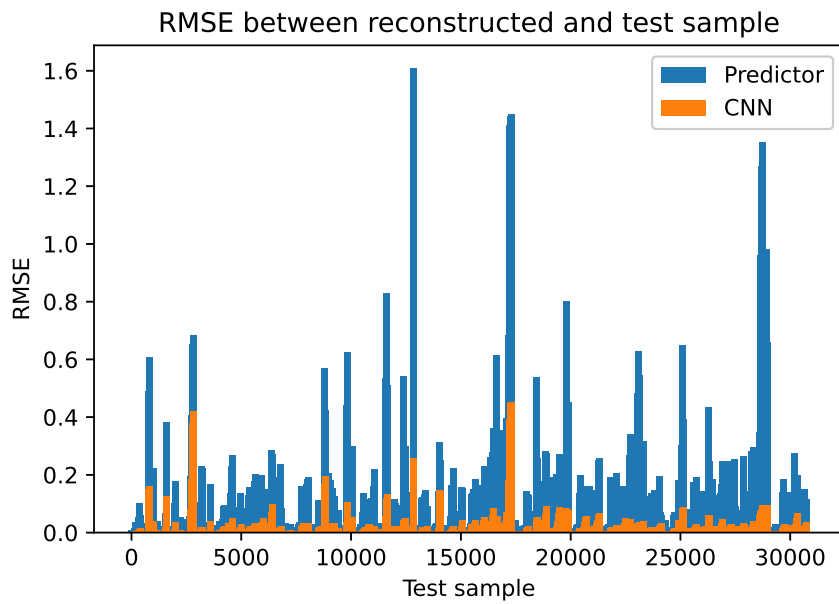


FIGURE 3.16 – RMSE entre chaque image reconstruite/prédite (CNN/Predictor) et l’original (HFM) correspondant issu du jeu de test proportionnel. Image(s) issue(s) de la Référence [8].

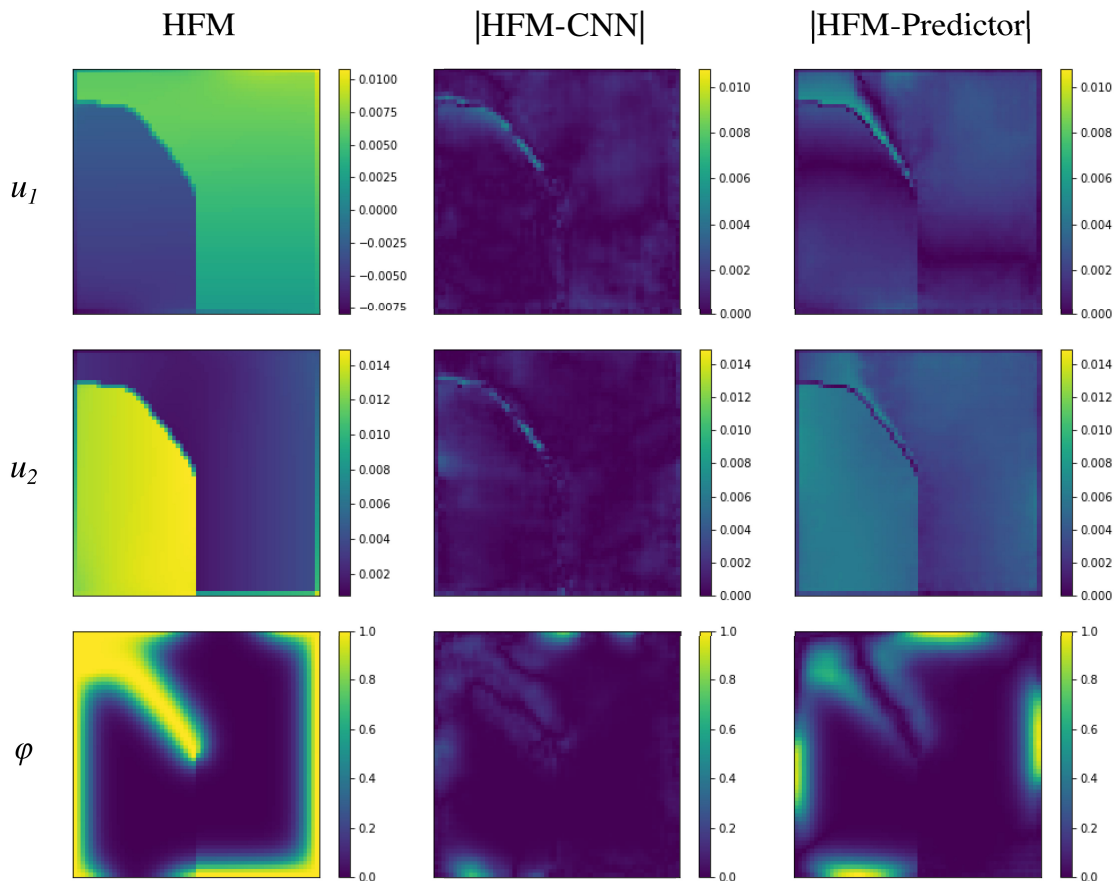


FIGURE 3.17 – Original (HFM) issu du jeu de test proportionnel et erreur absolue entre cet original et la reconstruction (CNN) et la prédiction (Predictor) obtenues. Chaque ligne correspond à un champ différent et chaque colonne à un résultat différent. Les déplacements sont en millimètres. Image(s) issue(s) de la Référence [8].

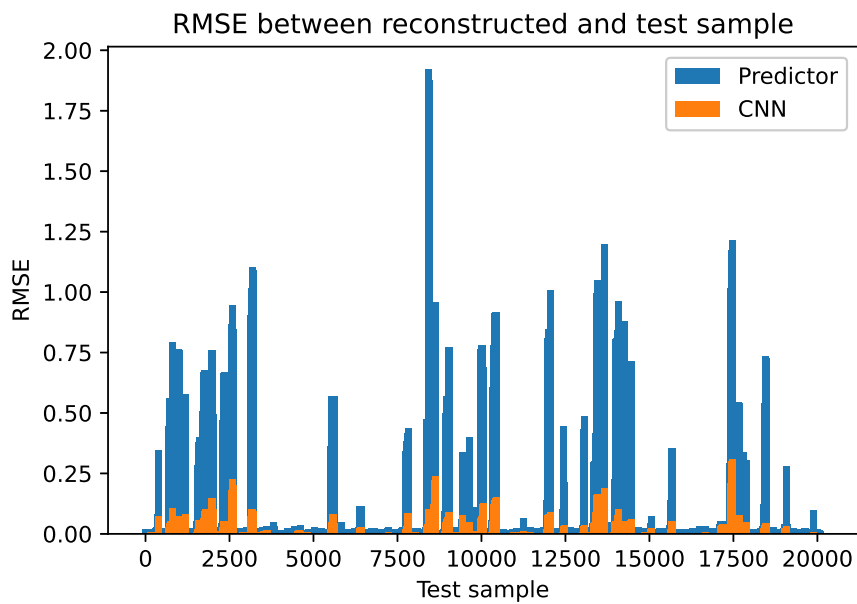


FIGURE 3.18 – RMSE entre chaque image reconstruite/prédite (CNN/Predictor) et l’original (HFM) correspondant issu du jeu de test non-proportionnel. Image(s) issue(s) de la Référence [8].

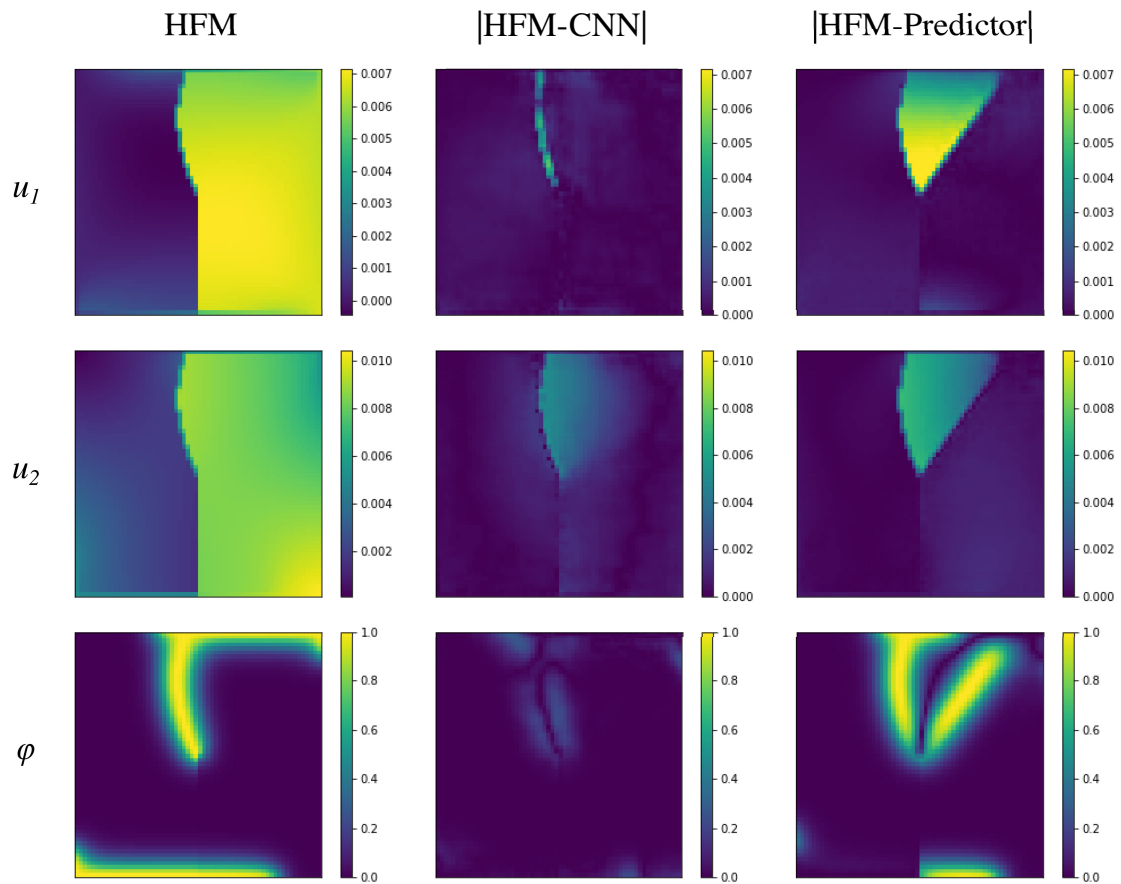


FIGURE 3.19 – Original (HFM) issu du jeu de test non-proportionnel et erreur absolue entre cet original et la reconstruction (CNN) et la prédiction (Predictor) obtenues. Chaque ligne correspond à un champ différent et chaque colonne à un résultat différent. Les déplacements sont en millimètres. Image(s) issue(s) de la Référence [8].

Conclusion

Deux méthodes de réduction de modèle ont été présentées dans ce chapitre. Les deux méthodes reposent sur un fonctionnement en trois étapes. La première étape est de générer des données avec un MOC basé sur une approche conventionnelle comme la méthode numérique basée sur la TFR ou la méthode des EFs. La seconde étape consiste à compresser les données. Finalement, des prédictions sont réalisées dans la troisième étape avec un MOR où le nombre d'inconnues à prédire et donc le temps de calcul est fortement réduit.

La première méthode abordée dans le chapitre est l'APA. Dans cette méthode, la compression est réalisée avec un partitionnement par K-moyennes et les prédictions avec une approche de champ moyen où les inconnues sont considérées constantes par partition. L'avantage de l'APA par rapport aux approches basées sur la DOP est la réduction simultanée du nombre d'inconnues à calculer et du nombre de points d'intégration. Elle ne nécessite donc pas d'hyper-réduction. Cet avantage est aussi une faiblesse, puisqu'il limite grandement la précision des prédictions du MOR au niveau local.

Mes contributions autour de l'APA ont concerné son extension à divers types de comportements, et notamment aux déformations finies afin de modéliser l'endommagement ductile. Bien qu'il y ait des applications où l'intérêt de cette approche est avéré, le manque de précision au niveau local est assez limitant. L'APA peut donc être considérée comme une méthode à champ moyen basée sur les données et assez fiable, mais seulement au niveau macroscopique.

Pour obtenir des prédictions fiables au niveau local, une deuxième approche reposant sur une méthode de compression non linéaire a été présentée. Cette méthode repose sur deux réseaux de neurones profonds : un autoencodeur pour la compression et un MOR intégrant un RNA pour la prédiction. Cette approche a été développée pour des problèmes d'initiation et de propagation de fissures avec des trajets de chargement proportionnels et non-proportionnels. Les résultats montrent que l'autoencodeur compresse les données efficacement vers un espace réduit de taille assez faible et qu'il se généralise assez bien. Le MOR, toutefois, ne tient pas suffisamment compte de l'historique de chargement malgré sa structure récurrente et ne permet donc pas de traiter des trajets de chargement complexes.

Chapitre 4

Modélisation multi-échelle

(...) homo sapiens a, au fond, plus
peur de la solitude que de la mort.

Emmanuel Todd

- Introduction 144
- 4.1 Rupture 146
 - 4.1.1 Méthode 146
 - 4.1.2 Résultats 149
- 4.2 Écoulements 152
 - 4.2.1 Modèle multi-échelle 152
 - 4.2.2 Méthode numérique 154
 - 4.2.3 Résultats 155
- Conclusion 159

Introduction

Les chapitres 1 et 2 ont traité la modélisation numérique de phénomènes physiques fortement non linéaires et localisés. Malgré le travail conséquent autour de l'efficacité des méthodes numériques, avec notamment la parallélisation, les résultats présentés ont exclusivement concerné de petits domaines de calculs contenant une hétérogénéité. Dans le Chapitre 3, il a été démontré que pour de grandes campagnes de calculs avec une certaine redondance une accélération par plusieurs ordres de grandeur est possible à l'aide de méthodes de compression et de réduction de modèle, notamment lorsque seules les conditions aux limites changent entre deux calculs. Ce chapitre porte l'intérêt vers le déploiement de modèles fortement non linéaires comme ceux développés aux chapitres 1 et 2 à l'échelle de structures de plus ou moins grandes tailles comme les éprouvettes de laboratoire, les tableaux de bord des automobiles, les réservoirs d'hydrogènes, les pales d'éoliennes, etc.

L'objectif est de développer des méthodes multi-échelles permettant de séparer la discrétisation du domaine de calcul de celle de l'hétérogénéité. L'hypothèse sous-jacente est que l'échelle caractéristique de l'hétérogénéité est petite par rapport à celle du domaine de calcul, cette dernière étant appelée dans la suite grande échelle. Les deux principales difficultés sont le développement du modèle multi-échelle reliant les deux échelles, et son implémentation robuste et efficace. Pour ce deuxième objectif, les Modèles d'Ordre Réduit (MORs) développés dans le Chapitre 3 ont leur rôle à jouer.

La thématique de la modélisation multi-échelle a longuement été étudiée en mécanique des matériaux afin de produire des lois de comportement plus prédictives en s'inspirant de la microstructure [115, 116]. La théorie de l'homogénéisation permet par exemple de trouver la relation contrainte-déformation d'un matériau à partir d'un développement limité du champ de déplacement et d'un principe de conservation de l'énergie mécanique qui est appelé lemme de Hill-Mandel [115]. Avec cette théorie, il est même possible de faire des hypothèses simplificatrices à l'échelle microscopique afin de permettre une résolution analytique et obtenir un modèle de comportement destiné à être utilisé à l'échelle macroscopique. C'est le cas par exemple pour les modèles de Mori-Tanaka [117] ou de Gurson [118]. Pour des modèles plus complexes et plus proches de la réalité, il apparaît nécessaire de se tourner vers l'homogénéisation numérique avec la méthode des Éléments Finis (EFs), la méthode numérique basée sur la Transformée de Fourier Rapide (TFR) ou d'autres méthodes [116].

Pour des phénomènes transitoires et non linéaires, l'homogénéisation concurrente avec un schéma de type $EF \times EF$ (EF^2) est particulièrement intéressante [119]. Cette méthode consiste à discrétiser le domaine sans tenir compte de l'hétérogénéité, et à ne discrétiser celle-ci qu'à l'échelle de Volumes Élémentaires Représentatifs (VERs). Ces VERs sont de petits domaines de calcul discrétisés séparément et attachés à chaque point d'intégration du modèle EF du grand domaine. À chaque incrément de temps, il convient de résoudre simultanément un problème à la grande échelle et un problème supplémentaire pour chaque VER. Cette approche est d'un grand intérêt pour l'industrie puisqu'elle tire sa fiabilité et son caractère prédictif de la modélisation des phénomènes physiques directement à l'échelle de la microstructure, et qu'elle permet également de visualiser et d'expliquer ces phénomènes à différentes échelles. Son application à des problématiques industrielles concrètes est néanmoins limitée, notamment en raison des coûts de calcul non négligeables qu'elle engendre.

Bien qu'elles aient été très largement étudiées et exploitées en calcul de structures, les méthodes multi-échelles et notamment les approches de type EF^2 ont très peu été abordées pour la

mécanique des fluides. La seule exception, non négligeable, est la modélisation des écoulements dans les milieux dits poreux ou perméables. Dans ces écoulements, l'hétérogénéité est due à la présence d'obstacles dont la taille caractéristique est petite par rapport à la taille du domaine. Ces écoulements sont bien compris et peuvent être modélisés avec précision même lorsque les obstacles sont très petits et ont une distribution et une morphologie complexes tant qu'ils sont stationnaires et laminaires [120].

En effet, pour des écoulements visqueux les équations gouvernant la petite échelle sont les équations de Stokes. De nombreuses théories ont été proposées pour relier les champs de vitesse et de pression entre les deux échelles, avec des choix variés pour les conditions aux limites à employer à la petite échelle. Ces théories montrent que les équations gouvernant la grande échelle impliquent la loi de Darcy [120]. Cette dernière repose sur la définition d'un tenseur de perméabilité qui peut être calculé analytiquement ou numériquement selon la complexité de la distribution et de la morphologie de l'hétérogénéité à la petite échelle.

Il n'est généralement pas possible d'utiliser la loi de Darcy pour des écoulements inertiels. Des extensions comme la loi de Forchheimer ont été proposées mais elles ne s'appuient pas sur la théorie de l'homogénéisation [121, 122]. Récemment, un cadre théorique appelé Principe Multi-échelle des Puissances Virtuelles (PMPV) a été proposé pour les écoulements stationnaires avec obstacles et inertie [123]. Les équations gouvernantes à la petite échelle étaient les équations de Navier-Stokes à l'état stationnaire mais avec le terme d'auto-advection. Par conséquent, il était nécessaire de résoudre un problème non linéaire à la petite échelle, et de même pour la grande échelle. Néanmoins, une implémentation concurrente avec couplage complet entre les deux échelles n'a pas été développée. Cette simplification n'était possible qu'en raison de la stationnarité des écoulements modélisés.

Un travail en lien avec l'industrie autour de la simulation concurrente de la rupture de structures composites est présenté en Section 4.1. Une approche EF×MOR est notamment développée afin d'accélérer les simulations multi-échelles. Une attention particulière est accordée à la validation du modèle en s'appuyant sur des essais expérimentaux.

Des contributions plus fondamentales autour de la modélisation multi-échelle des écoulements non stationnaires dans des domaines contenant de petits obstacles sont présentées en Section 4.2. L'implémentation EF² avec couplage complet est présentée et comparée avec une approche directe où l'hétérogénéité est directement discrétisée à l'échelle du domaine.

4.1 Rupture

Cette Section repose essentiellement sur des travaux publiés dans la Référence [12].

Comme présenté dans la Section 3.1, l'Analyse Partitionnée Auto-cohérente (APA) a été proposée en 2016 [96] et a très vite fait l'objet de nombreux développements. Parmi ceux-ci, il y a l'extension aux déformations finies, aux déformations plastiques localisées et à la modélisation de l'endommagement ductile. Un autre axe de recherche important a été l'intégration de l'APA dans une approche d'homogénéisation concurrente [124], et en particulier dans le cadre d'une collaboration avec la Ford Motor Company.

Dans ce projet, divers matériaux polymères composites ont été évalués dans l'objectif de remplacer une pièce d'automobile structurelle auparavant en acier. Il s'agissait de caractériser et de modéliser. La caractérisation concernait à la fois les constituants (fibres en carbone et matrice époxy) et les composites qui pouvaient être à fibres courtes, à fibres longues unidirectionnelles stratifiées, ou encore à fibres longues tissées. Les travaux présentés dans la suite concernent le composite à matrice époxy et à fibres longues unidirectionnelles stratifiées, et ont été publiés dans la Référence [12]. La méthodologie est la suivante :

- Le comportement et les propriétés mécaniques de la matrice ont été caractérisés avec des essais utilisant des éprouvettes purement constituées d'époxy. Pour les fibres, nous nous basons sur les données fournies par le fabricant.
- La microstructure du composite est analysée afin de générer un VER.
- La méthode des EFs est utilisée pour générer des données en appliquant six chargements orthogonaux d'amplitude assez faible pour rester dans le régime élastique.
- Les données générées sont utilisées pour mettre en œuvre l'APA.
- L'APA est intégrée dans une approche d'homogénéisation concurrente. Elle fournit la réponse macroscopique du matériau à chaque point d'intégration d'un maillage EFs d'une structure.

L'objectif est d'évaluer la fiabilité de cette méthodologie en comparaison avec des essais expérimentaux inédits, *i.e.*, non utilisés pour établir le modèle multi-échelle.

Le matériau et le modèle utilisé pour le VER sont brièvement présentés dans la Sous-section 4.1.1, ainsi que la méthode multi-échelle intégrant l'APA. Un des résultats obtenus est présenté dans la Sous-section 4.1.2.

4.1.1 Méthode

Le modèle multi-échelle est décrit dans la suite pour l'exemple de la Figure 4.1, qui est une éprouvette de tension avec toutes les fibres orientées à 10° par rapport à la direction de tension.

La structure de la Figure 4.1 est composée de couches de composite unidirectionnel. Il est tout à fait possible de faire varier l'orientation des fibres dans l'épaisseur. Chaque couche est discrétisée avec des éléments coque épais 3D permettant d'étirer les éléments jusqu'à un ratio d'aspect de dix sans détériorer significativement les prédictions. Il n'y a qu'un élément dans l'épaisseur pour chaque couche. Une intégration réduite est utilisée pour ces éléments, avec seulement deux points d'intégration dans l'épaisseur. À chaque point d'intégration est attaché un VER 3D qui contient 93 fibres discrétisées avec $600 \times 600 \times 100$ voxels. Ce VER a une dimension assez faible dans la direction des fibres car il y a des conditions de périodicité et les

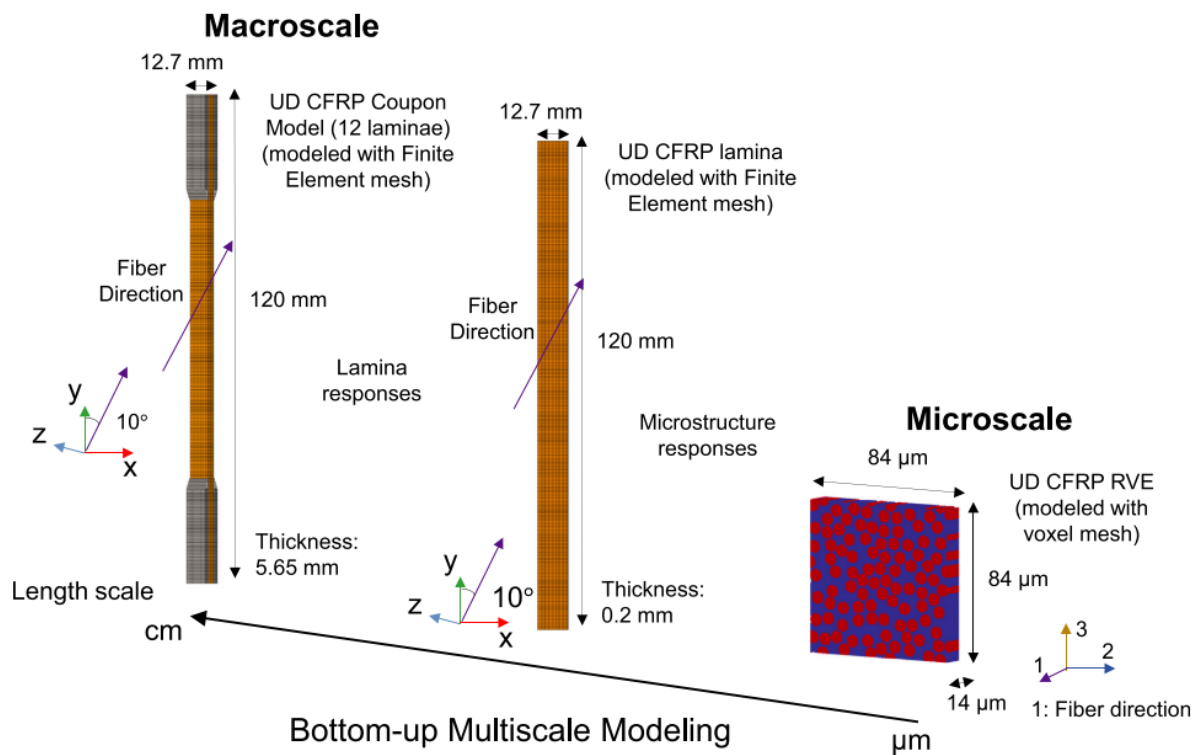


FIGURE 4.1 – Illustration des différentes échelles du modèle. De gauche à droite, la structure est composée de 12 couches d’une épaisseur d’environ 0.2 mm, chacune étant composée d’une matrice et de fibres de section circulaire d’un diamètre de 7 μm. Image(s) issue(s) de la Référence [12].

fibres sont supposées droites. La fraction volumique de fibre est proche de 50%.

L'algorithme de simulation concurrente EF×APA est fondé sur un échange d'informations entre la grande échelle de la structure et la petite échelle du VER. Pour ce dernier, le problème à résoudre n'est autre que le problème d'équilibre introduit dans la Section 2.1. Il est résolu avec l'APA en suivant la procédure détaillée dans la Section 3.1, à la différence près que nous nous plaçons dans cette partie sous l'hypothèse de petites déformations. Le comportement des fibres est supposé élastique linéaire transversalement isotrope, avec une rupture fragile dans la direction longitudinale basée sur une résistance à la compression différente de la résistance à la tension. Le comportement de la matrice est modélisé avec une loi élasto-plastique intégrant un modèle d'endommagement et un critère de plasticité où la courbe d'écrouissage est différente en tension et en compression [125]. Les détails sur les lois de comportement et les propriétés matériaux peuvent être trouvés dans la Référence [12].

Dans une phase de préparation, nous lançons six simulations avec la méthode des EFs au niveau du VER où nous résolvons le problème d'équilibre de l'Équation (2.1) mais avec des amplitudes de déformation appliquée assez faibles pour rester dans le domaine élastique. Nous utilisons les résultats de ces simulations pour le partitionnement par K-moyennes et nous pré-calculons les deux parties du tenseur d'interaction pour l'Algorithme 3.3. Nous préparons également le modèle EF de la structure avec les éléments coques épais 3D.

Dans la phase de prédiction, bien que le problème soit statique, nous utilisons un schéma explicite pour la grande échelle, avec une augmentation artificielle et automatique de la masse afin de limiter le nombre de pas de temps. Cela nécessite par ailleurs de contrôler pour tous les résultats que l'énergie cinétique reste négligeable.

À chaque incrément de temps de la résolution explicite, il faut calculer la contrainte macroscopique $\sigma^M(\boldsymbol{x})$ à chaque point d'intégration \boldsymbol{x} de chaque élément coque de la structure, et ce à partir d'une déformation macroscopique $\varepsilon^M(\boldsymbol{x})$ qui est connue. L'avantage du schéma explicite, c'est que le calcul de la matrice tangente n'est pas nécessaire au niveau macroscopique. Pour le calcul de la contrainte macroscopique $\sigma^M(\boldsymbol{x})$, nous utilisons la version petites déformations de l'Algorithme 3.3, où sont intégrés le critère de rupture des fibres et la loi d'élasto-plasticité avec endommagement de la matrice.

L'endommagement n'est pas modélisé à l'échelle microscopique au niveau des partitions à l'intérieur des VERs, mais plutôt à l'échelle macroscopique. Une variable d'endommagement macroscopique est introduite pour adoucir la réponse mécanique calculée pour chaque VER, et est régularisée avec un modèle d'endommagement non-local intégral. Cela a l'avantage d'éviter à la fois la dépendance vis-à-vis de la discrétisation à l'intérieur du VER, et au niveau de la structure. L'inconvénient est que les phénomènes locaux comme la décohésion ou l'initiation et la propagation de fissures à l'intérieur du VER ne sont pas réellement modélisés et nous ne pouvons donc pas avoir de prédiction de l'évolution de la microstructure. Les détails sur cette modélisation régularisée de l'endommagement peuvent être trouvés dans la Référence [124].

Une première analyse à l'échelle du VER nous a permis de conclure que seulement 2 partitions dans les fibres et 8 dans la matrice suffisent à prédire la réponse macroscopique de manière assez fiable [12], et ce pour des déformations macroscopiques allant jusqu'à 2%. Ce partitionnement est montré dans la Figure 4.2.

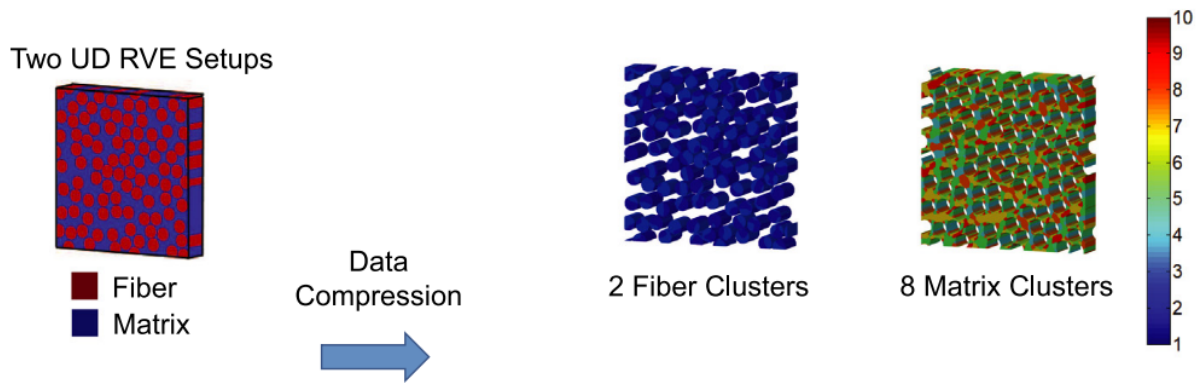


FIGURE 4.2 – Partitionnement par K-moyennes du VER à partir des données calculées pour six chargements orthogonaux. Image(s) issue(s) de la Référence [12].

4.1.2 Résultats

Dans cette partie, l'approche EF×APA est validée par rapport à un essai expérimental de tension avec les fibres orientées à 10° par rapport à la direction de tension. Les détails sur cet essai et la fabrication du coupon peuvent être trouvés dans la Référence [12]. La comparaison en termes de réponse contrainte-déformation est présentée dans la Figure 4.3. Nous observons une légère sous-estimation de la rigidité du matériau dans la partie élastique, qui peut être due à l'absence d'interphase dans le modèle de VER. L'approche concurrente donne néanmoins des résultats très précis avec une erreur de 2.32% pour la contrainte maximale.

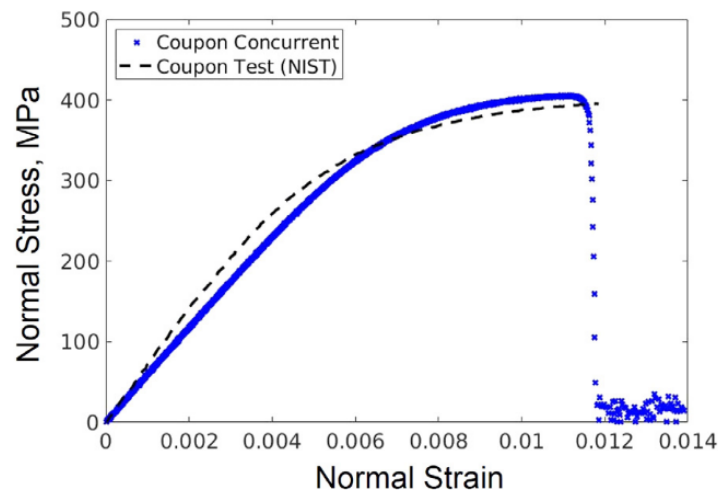


FIGURE 4.3 – Courbe contrainte-déformation expérimentale (Coupon Test) et numérique (Coupon Concurrent) pour l'essai de tension avec les fibres orientées à 10° . Image(s) issue(s) de la Référence [12].

Pour cet essai, nous disposons aussi de mesures des champs de déplacement et de déformation par corrélation d'images. La comparaison entre simulation et expérience pour ces champs est présentée dans la Figure 4.4. Nous observons une bande de cisaillement le long de la direction des fibres. L'approche EF×APA prédit assez bien la largeur de la bande, avec une erreur de 3.95%, mais il y a un décalage qui peut être dû à une variation de la microstructure dans la réalité.

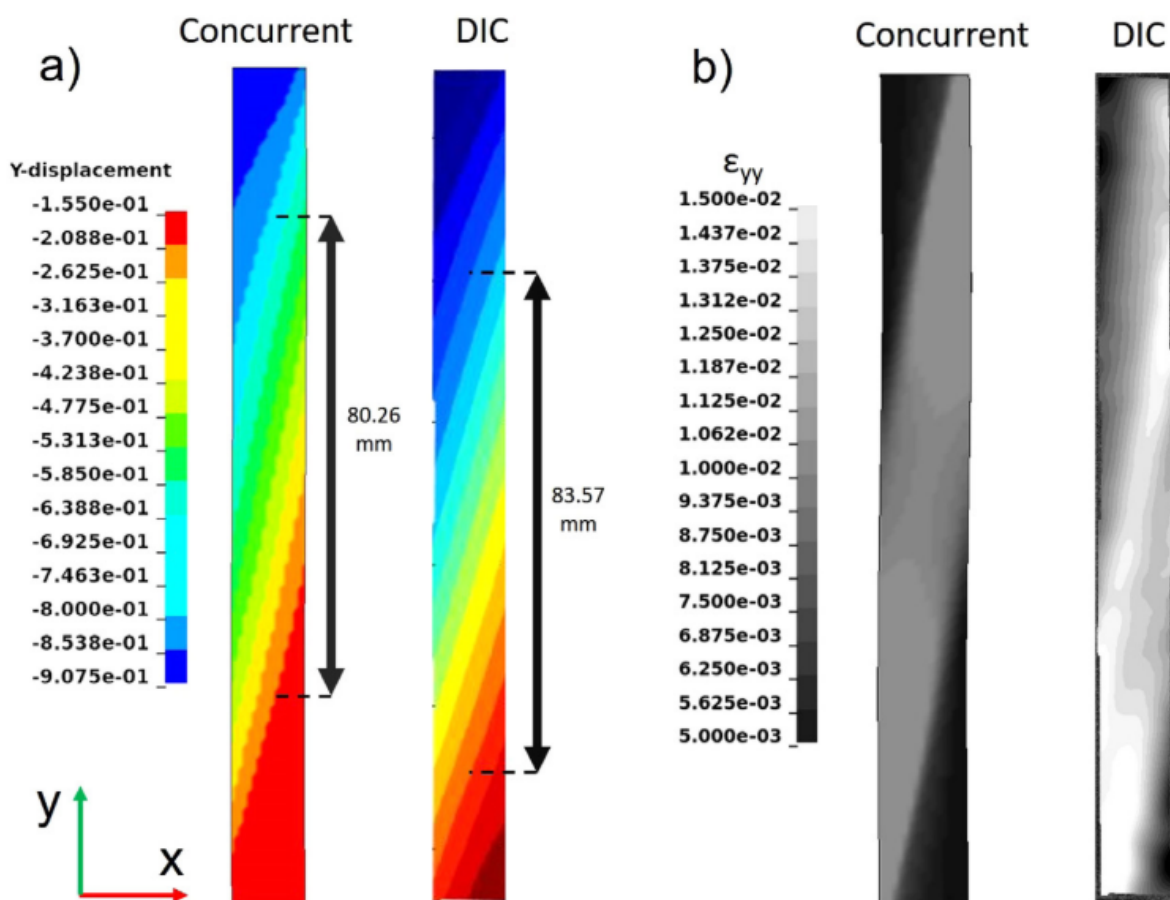


FIGURE 4.4 – Champs de (a) déplacement et (b) déformation dans la direction verticale avec comparaison entre la mesure expérimentale par corrélation d’images (DIC) et la simulation numérique (Concurrent). Image(s) issue(s) de la Référence [12].

Cette variation de la microstructure pourrait également expliquer la différence dans la position de la fissure macroscopique finale, qui est montrée dans la Figure 4.5. La direction de la fissure est toutefois correctement prédite par la simulation. Cela montre que l’échange d’informations entre la structure modélisée par la méthode des EFs et les VÉRs modélisés par l’APA permet de prédire de manière assez fiable l’influence de la microstructure sur la réponse macroscopique.

Pour finir, cette simulation a pris 540 h avec l’approche EF×APA. Nous estimons en nous basant sur les calculs de VÉRs effectués avec la méthode des EFs dans la phase de génération de données pour l’APA que le même calcul aurait pris plus de 5000 fois plus de temps avec une approche EF².

Des résultats pour un essai dynamique de flexion à trois points avec comparaison avec l’expérimental peuvent être trouvés dans la Référence [12]. D’autres essais ont aussi été simulés dans le cadre du projet avec la Ford Motor Company, de même que d’autres matériaux comme les composites tissés à fibres longues.

L’application aux étapes de fabrication a également été considérée, notamment en ce qui concerne la découpe de structures composites [22]. Des simulations d’endommagement ductile avec croissance de porosités ont aussi été conduites [25].

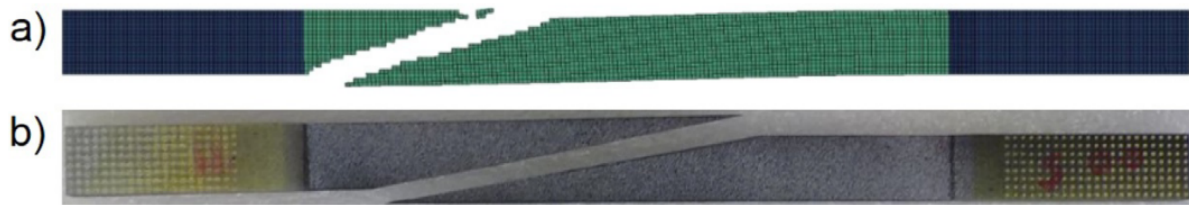


FIGURE 4.5 – Fissure macroscopique finale pour (a) la simulation et (b) l’expérience. Image(s) issue(s) de la Référence [12].

Ces différentes applications de l’approche EF×APA ont montré qu’elle permet de réduire les temps de calcul par plusieurs ordres de grandeurs par rapport à une approche EF². L’APA exploite intelligemment la redondance des calculs qui reposent en effet tous sur la même géométrie soumise localement à différentes conditions de chargement. L’intégration intrinsèque des conditions aux limites périodiques dans l’APA est également un avantage pour l’homogénéisation concurrente. Les limites de l’APA en ce qui concerne les champs locaux peuvent toutefois être problématiques pour les applications aux procédés de fabrication. En effet, il faut pour ces applications prédire l’état final du matériau et des phénomènes locaux par nature comme la formation de porosités.

4.2 Écoulements

Cette Section repose essentiellement sur des travaux publiés dans la Référence [7].

Cette partie présente mes premiers travaux autour de l'homogénéisation pour la mécanique des fluides. La première étape est d'étendre la méthodologie présentée dans la Référence [123] aux écoulements non-stationnaires, et ce afin de modéliser des écoulements dans des domaines contenant un grand nombre de petits obstacles. Ce problème étant non linéaire à cause du terme d'auto-advection des équations de Navier-Stokes, l'approche développée est de type EF² et couple complètement le problème de la grande échelle aux problèmes de la petite échelle pendant toute la simulation. Autrement dit, il n'est pas possible de pré-calculer un tenseur de perméabilité ou toute autre quantité qui permettrait d'éviter la résolution systématique des problèmes à la petite échelle.

Le modèle multi-échelle est présenté dans la Sous-section 4.2.1 et son implémentation numérique dans la Sous-section 4.2.2. Un exemple de résultat est présenté dans la Sous-section 4.2.3. Ces travaux ont été publiés dans la Référence [7].

4.2.1 Modèle multi-échelle

Le domaine de calcul est noté $\Omega^M \subset \mathbb{R}^d$, avec des conditions aux limites de Dirichlet \mathbf{v}_D^M sur Γ_D^M et des conditions aux limites de Neumann \mathbf{t}_N^M sur Γ_N^M . Concernant le temps, il est défini comme $t \in [0, T]$, avec $T \in \mathbb{R}^{+*}$. Le problème variationnel à résoudre pour la grande échelle est de trouver $\mathbf{v}^M(., t) \in \mathcal{V}^M(t)$, $p^M \in L^2(\Omega^M)$, tels que

$$\int_{\Omega^M} \left(\mathbf{f}^M(\mathbf{x}, t) \cdot \delta \mathbf{v}^M(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\sigma}^{M,dev}(\mathbf{x}, t) : \nabla_{\mathbf{x}} \delta \mathbf{v}^M(\mathbf{x}) \right) d\mathbf{x} - \int_{\Omega^M} \left(-p^M(\mathbf{x}) \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \delta \mathbf{v}^M(\mathbf{x}) - \delta p^M(\mathbf{x}) \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{v}^M(\mathbf{x}) \right) d\mathbf{x} = \int_{\Gamma_N^M} \mathbf{t}_N^M(\mathbf{x}, t) \cdot \delta \mathbf{v}^M(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \quad (4.1)$$

$$\begin{aligned} \forall \delta \mathbf{v}^M &\in \mathcal{V}^M(t), \\ \forall \delta p^M &\in L^2(\Omega^M), \end{aligned}$$

avec les espaces fonctionnels

$$\mathcal{V}^M(t) = \left\{ \mathbf{w} \in \left(H^1(\Omega^M) \right)^d, \mathbf{w}(\mathbf{x}) = \mathbf{v}_D^M(\mathbf{x}, t), \forall (\mathbf{x}, t) \in \Gamma_D^M \times [0, T] \right\},$$

$$H^1(\Omega^M) = \left\{ w \in L^2(\Omega^M), \nabla_{\mathbf{x}} w \in \left(L^2(\Omega^M) \right)^d \right\},$$

$$L^2(\Omega^M) = \left\{ w : \Omega^M \mapsto \mathbb{R}, \int_{\Omega^M} w(\mathbf{x})^2 d\mathbf{x} < +\infty \right\}.$$

Cette formulation est classique et assez simple à comprendre s'il s'agit de modéliser l'écoulement incompressible et Newtonien directement à la grande échelle. Les équations de Navier-Stokes donnent alors

$$\begin{cases} \mathbf{f}^M(\mathbf{x}, t) = \rho^M(\mathbf{x}) \left(\frac{\partial \mathbf{v}^M}{\partial t}(\mathbf{x}, t) + \mathbf{v}^M(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{v}^M(\mathbf{x}, t) \right), & \forall \mathbf{x} \in \Omega^M, \forall t \in [0, T], \\ \boldsymbol{\sigma}^{M,dev}(\mathbf{x}, t) = 2\mu^M(\mathbf{x}) \nabla_{\mathbf{x}}^{S,dev} \mathbf{v}^M(\mathbf{x}, t), \end{cases}$$

où le déviateur est

$$\nabla^{S,dev} \mathbf{v}^M = \nabla^S \mathbf{v}^M - \frac{1}{d} \text{tr}(\nabla^S \mathbf{v}^M) \mathbf{I},$$

et la partie symétrique

$$\nabla^S \mathbf{v}^M = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{v}^M + \nabla^T \mathbf{v}^M).$$

Le problème avec cette approche directe est que le coût de calcul devient immense s'il y a des obstacles d'une petite taille par rapport à Ω^M car la taille d'élément doit être inférieure à la taille des obstacles. L'alternative proposée est une approche multi-échelle, où $\mathbf{f}^M(\mathbf{x}, t)$ et $\boldsymbol{\sigma}^{M,dev}(\mathbf{x}, t)$ sont des fonctions inconnues de $\mathbf{v}^M(\mathbf{x}, t)$ et $\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{v}^M(\mathbf{x}, t)$, tandis que p^M reste un multiplicateur de Lagrange.

Par conséquent, un domaine de petite échelle $\Omega^m = \Omega^m(\mathbf{x}) \subset \mathbb{R}^d$ est introduit à chaque point \mathbf{x} du grand domaine. Les petits obstacles sont représentés dans ces petits domaines au lieu du grand domaine. Le bord des obstacles est noté $\Gamma_o^m = \Gamma_o^m(\mathbf{x}) \subset \partial\Omega^m(\mathbf{x})$, et les conditions aux limites de Dirichlet 0 sont imposées sur Γ_o^m . L'approche multi-échelle proposée est cinématique, ce qui veut dire que des contraintes de transition d'échelle sont imposées sur le champ de vitesse, tandis que les expressions de $\mathbf{f}^M(\mathbf{x}, t)$ et $\boldsymbol{\sigma}^{M,dev}(\mathbf{x}, t)$ sont dérivées à partir d'un PMPV [126].

Après différentes étapes détaillées dans la Référence [7], il est possible de démontrer que le problème à résoudre pour chaque domaine de la petite échelle est de trouver $(\mathbf{v}^m(\cdot, t), p^m, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) \in \mathcal{V}^m \times L^2(\Omega^m) \times \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^{d \times d}$, avec $(\mathbf{v}^m(\cdot, t), p^m) \in \mathcal{V}^m(t) \times L^2(\Omega^m)$ tels que

$$\begin{aligned} \frac{1}{|\Omega^m|} \int_{\Omega^m} & \left[\rho^m(\mathbf{y}) \left(\frac{\partial \mathbf{v}^m}{\partial t}(\mathbf{y}, t) + \mathbf{v}^m(\mathbf{y}, t) \cdot \nabla_{\mathbf{y}} \mathbf{v}^m(\mathbf{y}, t) \right) \cdot \delta \mathbf{v}^m(\mathbf{y}) \right. \\ & + 2\mu^m(\mathbf{y}) \nabla_{\mathbf{y}}^{S,dev} \mathbf{v}^m(\mathbf{y}, t) : \nabla_{\mathbf{y}} \delta \mathbf{v}^m(\mathbf{y}) \\ & \left. - p^m(\mathbf{y}) \nabla_{\mathbf{y}} \cdot \delta \mathbf{v}^m(\mathbf{y}) - \delta p^m(\mathbf{y}) \nabla_{\mathbf{y}} \cdot \mathbf{v}^m(\mathbf{y}, t) \right] d\mathbf{y} \\ & - \delta \boldsymbol{\alpha} \cdot \left(\frac{1}{|\Omega^m|} \int_{\Omega^m} \mathbf{v}^m(\mathbf{y}, t) d\mathbf{y} - \mathbf{v}^M(\mathbf{x}, t) \right) \\ & - \delta \boldsymbol{\beta} : \left(\frac{1}{|\Omega^m|} \int_{\Omega^m} \nabla_{\mathbf{y}} \mathbf{v}^m(\mathbf{y}, t) d\mathbf{y} - \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{v}^M(\mathbf{x}, t) \right) \\ & - \boldsymbol{\alpha} \cdot \left(\frac{1}{|\Omega^m|} \int_{\Omega^m} \delta \mathbf{v}^m(\mathbf{y}) d\mathbf{y} \right) \\ & - \boldsymbol{\beta} : \left(\frac{1}{|\Omega^m|} \int_{\Omega^m} \nabla_{\mathbf{y}} \delta \mathbf{v}^m(\mathbf{y}) d\mathbf{y} \right) = 0, \\ & \forall (\delta \mathbf{v}^m, \delta p^m) \in \mathcal{V}^m \times L^2(\Omega^m), \\ & \forall (\delta \boldsymbol{\alpha}, \delta \boldsymbol{\beta}) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^{d \times d}, \end{aligned} \quad (4.2)$$

avec $\mathcal{V}^m = \left\{ \mathbf{w} \in (H^1(\Omega^m))^d, \mathbf{w}(\mathbf{y}) = \mathbf{0}, \forall \mathbf{y} \in \Gamma_o^m \right\}$. Cette forme variationnelle se prête directement à la résolution par la méthode des EFs. Un premier bloc qui correspond aux équations de Navier-Stokes écrites à la petite échelle avec la condition d'incompressibilité sur le champ de vitesse et sa variation est reconnaissable. Il y a ensuite des contraintes reliant le champ de vitesse et son gradient entre les deux échelles, et de même pour les variations. Ces contraintes sont appliquées avec des multiplicateurs de Lagrange $\boldsymbol{\alpha}$ et $\boldsymbol{\beta}$ pour lesquels il est possible de démontrer que $\mathbf{f}^M = \boldsymbol{\alpha}$ et $\boldsymbol{\sigma}^{M,dev} = \boldsymbol{\beta} + p^M \mathbf{I}$. En outre, la définition de l'espace fonctionnel pour le champ de vitesse à la petite échelle inclut les conditions aux limites aux bords des obstacles.

Pour résumer :

- Le problème de la grande échelle de l'Équation (4.1) est similaire aux équations de Navier-Stokes pour les écoulements non-stationnaires, incompressibles et Newtoniens, à l'exception qu'il inclut une force volumique et un déviateur des contraintes qui sont inconnus.
- Les petits obstacles ne sont pas représentés directement à la grande échelle. Ils sont intégrés dans des domaines de petite échelle qui sont attachés à chaque point du grand domaine.
- Pour chaque petit domaine, le problème de l'Équation (4.2) doit être résolu. Les conditions aux limites pour ce problème proviennent de contraintes reliant le champ de vitesse de la petite échelle et son gradient aux contre-parties de la grande échelle.
- La force volumique et le déviateur des contraintes pour la grande échelle sont calculés à partir de la solution du problème de petite échelle.

4.2.2 Méthode numérique

Le maillage EFs utilisé pour la grande échelle comme la petite est basé sur l'élément P2/P1 de Taylor-Hood. La formulation variationnelle étant mixte, cet élément rajoute l'ingrédient nécessaire pour obtenir des espaces de discrétisation compatibles avec la condition d'incompressibilité. L'utilisation d'une interpolation quadratique pour la vitesse et linéaire pour la pression génère toutefois un surcout non négligeable pour l'intégration numérique, puisqu'il y a six points d'intégration par triangle en 2D, et 16 par tétraèdre en 3D. Cet aspect est d'autant plus important que cela signifie qu'il y a six domaines de petite échelle par élément en 2D, et 16 en 3D, comme illustré dans la Figure 4.6.

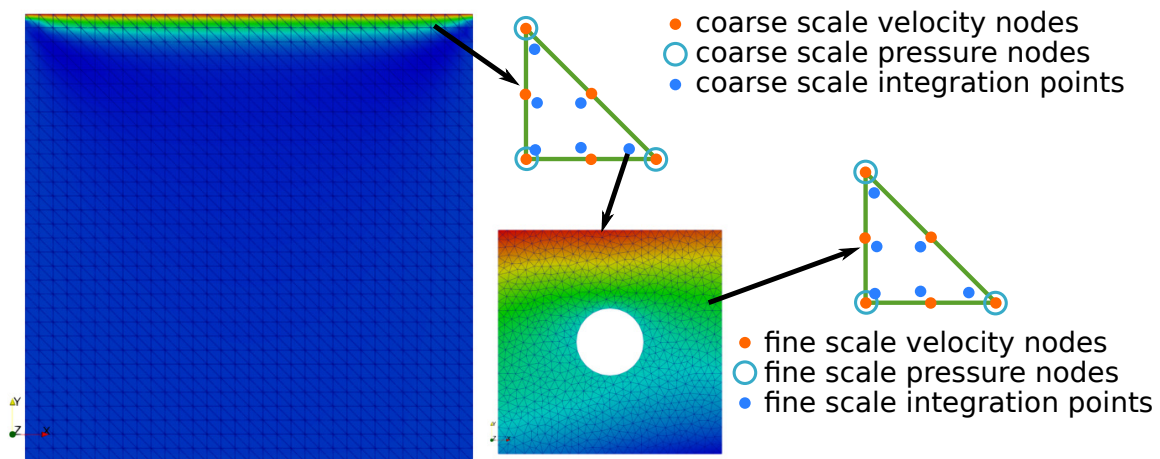


FIGURE 4.6 – Discretisation EF² utilisant l'élément P2/P1 de Taylor-Hood avec une illustration du maillage de la grande échelle, d'un maillage de la petite échelle et d'un des éléments du maillage de la petite échelle. Dans cet exemple, il y a 2, 048 éléments pour la grande échelle, $2, 048 \times 6 = 12, 288$ points d'intégration pour la grande échelle et donc autant de maillages de petit échelle, $12, 288 \times 1, 524 = 18, 726, 912$ éléments de petite échelle et $12, 288 \times 3, 172 \times 2 = 77, 955, 072$ de degrés de libertés en vitesse pour la petite échelle.

Afin d'éviter d'augmenter la complexité de la méthode, aucune stabilisation et aucun modèle de turbulence n'est utilisé. L'algorithme de couplage dans les deux sens pour résoudre simultanément le problème de grande échelle et les problèmes de petite échelle est effectivement déjà assez complexe. À l'instant t^{n+1} cet algorithme consiste à :

1. Initialiser \mathbf{v}_0^M, p_0^M pour la première itération de l'algorithme de Newton-Raphson de la grande échelle à partir des dernières solutions calculées
2. Pour chaque itération de Newton-Raphson de la grande échelle $i \rightarrow i + 1$
 - (a) Pour chaque domaine de la petite échelle
 - i. Initialiser $\mathbf{v}_0^m, p_0^m, \alpha_0, \beta_0$ pour la première itération de l'algorithme de Newton-Raphson de la petite échelle à partir des dernières solutions calculées
 - ii. Pour chaque itération de Newton-Raphson de la petite échelle $j \rightarrow j + 1$
 - A. Linéariser le problème de la petite échelle et assembler et résoudre le système linéaire associé pour l'itération j
 - B. Vérifier la convergence et retourner à 2(a)ii si nécessaire
 - iii. Récupérer la solution $\alpha = \mathbf{f}^M(\mathbf{x}, t^{n+1})$ et $\beta^{dev} = \boldsymbol{\sigma}^{M,dev}(\mathbf{x}, t^{n+1}) - p^M(\mathbf{x})\mathbf{I}$
 - (b) Assembler et résoudre le système linéaire associé à l'itération i de la grande échelle
 - (c) Vérifier la convergence et retourner à 2 si nécessaire
 - (d) Récupérer la solution vitesse-pression pour la grande échelle

En pratique, des procédures avancées de type recherche linéaire ou sous-itération sont souvent nécessaires afin d'améliorer la convergence de cette algorithmes, notamment à la petite échelle. Cet algorithme a été implémenté dans *FEMS* avec une parallélisation en mémoire distribuée. Cela ne requière pas de paralléliser la résolution à la petite échelle, puisque les problèmes de la petite échelle sont automatiquement distribués à partir du moment où le maillage EFs de la grande échelle l'est.

4.2.3 Résultats

Cette approche multi-échelle a été comparée pour deux exemples à une approche mono-échelle où l'hétérogénéité est directement discrétisée dans le même maillage EFs que le domaine dans la Référence [7]. La méthode proposée apparaît plus précise quand le nombre de Reynolds et/ou la taille des obstacles diminuent. Cela est intéressant car cette approche EF² devient plus intéressante d'un point de vue coût de calcul quand la taille des obstacles diminue.

L'exemple montré dans la suite concerne un domaine en L. Il s'agit d'un carré de $1 \times 1 \text{ m}^2$ composé d'une phase claire et d'une phase sombre comme illustré dans la Figure 4.7(a). Il est défini une taille du domaine de petite échelle $l = 1 \text{ mm}$ et un rayon d'obstacle $R = 0.15 \text{ mm}$ dans la phase claire et $l = 1 \text{ mm}$ et $R = 0.39 \text{ mm}$ dans la phase sombre. Par conséquent, la fraction surfacique d'obstacle est de 7.1% dans la phase claire et 48% dans la phase sombre. Le domaine de petite échelle est systématiquement discrétisé avec une taille d'élément de 0.04 mm.

Le maillage adapté de la Figure 4.7(a) contient 3, 081 éléments dans la phase sombre et 3, 149 dans la phase claire. Pour la phase sombre, cela signifie $3, 081 \times 6 = 18, 486$ points d'intégration pour la grande échelle et donc autant de maillages de petite échelle, $18, 486 \times 844 = 15, 602, 184$ éléments de maillage de petite échelle et $18, 486 \times 1, 852 \times 2 = 68, 472, 144$ degrés de libertés en vitesse à la petite échelle. Pour la phase claire, il y a $3, 149 \times 6 = 18, 894$ points d'intégration pour la grande échelle et donc autant de maillages de petite échelle, $18, 894 \times 1, 524 = 28, 794, 456$ éléments de maillage de petite échelle et $18, 894 \times 3, 712 \times 2 = 119, 863, 536$ degrés de libertés en vitesse à la petite échelle. Le total est donc pour la petite échelle de 44, 396, 640 éléments de maillage et de 188, 335, 680 degrés de libertés en vitesse. Il est estimé que pour ce problème le nombre d'éléments dans un modèle mono-échelle avoisinerait

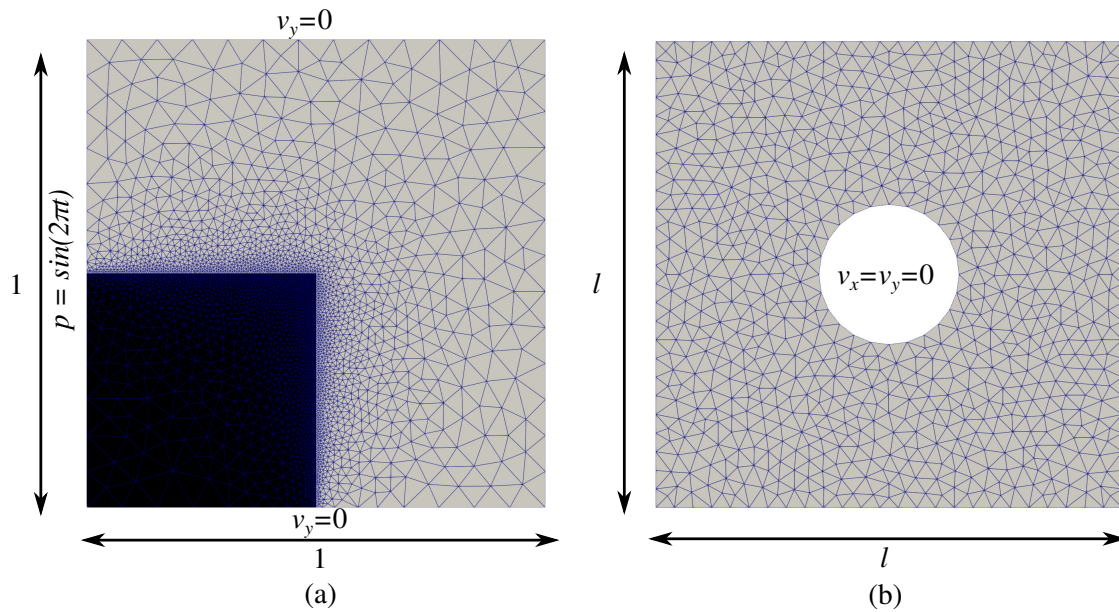


FIGURE 4.7 – Domaine, conditions aux limites et maillages pour le problème d’écoulement avec obstacles : (a) domaine de grande échelle, (b) domaine de petite échelle avec un obstacle. Les longueurs sont en mètres, les vitesses en mètres par seconde et les pressions en Pa.

$\frac{844 \times 1 + 1,524 \times 3}{4} \times 1,000 \times 1,000 \approx 10^9$ et que le nombre de degrés de liberté en vitesse serait du même ordre. Il y a donc une réduction par un facteur d’au moins 10 de la complexité de calcul avec la méthode multi-échelle.

Le vecteur de traction est défini comme $t_N^M(x, t) = (\sin(2\pi t), 0)$ afin d’obtenir une pression fluctuante au bord gauche, tandis que les bords haut et bas sont définis comme des murs impénétrables. La masse volumique du fluide est de 1 kg m^{-3} , la gravité est négligée et la viscosité dynamique du fluide est de $1 \mu\text{Pa s}$. Le problème est résolu avec un pas de temps de $\Delta t = 0.03 \text{ s}$ pour 100 incréments de temps.

Les résultats sont montrés dans la Figure 4.8 pour le champ de vitesse dans la direction horizontale. Une transition très prononcée est observable entre les deux phases à la grande échelle.

Des résultats à différentes positions pour la petite échelle à $t = 2.40 \text{ s}$ sont montrés dans la Figure 4.9. La comparaison avec la Figure 4.8(d) montre que les différentes orientations de l’écoulement sont correctement transférées de la grande échelle vers la petite. Comme montré dans la Figure 4.9(c), dans la couche limite du côté de la phase claire, de très grandes vitesses sont observables aux deux échelles. Cela démontre les capacités de la méthode multi-échelle à prédire l’écoulement simultanément aux deux échelles.

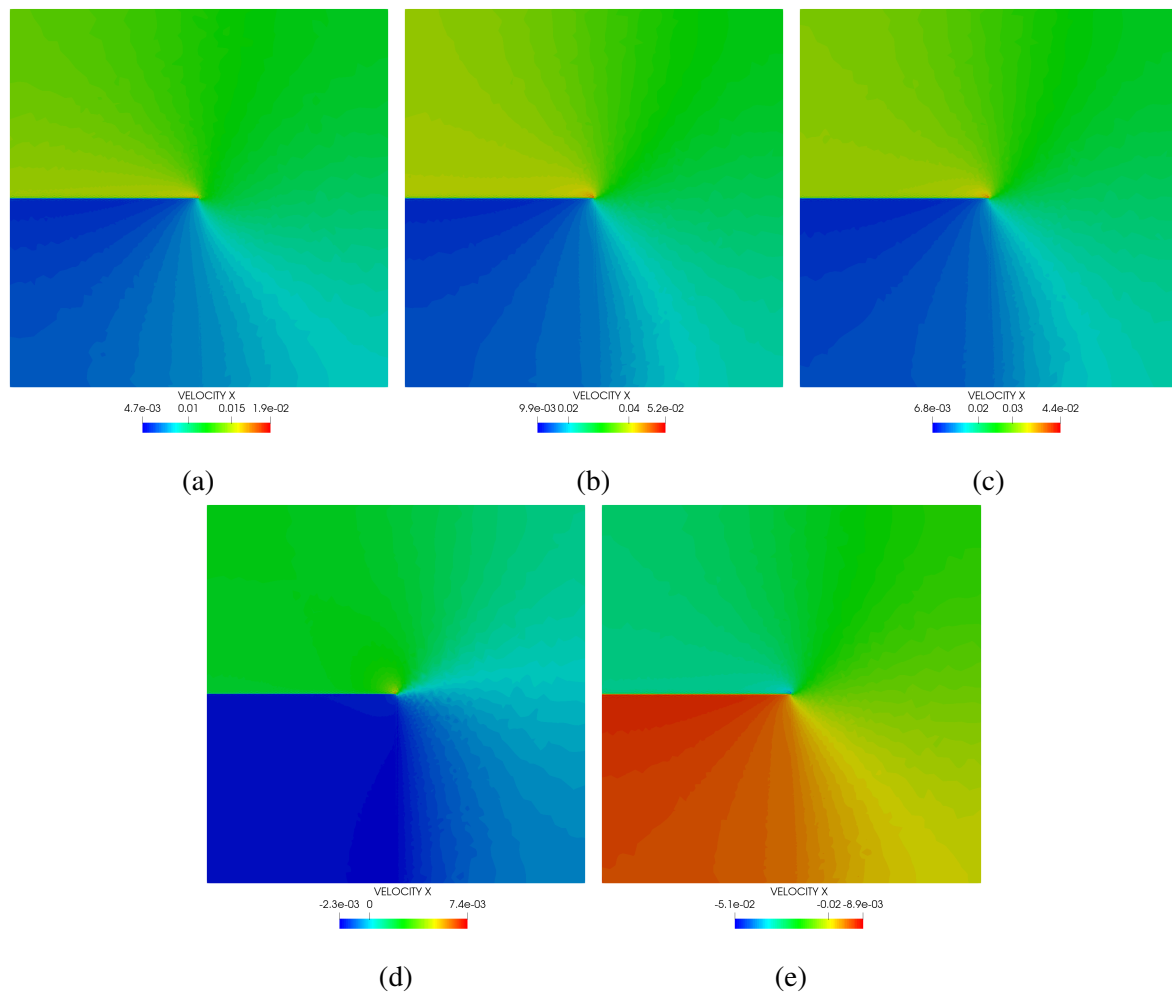


FIGURE 4.8 – Évolution du champ de vitesse v_x (m s^{-1}) à : (a) $t = 2.10$ s, (b) $t = 2.25$ s, (c) $t = 2.40$ s, (d) $t = 2.55$ s, (e) $t = 2.70$ s.

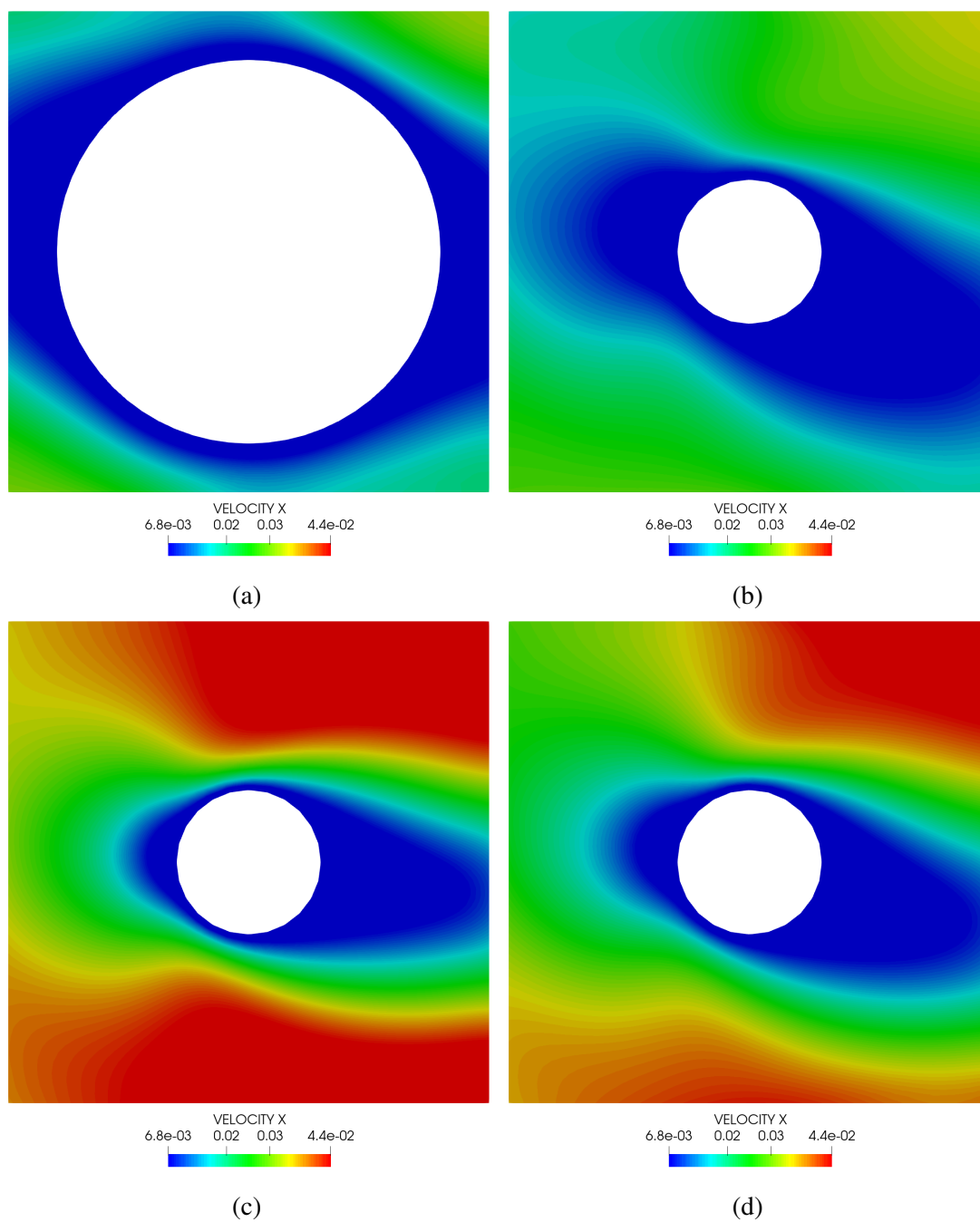


FIGURE 4.9 – Champ de vitesse v_x (m s^{-1}) à $t = 2.40$ s pour le domaine de petite échelle situé à : (a) $x = 0.45$ m, $y = 0.45$ m, (b) $x = 0.55$ m, $y = 0.45$ m, (c) $x = 0.45$ m, $y = 0.55$ m, (d) $x = 0.55$ m, $y = 0.55$ m.

Conclusion

Des contributions à la modélisation multi-échelle ont été présentées dans ce chapitre pour les problèmes liés aux écoulements avec obstacles et à la mécanique de la rupture des chapitres 1 et 2. Dans les deux cas, le phénomène physique étudié étant fortement non linéaire et transitoire, une approche d'homogénéisation concurrente de type EF^2 a été développée. L'échelle du domaine de calcul est ainsi séparée de l'échelle de l'hétérogénéité, ce qui permet de discrétiser l'hétérogénéité dans un domaine fictif. La discrétisation de l'hétérogénéité directement à l'échelle du domaine s'avère, en effet, impensable par exemple pour des structures composites ou des moules d'injection contenant des millions de fibres.

Pour la mécanique de la rupture, l'approche proposée est l' $EF \times APA$. Elle intègre en effet l'APA présentée dans la Section 3.1. Cette méthode a été étendue à la modélisation du comportement d'un matériau composite à fibres longues unidirectionnelles stratifiées avec une matrice élasto-plastique et des critères d'endommagement dans la matrice et dans les fibres. Cet endommagement est régularisé à la petite échelle comme à la grande échelle pour éviter la dépendance au maillage. La comparaison avec des résultats expérimentaux démontre les capacités prédictives de la méthode à l'échelle macroscopique, tant au niveau global que local. À l'échelle microscopique, l'APA a l'inconvénient de ne pas permettre de prédire la microstructure finale du matériau. Elle reste toutefois très avantageuse en ce qui concerne la complexité de calcul, avec un facteur de réduction estimé à plus de 5000 par rapport à une approche EF^2 .

Pour la mécanique des fluides, le cas non linéaire et non-stationnaire a très peu été étudié dans la littérature, notamment en ce qui concerne les approches de type EF^2 . La première étape a donc été de développer un PMPV permettant de relier la grande échelle du domaine à la petite échelle des obstacles. L'implémentation EF^2 avec des espaces de discrétisation compatibles avec la condition d'incompressibilité a ensuite été décrite. La robustesse de cette implémentation a été démontrée pour des domaines contenant 1,000,000 d'obstacles. Il est estimé que la complexité de calcul par rapport à une approche mono-échelle est réduite d'un facteur d'au moins 10. Ce facteur augmente d'autant plus que la taille des obstacles diminue.

Conclusions et perspectives

En quatre chapitres, j'ai résumé dans ce manuscrit mes activités de recherche autour de la modélisation numérique des phénomènes mécaniques non linéaires dans les matériaux et domaines hétérogènes. L'application qui est revenue plusieurs fois est la fabrication et la tenue en service de structures composites à fibres longues qui peuvent faire plusieurs mètres tout en contenant des fibres d'un diamètre de quelques micromètres. L'ambition et l'objectif de mes travaux de recherche est d'aller vers des modèles plus prédictifs prenant en compte des phénomènes fortement non linéaires et des échelles très fines.

Jusque là, je me suis intéressé en ce qui concerne la fabrication aux écoulements monophasés comme biphasés et stationnaires comme non stationnaires. Pour la tenue en service, j'ai travaillé principalement sur la rupture en statique.

Pour les divers phénomènes modélisés, mes contributions se concentrent principalement sur les méthodes numériques. Ainsi, les interfaces ont été discrétisées et modélisées avec des méthodes numériques avancées, et ce qu'il s'agisse d'une interface liquide/gaz dans un écoulement ou d'une fissure. Ces méthodes ont pu reposer sur une génération et adaptation du maillage Éléments Finis (EFs), des Fonctions De Niveau (FDNs) ou un champ de phase. La méthode numérique basée sur la Transformée de Fourier Rapide (TFR) a également été abordée afin d'éliminer la problématique du maillage.

L'accélération des calculs s'est avérée incontournable, d'abord par la parallélisation puis par la réduction de modèle. Mes travaux sur les Modèles d'Ordre Réduit (MORs) montrent notamment qu'il est possible d'exploiter la redondance partielle de certaines simulations afin de réduire leur coût par plusieurs ordres de grandeur. Cela est d'autant plus intéressant dans une méthodologie multi-échelle de type EF².

Les principales contributions qui ont été résumées dans ce manuscrit sont :

- Une méthode permettant de générer un maillage EFs avec une discrétisation explicite des interfaces directement à partir de FDNs, et donc également à partir d'images.
- Une méthode des FDNs avec interpolation EFs quadratique et adaptation de maillage anisotrope afin de modéliser des écoulements biphasés. Un modèle de tension de surface équilibré grâce à une stabilisation Variationnelle Multi-Échelle Basée sur les Résidus (VMEBR). Une étude sur le choix entre couplage fort et faible et approche Eulérienne ou Lagrangienne pour la modélisation des écoulements biphasés en fonction du nombre capillaire.
- Une analyse des oscillations parasites présentes dans les solutions calculées par la méthode numérique basée sur la TFR, ainsi que de leurs causes. Une méthode des voxels composites alternative basée sur les FDNs afin de faciliter la mise en œuvre pour des géométries issues d'images.
- La mise en évidence d'une diffusion anormale du champ de phase dans des matériaux hétérogènes dans une implémentation avec la méthode numérique basée sur la TFR issue de

travaux antérieurs, et l'élimination de cette diffusion avec une approche revisitée. L'étude et l'implémentation d'un modèle de champ de phase alternatif avec la méthode numérique basée sur la TFR afin d'éliminer la dépendance des prédictions vis-à-vis de la longueur de régularisation.

- L'extension d'une approche de réduction de modèle, l'Analyse Partitionnée Auto-cohérente (APA) à divers types de comportements et notamment aux déformations finies.
- Le développement d'un MOR reposant sur un autoencodeur pour une compression non linéaire et un Réseau de Neurones Artificiel (RNA) pour le calcul de prédictions.
- Le déploiement d'une approche multi-échelle de type EFXMOR reposant sur l'APA pour modéliser la rupture d'une structure composite, et la comparaison des prédictions avec des résultats expérimentaux.
- Le développement d'une méthode multi-échelle pour modéliser des écoulements inertiels dans des milieux hétérogènes contenant par exemple un grand nombre de petits obstacles. La validation de cette méthode et de son implémentation EF² en s'appuyant sur des résultats obtenus avec une méthode mono-échelle.

Ce manuscrit, je l'espère, synthétise assez fidèlement mes travaux de recherche et permet probablement aussi de deviner les pistes que je vais explorer à l'avenir. Pour mieux comprendre mon projet de recherche, il faut se concentrer sur mes résultats les plus récents, qui sont la modélisation haute-fidélité des écoulements biphasés et de la rupture, la modélisation multi-échelle des écoulements monophasés et la réduction de modèle pour la rupture. Ces travaux sont représentés dans la partie supérieure de la Figure 4.10. Ce schéma permet de bien identifier les verrous à lever. Ceux-ci sont développés dans la suite selon trois axes :

- Le premier concerne la modélisation des écoulements en vue d'une application aux procédés de mise en œuvre des composites.
- Le second concerne la modélisation de la rupture des structures composites.
- Le troisième axe, non présenté dans ce manuscrit, concerne le jumeau numérique et s'est développé en lien avec mes activités sur l'apprentissage profond.

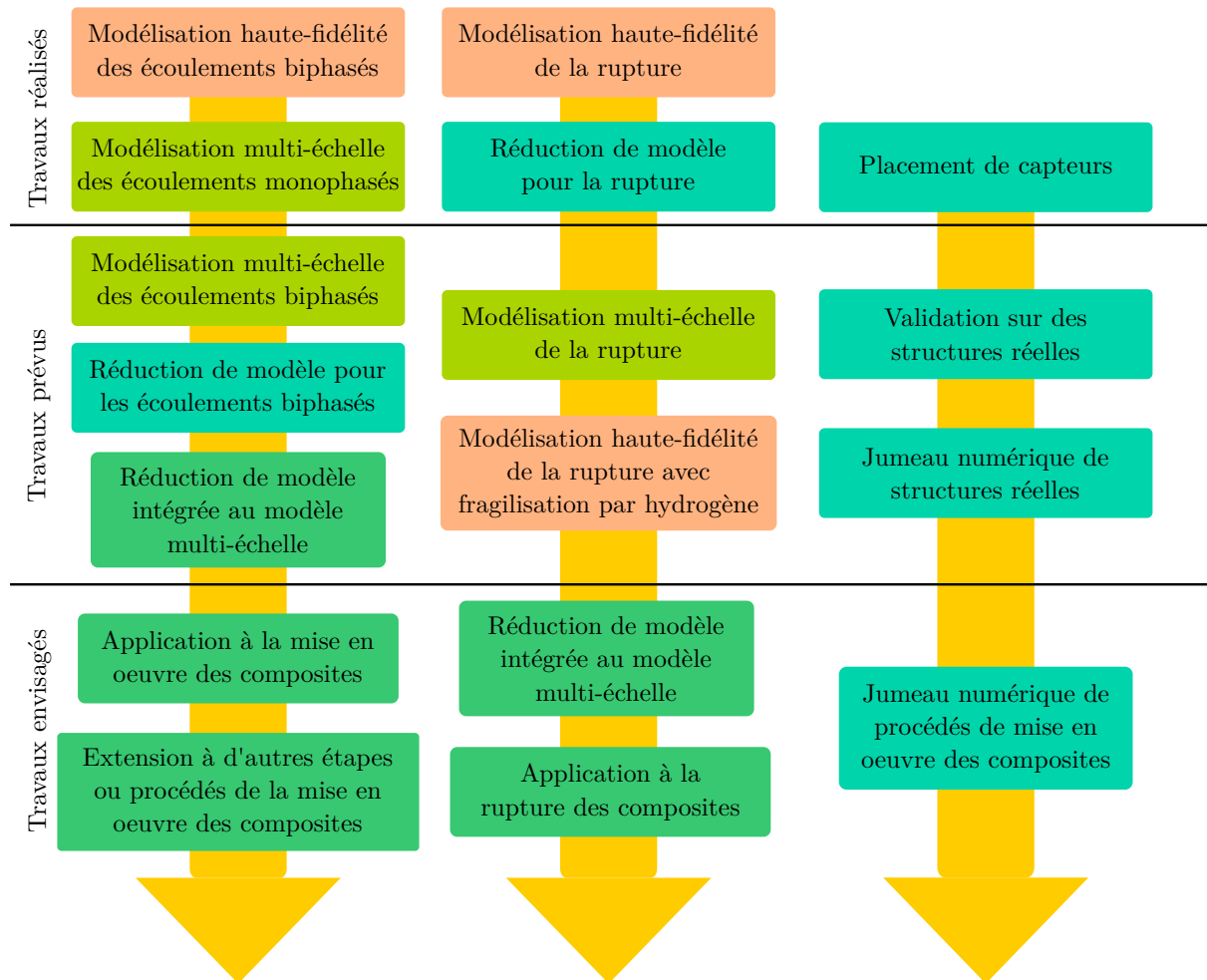


FIGURE 4.10 – Schéma résumant mon projet de recherche.

Écoulements

Dans les années à venir, mon activité de recherche va certainement être majoritairement consacrée au projet ANR JCJC MISSA, puisqu'il s'agit d'un projet de jeune chercheur dont je suis le coordinateur. Il va démarrer début 2023 avec une thèse de doctorat autour de la modélisation multi-échelle des écoulements biphasés. Dans la continuation directe des travaux présentés dans la Section 4.2, l'objectif de la thèse sera d'insérer une variable supplémentaire au Principe Multi-échelle des Puissances Virtuelles (PMPV) afin de représenter l'interface liquide/gaz et de prédire son évolution simultanément aux deux échelles. L'ambition est de prédire la formation de porosités de petite taille dans des procédés de fabrication comme le moulage par transfert de résine ou la fabrication additive.

Pour satisfaire cette ambition, le projet inclut le recrutement d'un post-doctorant pour travailler sur le développement d'un MOR. La technologie des autoencodeurs sera exploitée de nouveau. Les défauts constatés au regard de la prise en compte de l'historique dans le MOR devront être corrigés dans ce post-doctorat. Ce post-doctorant sera co-encadré avec les mêmes collègues du CERI Systèmes Numériques de l'IMT Nord Europe que le post-doctorant précédent, ce qui me permettra de faire progresser cette thématique de recherche à l'interface entre les deux CERIs.

Le MOR sera ensuite intégré dans le modèle multi-échelle afin de réduire les temps de calcul et pouvoir simuler des cas aussi proches que possible des procédés industriels. Les procédés comme le moulage par transfert de résine seront traités en collaboration avec Chung-Hae PARK du CERI MP, tandis qu'une collaboration avec Wentao YAN de la National University of Singapore est prévue dans le cadre du projet MISSA afin de traiter des exemples représentatifs de la fabrication additive.

Ces travaux autour d'une approche EF×MOR pour les écoulements biphasés dans le cadre du projet MISSA sont représentés dans la partie intermédiaire du premier axe de la Figure 4.10. À long terme, comme montré dans la partie inférieure du premier axe de la Figure 4.10, j'envisage de poursuivre cette thématique de recherche en lien avec des partenaires industriels afin de traiter de vrais procédés. Cela pourra aussi être l'occasion d'étendre l'approche à d'autres phénomènes physiques. Pour compléter mes compétences sur les méthodes numériques et la modélisation multi-échelle, je continuerai à m'appuyer sur Chung-Hae PARK en interne et sur des partenaires externes comme Wentao YAN.

Rupture

Les travaux sur la modélisation de la rupture par champ de phase vont être poursuivis dans le cadre d'une thèse de doctorat que je vais co-encadrer. Celle-ci concerne la modélisation de l'endommagement en fatigue d'un équipement sous pression de stockage d'hydrogène. Le verrou scientifique principal concerne la fragilisation par hydrogène. Bien que ce sujet ait été assez largement traité dans la littérature, la modélisation de ce phénomène par une approche champ de phase a peu été abordée. L'objectif de la thèse sera de développer une telle approche et de la valider expérimentalement.

Cette thèse de doctorat s'intègre dans mon projet de recherche car elle vise à compléter la modélisation de la rupture avec un autre phénomène physique, et aussi de traiter une application industrielle. Elle s'inscrit dans le cadre du Laboratoire des technologies des équipements sous pression (LATEP) qui est un laboratoire commun entre l'IMT Nord Europe et le CETIM au sein duquel j'interviens avec Salim CHAKI et Dmytro VASIUKOV du CERI MP.

En outre, cette thèse offre une opportunité de s'intéresser au stockage et au transport d'hydrogène, qui fait déjà l'objet d'un grand intérêt au niveau national et européen. Les résultats obtenus serviront de base pour répondre à des appels à projets.

Des applications de l'approche champ de phase aux composites sont envisagées en collaboration avec Chung-Hae PARK et Dmytro VASIUKOV du CERI MP. Des projets sont en cours de montage avec des partenaires belges comme Cenaero pour l'industrialisation des méthodes numériques ou l'Université de Gand pour leur validation. Ces partenaires montrent par ailleurs un grand intérêt pour mes développements autour de la réduction de modèle pour le calcul de structures. Sur cette thématique, ma contribution se concentre sur les méthodes numériques, tandis que mes collaborateurs apportent des compétences complémentaires sur les modèles, les matériaux et les applications.

En comparant les deux premiers axes de la Figure 4.10, on peut voir que je vise également à développer une approche EF×MOR pour la rupture. Pour le deuxième axe, ce qui manque, c'est surtout la modélisation multi-échelle. Le cadre théorique d'homogénéisation est le même que celui développé dans la Section 4.2. La difficulté provient de la présence d'un champ supplémentaire à homogénéiser qui est le champ de phase, et au couplage de l'équation d'évolution du champ de phase entre deux échelles. De premiers travaux peuvent être trouvés dans la littérature [127], mais il y a encore beaucoup de pistes à étudier, notamment par comparaison avec des simulations reposant sur une approche mono-échelle.

Mes travaux autour d'approches EF×MOR pour les écoulements et la rupture pourraient être envisagés conjointement sous la forme d'un projet de recherche fondamentale, par exemple de type ERC Consolidator Grant. En effet, une piste intéressante est le couplage de plusieurs phénomènes physiques dans une approche multi-échelle. Par exemple, les procédés de moulage par transfert de résine avec compression mettent en jeu à la fois une avancée de la résine freinée par le renfort, et une déformation non-négligeable du renfort. La thermique joue par ailleurs un rôle déterminant dans un grand nombre de procédés. Les travaux prévus à moyen terme autour de la modélisation multi-échelle et la réduction de modèle permettront de faire murir cette idée de projet combinant les deux premiers axes de la Figure 4.10.

Jumeau numérique

Comme montré dans la Section 3.2, les autoencodeurs sont une technologie prometteuse pour la compression non linéaire dans l'objectif d'accélérer les calculs. J'ai aussi exploité des méthodes issues de l'intelligence artificielle pour viser d'autres objectifs.

D'une part, des autoencodeurs variationnels ont été développés pour générer des Volumes Élémentaires Représentatifs (VERs). Ces travaux ont été initiés avec le stage d'Amira D, puis poursuivis dans les projets de recherche de Lloyd M et Zakaria B. Ces études exploratoires n'ont pour l'instant pas mené à des résultats concluants mais l'intérêt est majeur et m'incite donc à persévérer.

En effet, la plupart des méthodes de génération de VERs sont spécifiques à une morphologie. Ainsi, certaines méthodes ne s'appliquent qu'aux polycristaux, d'autres qu'aux matériaux à particules sphériques, etc. Le passage à un nouveau matériau ou l'intégration de composantes supplémentaires (*e.g.*, porosités) exige un effort conséquent. Les autoencodeurs variationnels pourraient permettre de générer des VERs directement à partir d'images acquises par microscopie ou par tomographie et ce pour tout type de matériau.

D'autre part, dans le stage de Koceila K, des travaux sur le placement de capteurs pour surveiller l'état de santé de structures ont été initiés. Ces travaux ont été poursuivis dans le stage de Daniel D, où des algorithmes s'appuyant sur des RNAs et des autoencodeurs ont été développés pour reconstruire des champs mécaniques complets à partir de données ponctuelles mesurées par des capteurs.

Ces travaux s(er)ont exploités à court terme dans le cadre des projets JUNAP (qui s'inscrit dans le LATEP mais fait aussi intervenir des collègues du CERI Systèmes Numériques) et COREN-STOCK, qui concernent tous deux la surveillance et la maintenance prédictive d'équipements sous pression. Je participe(ra) autour de cette thématique à l'encadrement de deux doctorants ainsi que de deux post-doctorants. Cela me permet(tra) d'acquérir une expérience conséquente en apprentissage profond pour des applications diverses.

L'objectif à court terme est de valider les développements numériques pour un équipement physique. Sur le plus long terme, l'approche devra être généralisée notamment pour les matériaux et procédés intelligents et les mesures multi-physiques. La possibilité d'intégrer cette approche dans un jumeau numérique et de redéployer les capteurs selon les dérives observées pendant la vie des équipements est également envisagée.

Bibliographie

- [1] M. LAGARDÈRE et al. *Skate V2*. 2019. URL : <https://youtu.be/QWRjgJEI1ao> (cf. pages 7, 8).
- [2] C. H. PARK et L. Woo. « Modeling void formation and unsaturated flow in liquid composite molding processes : a survey and review ». In : *Journal of Reinforced Plastics and Composites* 30.11 (2011), pages 957-977. doi : [10.1177/0731684411411338](https://doi.org/10.1177/0731684411411338) (cf. pages 9, 38, 60).
- [3] M. MEHDIKHANI, L. GORBATIKH, I. VERPOEST et S. V. LOMOV. « Voids in fiber-reinforced polymer composites : A review on their formation, characteristics, and effects on mechanical performance ». In : *Journal of Composite Materials* 53.12 (2019), pages 1579-1669. doi : [10.1177/0021998318772152](https://doi.org/10.1177/0021998318772152) (cf. pages 7, 38, 60).
- [4] Y. NIKISHKOV, L. AIROLDI et A. MAKEEV. « Measurement of voids in composites by X-ray Computed Tomography ». In : *Composites Science and Technology* 89 (2013), pages 89-97. doi : [10.1016/j.compscitech.2013.09.019](https://doi.org/10.1016/j.compscitech.2013.09.019) (cf. page 10).
- [5] E SYERKO*, T. SCHMIDT, D. MAY, C. BINETRUY, S. G. ADVANI, S. LOMOV, L. SILVA, S. ABAIMOV, N. AISSA, I. AKHATOV, M. ALI, N. ASIABAN, G. BROGGI, J. BRUCHON, B. CAGLAR, H. DIGONNET, J. DITTMANN, S. DRAPIER, A. ENDRUWEIT, A. GUILLOUX, R. KANDINSKII, A. LEYGUE, B. MAHATO, P. MARTINEZ, M. MATVEEV, V. MICHAUD, P. MIDDENDORF, N. MOULIN, L. ORGÉAS, C. H. PARK, S. RIEF, M. ROUHI, I. SERGEICHEV, **M. SHAKOOR**, O. SHISHKINA, Y. SWOLFS, M. TAHANI, R. UMER, K. VANCLOOSTER et R. VOROBYEV. « Benchmark Exercise on Image-Based Permeability Determination of Engineering Textiles : Microscale Predictions ». In : *Composites Part A : Applied Science and Manufacturing* 167 (2023), page 107397. doi : [10.1016/j.compositesa.2022.107397](https://doi.org/10.1016/j.compositesa.2022.107397) (cf. pages 26, 57).
- [6] X. MA, Y. CHEN, **M. SHAKOOR***, D. VASIUKOV, S. V. LOMOV et C. H. PARK. « Simplified and complete phase-field fracture formulations for heterogeneous materials and their solution using a Fast Fourier Transform based numerical method ». In : *Engineering Fracture Mechanics* 279 (2023), page 109049. doi : [10.1016/j.engfracmech.2023.109049](https://doi.org/10.1016/j.engfracmech.2023.109049) (cf. pages 26, 95, 99-103).
- [7] **M. SHAKOOR*** et C. H. PARK. « Computational homogenization of unsteady flows with obstacles ». In : *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 95.4 (2023), pages 499-527. doi : [10.1002/flid.5158](https://doi.org/10.1002/flid.5158) (cf. pages 26, 152, 153, 155).
- [8] K. SHINDE, V. ITIER, J. MENNESSON, D. VASIUKOV et **M. SHAKOOR***. « Dimensionality reduction through convolutional autoencoders for fracture patterns prediction ». In : *Applied Mathematical Modelling* 114 (2023), pages 94-113. doi : [10.1016/j.apm.2022.09.034](https://doi.org/10.1016/j.apm.2022.09.034) (cf. pages 26, 125-128, 131, 132, 134, 136, 137, 139-141).

- [9] M. SHAKOOR* et C. H. PARK. « A higher-order finite element method with unstructured anisotropic mesh adaption for two phase flows with surface tension ». In : *Computers & Fluids* 230 (2021), page 105154. DOI : [10.1016/j.compfluid.2021.105154](https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2021.105154) (cf. pages 27, 44, 60, 62-66, 75).
- [10] X. MA, M. SHAKOOR*, D. VASIUKOV, S. V. LOMOV et C. H. PARK. « Numerical artifacts of Fast Fourier Transform solvers for elastic problems of multi-phase materials : their causes and reduction methods ». In : *Computational Mechanics* 67 (2021), pages 1667-1683. DOI : [10.1007/s00466-021-02013-5](https://doi.org/10.1007/s00466-021-02013-5) (cf. pages 27, 89-94).
- [11] M. SHAKOOR*. « FEMS – A Mechanics-oriented Finite Element Modeling Software ». In : *Computer Physics Communications* 260 (2021), page 107729. DOI : [10.1016/j.cpc.2020.107729](https://doi.org/10.1016/j.cpc.2020.107729) (cf. pages 27, 41, 43, 46, 47, 49-52, 70, 73-75).
- [12] J. GAO, M. SHAKOOR, G. DOMEL, M. MERZKIRCH, G. ZHOU, D. ZENG, X. SU et W. K. LIU*. « Predictive multiscale modeling for Unidirectional Carbon Fiber Reinforced Polymers ». In : *Composites Science and Technology* 186 (2020), page 107922. DOI : [10.1016/j.compscitech.2019.107922](https://doi.org/10.1016/j.compscitech.2019.107922) (cf. pages 27, 86, 124, 146-151).
- [13] J. GAO, M. SHAKOOR, H. JINNAI, H. KADOWAKI, E. SETA et W. K. LIU*. « An inverse modeling approach for predicting filled rubber performance ». In : *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 357 (2019), page 112567. DOI : [10.1016/j.cma.2019.112567](https://doi.org/10.1016/j.cma.2019.112567) (cf. pages 27, 86-88, 124).
- [14] M. SHAKOOR*, V. M. TREJO NAVAS, D. PINO MUÑOZ, M. BERNACKI et P.-O. BOUCHARD. « Computational methods for ductile fracture modeling at the microscale ». In : *Archives of Computational Methods in Engineering* 26.4 (2019), pages 1153-1192. DOI : [10.1007/s11831-018-9276-1](https://doi.org/10.1007/s11831-018-9276-1) (cf. pages 27, 81).
- [15] M. SHAKOOR, O. L. KAFKA, C. YU et W. K. LIU*. « Data science for finite strain mechanical science of ductile materials ». In : *Computational Mechanics* 64.1 (2019), pages 33-45. DOI : [10.1007/s00466-018-1655-9](https://doi.org/10.1007/s00466-018-1655-9) (cf. pages 27, 86, 115, 116, 118, 120-124).
- [16] M. SHAKOOR*, M. BERNACKI et P.-O. BOUCHARD. « Ductile fracture of a metal matrix composite studied using 3D numerical modeling of void nucleation and coalescence ». In : *Engineering Fracture Mechanics* 189 (2018), pages 110-132. DOI : [10.1016/j.engfracmech.2017.10.027](https://doi.org/10.1016/j.engfracmech.2017.10.027) (cf. pages 27, 43).
- [17] M. SHAKOOR*, A. BULJAC, J. NEGGERS, F. HILD, T. F. MORGENEYER, L. HELFEN, M. BERNACKI et P.-O. BOUCHARD. « On the choice of boundary conditions for micromechanical simulations based on 3D imaging ». In : *International Journal of Solids and Structures* 112 (2017), pages 83-96. DOI : [10.1016/j.ijsolstr.2017.02.018](https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2017.02.018) (cf. pages 27, 47).
- [18] M. SHAKOOR*, P.-O. BOUCHARD et M. BERNACKI. « An adaptive level-set method with enhanced volume conservation for simulations in multiphase domains ». In : *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 109.4 (2017), pages 555-576. DOI : [10.1002/nme.5297](https://doi.org/10.1002/nme.5297) (cf. pages 28, 39, 45, 47, 67).
- [19] M. SHAKOOR*, B. SCHOLTES, P.-O. BOUCHARD et M. BERNACKI. « An efficient and parallel level set reinitialization method – Application to micromechanics and microstructural evolutions ». In : *Applied Mathematical Modelling* 39.23-24 (2015), pages 7291-7302. DOI : [10.1016/j.apm.2015.03.014](https://doi.org/10.1016/j.apm.2015.03.014) (cf. pages 28, 47).

- [20] O. L. KAFKA, C. YU, M. SHAKOOR, Z. LIU, G. J. WAGNER et W. K. LIU*. « Data-Driven Mechanistic Modeling of Influence of Microstructure on High-Cycle Fatigue Life of Nickel Titanium ». In : *JOM* 70.7 (2018), pages 1154-1158. doi : [10.1007/s11837-018-2868-2](https://doi.org/10.1007/s11837-018-2868-2) (cf. pages 28, 121).
- [21] M. SHAKOOR*, M. BERNACKI et P.-O. BOUCHARD. « A new body-fitted immersed volume method for the modeling of ductile fracture at the microscale : Analysis of void clusters and stress state effects on coalescence ». In : *Engineering Fracture Mechanics* 147 (2015), pages 398-417. doi : [10.1016/j.engfracmech.2015.06.057](https://doi.org/10.1016/j.engfracmech.2015.06.057) (cf. pages 28, 44, 46, 47).
- [22] M. SHAKOOR, J. GAO, Z. LIU et W. K. LIU*. « A Data-Driven Multiscale Theory For Modeling Damage and Fracture of Composite Materials ». In : *Meshfree Methods for Partial Differential Equations IX. IWMPDE 2017*. Sous la direction de M. GRIEBEL et M. SCHWEITZER. Tome 129. Lecture Notes in Computational Science and Engineering. Cham : Springer, 2019, pages 135-148. doi : [10.1007/978-3-030-15119-5_8](https://doi.org/10.1007/978-3-030-15119-5_8) (cf. pages 28, 150).
- [23] M. SHAKOOR* et L. DELBEKE. « Topological optimization of triangulations on graphics processing units : a bad idea ? ». In : *World Congress on Computational Mechanics and European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering (WCCM-ECCOMAS)*. Virtual Congress, 11-15 jan. 2021 (cf. pages 30, 75).
- [24] M. SHAKOOR* et C. H. PARK. « Adaptive Higher-Order Finite Element Modeling of Multiphase Flow ». In : *World Congress on Computational Mechanics and European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering (WCCM-ECCOMAS)*. Virtual Congress, 11-15 jan. 2021 (cf. pages 30, 67).
- [25] M. SHAKOOR*, C. YU, O. L. KAFKA et W. K. LIU. « A Multiscale Computational Homogenization Theory with Data-Driven Model Reduction for the Prediction of Ductile Damage ». In : *World Congress on Computational Mechanics (WCCM)*. New York, NY (USA), 22-27 juill. 2018 (cf. pages 31, 150).
- [26] M. SHAKOOR* et C. H. PARK. « Modélisation numérique de la migration de porosités pendant la mise en œuvre des composites ». In : *Journées Nationales sur les Composites (JNC)*. Conférence virtuelle, 28-30 juin 2021 (cf. pages 33, 72).
- [27] M. SHAKOOR* et C. H. PARK. « Simulation de la migration de bulles dans le milieu fibreux pendant l'imprégnation de composites ». In : *Journées scientifiques du GdR Mise en œuvre des composites et propriétés induites (GDR Week – MIC)*. Tarbes (France), 7-8 nov. 2019 (cf. pages 33, 72).
- [28] M. SUSSMAN. « A parallelized, adaptive algorithm for multiphase flows in general geometries ». In : *Computers & Structures* 83.6-7 (2005), pages 435-444. doi : [10.1016/j.compstruc.2004.06.006](https://doi.org/10.1016/j.compstruc.2004.06.006) (cf. pages 38, 39).
- [29] X. ZHENG, J. LOWENGRUB, A. ANDERSON et V. CRISTINI. « Adaptive unstructured volume remeshing – II : Application to two- and three-dimensional level-set simulations of multiphase flow ». In : *Journal of Computational Physics* 208.2 (2005), pages 626-650. doi : [10.1016/j.jcp.2005.02.024](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2005.02.024) (cf. pages 38, 39).
- [30] R. ABGRALL, H. BEAUGENDRE et C. DOBRZYNSKI. « An immersed boundary method using unstructured anisotropic mesh adaptation combined with level-sets and penalization techniques ». In : *Journal of Computational Physics* 257 (2014), pages 83-101. doi : [10.1016/j.jcp.2013.08.052](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2013.08.052) (cf. pages 38, 43).

- [31] D.-L. QUAN, T. TOULORGE, E. MARCHANDISE, J.-F. REMACLE et G. BRICTEUX. « Anisotropic mesh adaptation with optimal convergence for finite elements using embedded geometries ». In : *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 268 (2014), pages 65-81. DOI : [10.1016/j.cma.2013.09.007](https://doi.org/10.1016/j.cma.2013.09.007) (cf. pages 38, 43).
- [32] C. DAPOGNY, C. DOBRZYNSKI et P. FREY. « Three-dimensional adaptive domain remeshing, implicit domain meshing, and applications to free and moving boundary problems ». In : *Journal of Computational Physics* 262 (2014), pages 358-378. DOI : [10.1016/j.jcp.2014.01.005](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2014.01.005) (cf. pages 38, 45-48).
- [33] J. X. ZHAO, T. COUPEZ, E. DECENCIÈRE, D. JEULIN, D. CÁRDENAS-PEÑA et L. SILVA. « Direct multiphase mesh generation from 3D images using anisotropic mesh adaptation and a redistancing equation ». In : *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 309 (2016), pages 288-306. DOI : [10.1016/j.cma.2016.06.009](https://doi.org/10.1016/j.cma.2016.06.009) (cf. pages 39, 47).
- [34] W. HUANG. « Metric tensors for anisotropic mesh generation ». In : *Journal of Computational Physics* 204.2 (2005), pages 633-665. DOI : [10.1016/j.jcp.2004.10.024](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2004.10.024) (cf. pages 39, 44).
- [35] O. COULAUD et A. LOSEILLE. « Very High Order Anisotropic Metric-Based Mesh Adaptation in 3D ». In : *Procedia Engineering* 163 (2016), pages 353-365. DOI : [10.1016/j.proeng.2016.11.071](https://doi.org/10.1016/j.proeng.2016.11.071) (cf. pages 39, 44).
- [36] E. DOWELL et K. HALL. « Modeling of fluid-structure interaction ». In : *Annual Review of Fluid Mechanics* 33 (2001), pages 445-490. DOI : [10.1146/annurev.fluid.33.1.445](https://doi.org/10.1146/annurev.fluid.33.1.445) (cf. page 39).
- [37] G. HOU, J. WANG et A. LAYTON. « Numerical Methods for Fluid-Structure Interaction - A Review ». In : *Communications in Computational Physics* 12.2 (2012), pages 337-377. DOI : [10.4208/cicp.291210.290411s](https://doi.org/10.4208/cicp.291210.290411s) (cf. page 39).
- [38] Y. LIU, I. STRAUMIT, D. VASIUKOV, S. V. LOMOV et S. PANIER. « Prediction of linear and non-linear behavior of 3D woven composite using mesoscopic voxel models reconstructed from X-ray micro-tomography ». In : *Composite Structures* 179 (2017), pages 568-579. DOI : [10.1016/j.compstruct.2017.07.066](https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2017.07.066) (cf. page 39).
- [39] C. HIRT et B. NICHOLS. « Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries ». In : *Journal of Computational Physics* 39.1 (1981), pages 201-225. DOI : [10.1016/0021-9991\(81\)90145-5](https://doi.org/10.1016/0021-9991(81)90145-5) (cf. page 39).
- [40] S. OSHER et J. A. SETHIAN. « Fronts propagating with curvature-dependent speed : Algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations ». In : *Journal of Computational Physics* 79.1 (1988), pages 12-49. DOI : [10.1016/0021-9991\(88\)90002-2](https://doi.org/10.1016/0021-9991(88)90002-2) (cf. page 39).
- [41] J. BRACKBILL, D. KOTHE et C. ZEMACH. « A continuum method for modeling surface tension ». In : *Journal of Computational Physics* 100.2 (1992), pages 335-354. DOI : [10.1016/0021-9991\(92\)90240-Y](https://doi.org/10.1016/0021-9991(92)90240-Y) (cf. pages 39, 60).
- [42] M. SUSSMAN, P. SMERKA et S. OSHER. « A Level Set Approach for Computing Solutions to Incompressible Two-Phase Flow ». In : *Journal of Computational Physics* 114.1 (1994), pages 146-159. DOI : [10.1006/jcph.1994.1155](https://doi.org/10.1006/jcph.1994.1155) (cf. page 39).
- [43] D. A. DI PIETRO, S. LO FORTE et N. PAROLINI. « Mass preserving finite element implementations of the level set method ». In : *Applied Numerical Mathematics* 56.9 (2006), pages 1179-1195. DOI : [10.1016/j.apnum.2006.03.003](https://doi.org/10.1016/j.apnum.2006.03.003) (cf. page 39).

- [44] F. DENNER, F. EVRARD, R. SERFATY et B. G. van WACHEM. « Artificial viscosity model to mitigate numerical artefacts at fluid interfaces with surface tension ». In : *Computers & Fluids* 143 (2017), pages 59-72. DOI : [10.1016/j.compfluid.2016.11.006](https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2016.11.006) (cf. pages 39, 67).
- [45] M. M. FRANCOIS, S. J. CUMMINS, E. D. DENDY, D. B. KOTHE, J. M. SICILIAN et M. W. WILLIAMS. « A balanced-force algorithm for continuous and sharp interfacial surface tension models within a volume tracking framework ». In : *Journal of Computational Physics* 213.1 (2006), pages 141-173. DOI : [10.1016/j.jcp.2005.08.004](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2005.08.004) (cf. pages 39, 61).
- [46] C. BUI, C. DAPOGNY et P. FREY. « An accurate anisotropic adaptation method for solving the level set advection equation ». In : *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 70.7 (2012), pages 899-922. DOI : [10.1002/flid.2730](https://doi.org/10.1002/flid.2730) (cf. page 39).
- [47] D. ENRIGHT, F. LOSASSO et R. FEDKIW. « A fast and accurate semi-Lagrangian particle level set method ». In : *Computers & Structures* 83.6-7 (2005), pages 479-490. DOI : [10.1016/j.compstruc.2004.04.024](https://doi.org/10.1016/j.compstruc.2004.04.024) (cf. page 39).
- [48] S. HYSING, S. TUREK, D. KUZMIN, N. PAROLINI, E. BURMAN, S. GANESAN et L. TOBISKA. « Quantitative benchmark computations of two-dimensional bubble dynamics ». In : *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 60.11 (2009), pages 1259-1288. DOI : [10.1002/flid.1934](https://doi.org/10.1002/flid.1934) (cf. pages 39, 62, 63, 65).
- [49] M. SHAKOOR. *FEMS – A Mechanics-oriented Finite Element Modeling Software*. Mendeley Data, V1. 2020. DOI : [10.17632/rgv4hkrxjw.1](https://doi.org/10.17632/rgv4hkrxjw.1) (cf. pages 41, 75).
- [50] V. ARSIGNY, P. FILLARD, X. PENNEC et N. AYACHE. « Log-Euclidean metrics for fast and simple calculus on diffusion tensors ». In : *Magnetic Resonance in Medicine* 56.2 (2006), pages 411-421. DOI : [10.1002/mrm.20965](https://doi.org/10.1002/mrm.20965) (cf. pages 42, 44).
- [51] O. C. ZIENKIEWICZ et J. Z. ZHU. « A simple error estimator and adaptive procedure for practical engineering analysis ». In : *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 24.2 (1987), pages 337-357. DOI : [10.1002/nme.1620240206](https://doi.org/10.1002/nme.1620240206) (cf. page 43).
- [52] Z. ZHANG et A. NAGA. « A New Finite Element Gradient Recovery Method : Superconvergence Property ». In : *SIAM Journal on Scientific Computing* 26.4 (2005), pages 1192-1213. DOI : [10.1137/S1064827503402837](https://doi.org/10.1137/S1064827503402837) (cf. page 43).
- [53] A. LOSEILLE et F. ALAUZET. « Continuous Mesh Framework Part I : Well-Posed Continuous Interpolation Error ». In : *SIAM J. Numer. Anal.* 49.1 (2011), pages 38-60. DOI : [10.1137/090754078](https://doi.org/10.1137/090754078) (cf. page 44).
- [54] A. LOSEILLE et F. ALAUZET. « Continuous Mesh Framework Part II : Validations and Applications ». In : *SIAM Journal on Numerical Analysis* 49.1 (2011), pages 61-86. DOI : [10.1137/10078654X](https://doi.org/10.1137/10078654X) (cf. page 44).
- [55] P. LAUG et H. BOROUCAKI. « Construction d'un champ continu de métriques ». In : *Comptes Rendus Mathématique* 351.15-16 (2013), pages 639-644. DOI : [10.1016/j.crma.2013.07.009](https://doi.org/10.1016/j.crma.2013.07.009) (cf. page 44).
- [56] C. DOBRZYNSKI et P. FREY. « Anisotropic Delaunay Mesh Adaptation for Unsteady Simulations ». In : *Proceedings of the 17th International Meshing Roundtable*. Sous la direction de R. V. GARIMELLA. Berlin, Heidelberg : Springer, 2008, pages 177-194. ISBN : 978-3-540-87920-6. DOI : [10.1007/978-3-540-87921-3](https://doi.org/10.1007/978-3-540-87921-3) (cf. pages 44, 45).

- [57] C. GRUAU et T. COUPEZ. « 3D tetrahedral, unstructured and anisotropic mesh generation with adaptation to natural and multidomain metric ». In : *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 194.48-49 (2005), pages 4951-4976. DOI : [10.1016/j.cma.2004.11.020](https://doi.org/10.1016/j.cma.2004.11.020) (cf. page 45).
- [58] C. MAURER, RENSHENG QI et V. RAGHAVAN. « A linear time algorithm for computing exact Euclidean distance transforms of binary images in arbitrary dimensions ». In : *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence* 25.2 (2003), pages 265-270. DOI : [10.1109/TPAMI.2003.1177156](https://doi.org/10.1109/TPAMI.2003.1177156) (cf. page 47).
- [59] J. A. SETHIAN et A. VLADIMIRSKY. « Fast methods for the Eikonal and related Hamilton-Jacobi equations on unstructured meshes. » In : *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America* 97.11 (2000), pages 5699-703. DOI : [10.1073/pnas.090060097](https://doi.org/10.1073/pnas.090060097) (cf. page 47).
- [60] J. SCHINDELIN, I. ARGANDA-CARRERAS, E. FRISE, V. KAYNIG, M. LONGAIR, T. PIETZSCH, S. PREIBISCH, C. RUEDEN, S. SAALFELD, B. SCHMID, J.-Y. TINEVEZ, D. J. WHITE, V. HARTENSTEIN, K. ELICEIRI, P. TOMANCAK et A. CARDONA. « Fiji : an open-source platform for biological-image analysis ». In : *Nature Methods* 9.7 (2012), pages 676-682. DOI : [10.1038/nmeth.2019](https://doi.org/10.1038/nmeth.2019) (cf. page 47).
- [61] M. BODAGHI, I. GNABA, X. LEGRAND, D. SOULAT, P. WANG, M. DELÉGLISE-LAGARDÈRE et C. H. PARK. « In-plane permeability changes of plain weave glass fabric induced by tufting ». In : *Advanced Composite Materials* 30.5 (2021), pages 478-494. DOI : [10.1080/09243046.2020.1840687](https://doi.org/10.1080/09243046.2020.1840687) (cf. page 56).
- [62] N. VERNET, E. RUIZ, S. ADVANI, J. ALMS, M. AUBERT, M. BARBURSKI, B. BARARI, J. BERAUD, D. BERG, N. CORREIA, M. DANZI, T. DELAVIÈRE, M. DICKERT, C. DI FRATTA, A. ENDRUWEIT, P. ERMANNI, G. FRANCUCCI, J. GARCIA, A. GEORGE, C. HAHN, F. KLUNKER, S. LOMOV, A. LONG, B. LOUIS, J. MALDONADO, R. MEIER, V. MICHAUD, H. PERRIN, K. PILLAI, E. RODRIGUEZ, F. TROCHU, S. VERHEYDEN, M. WIETGREFE, W. XIONG, S. ZAREMBA et G. ZIEGMANN. « Experimental determination of the permeability of engineering textiles : Benchmark II ». In : *Composites Part A : Applied Science and Manufacturing* 61 (2014), pages 172-184. DOI : [10.1016/j.compositesa.2014.02.010](https://doi.org/10.1016/j.compositesa.2014.02.010) (cf. page 57).
- [63] D. MAY, E. SYERKO, T. SCHMIDT, C. BINETRUY, L. R. D. SILVA, S. LOMOV et S. ADVANI. « Benchmarking virtual permeability predictions of real fibrous microstructure ». In : *American Society for Composites 2021*. Destech Publications, Inc., 2021. DOI : [10.12783/asc36/35901](https://doi.org/10.12783/asc36/35901) (cf. page 57).
- [64] K. K. PARVATHANENI. « Characterization and multiscale modeling of textile reinforced composite materials considering manufacturing defects ». Thèse de doctorat. IMT Nord Europe, 2020 (cf. page 58).
- [65] V. MICHAUD. « A Review of Non-saturated Resin Flow in Liquid Composite Moulding processes ». In : *Transport in Porous Media* 115.3 (2016), pages 581-601. DOI : [10.1007/s11242-016-0629-7](https://doi.org/10.1007/s11242-016-0629-7) (cf. page 60).
- [66] M. SUSSMAN, E. FATEMI, P. SMERKA et S. OSHER. « An improved level set method for incompressible two-phase flows ». In : *Computers & Fluids* 27.5-6 (1998), pages 663-680. DOI : [10.1016/S0045-7930\(97\)00053-4](https://doi.org/10.1016/S0045-7930(97)00053-4) (cf. page 61).

- [67] U. RASTHOFER, F. HENKE, W. WALL et V. GRAVEMEIER. « An extended residual-based variational multiscale method for two-phase flow including surface tension ». In : *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 200.21-22 (2011), pages 1866-1876. DOI : [10.1016/j.cma.2011.02.004](https://doi.org/10.1016/j.cma.2011.02.004) (cf. page 61).
- [68] F. POCHET, K. HILLEWAERT, P. GEUZAINÉ, J.-F. REMACLE et É. MARCHANDISE. « A 3D strongly coupled implicit discontinuous Galerkin level set-based method for modeling two-phase flows ». In : *Computers & Fluids* 87 (2013), pages 144-155. DOI : [10.1016/j.compfluid.2013.04.010](https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2013.04.010) (cf. pages 61, 62).
- [69] Y. BAZILEVS, V. CALO, J. COTTRELL, T. HUGHES, A. REALI et G. SCOVAZZI. « Variational multiscale residual-based turbulence modeling for large eddy simulation of incompressible flows ». In : *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 197.1-4 (2007), pages 173-201. DOI : [10.1016/j.cma.2007.07.016](https://doi.org/10.1016/j.cma.2007.07.016) (cf. page 62).
- [70] M. A. SAFI, N. PRASIANAKIS et S. TUREK. « Benchmark computations for 3D two-phase flows : A coupled lattice Boltzmann-level set study ». In : *Computers and Mathematics with Applications* 73.3 (2017), pages 520-536. DOI : [10.1016/j.camwa.2016.12.014](https://doi.org/10.1016/j.camwa.2016.12.014) (cf. page 68).
- [71] C. GEUZAINÉ et J.-F. REMACLE. « Gmsh : A 3-D finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities ». In : *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 79.11 (2009), pages 1309-1331. DOI : [10.1002/nme.2579](https://doi.org/10.1002/nme.2579) (cf. page 75).
- [72] C. MCKINSTRY et V. M. KASHYAP YEDUNUTHALA. « Parallel radiative heat-exchange solver ». In : *Summer of HPC 2021*. Sous la direction de PRACE. 2021 (cf. page 75).
- [73] H. MOULINEC et P. SUQUET. « A fast numerical method for computing the linear and nonlinear mechanical properties of composites ». In : *Comptes rendus de l'Académie des sciences. Série II, Mécanique, physique, chimie, astronomie* 318.11 (1994), pages 1417-1423 (cf. pages 80, 85).
- [74] M. FRIGO et S. JOHNSON. « The Design and Implementation of FFTW3 ». In : *Proceedings of the IEEE* 93.2 (2005), pages 216-231. DOI : [10.1109/JPROC.2004.840301](https://doi.org/10.1109/JPROC.2004.840301) (cf. page 80).
- [75] H. MOULINEC et P. SUQUET. « A numerical method for computing the overall response of nonlinear composites with complex microstructure ». In : *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 157.1-2 (1998), pages 69-94. DOI : [10.1016/S0045-7825\(97\)00218-1](https://doi.org/10.1016/S0045-7825(97)00218-1) (cf. pages 80, 89).
- [76] K. S. ELOH, A. JACQUES et S. BERBENNI. « Development of a new consistent discrete green operator for FFT-based methods to solve heterogeneous problems with eigenstrains ». In : *International Journal of Plasticity* 116 (2019), pages 1-23. DOI : [10.1016/j.ijplas.2018.10.011](https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2018.10.011) (cf. page 81).
- [77] M. LEUSCHNER et F. FRITZEN. « Fourier-Accelerated Nodal Solvers (FANS) for homogenization problems ». In : *Computational Mechanics* 62 (2018), pages 359-392. DOI : [10.1007/s00466-017-1501-5](https://doi.org/10.1007/s00466-017-1501-5) (cf. page 81).
- [78] A. DOITRAND, C. FAGIANO, F. X. IRISARRI et M. HIRSEKORN. « Comparison between voxel and consistent meso-scale models of woven composites ». In : *Composites Part A : Applied Science and Manufacturing* 73 (2015), pages 143-154. DOI : [10.1016/j.compositesa.2015.02.022](https://doi.org/10.1016/j.compositesa.2015.02.022) (cf. page 81).

- [79] B. BOURDIN, G. A. FRANCFORT et J. MARIGO. « The Variational Approach to Fracture ». In : *Journal of Elasticity* 91 (2008), pages 5-148. DOI : [10.1007/s10659-007-9107-3](https://doi.org/10.1007/s10659-007-9107-3) (cf. pages [81](#), [105](#)).
- [80] C. MIEHE, F. WELSCHINGER et M. HOFACKER. « Thermodynamically consistent phase-field models of fracture : Variational principles and multi-field FE implementations ». In : *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 83.10 (2010), pages 1273-1311. DOI : [10.1002/nme.2861](https://doi.org/10.1002/nme.2861) (cf. pages [81](#), [95](#)).
- [81] C. MIEHE, M. HOFACKER et F. WELSCHINGER. « A phase field model for rate-independent crack propagation : Robust algorithmic implementation based on operator splits ». In : *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 199.45-48 (2010), pages 2765-2778. DOI : [10.1016/j.cma.2010.04.011](https://doi.org/10.1016/j.cma.2010.04.011) (cf. pages [81](#), [95](#)).
- [82] J. BESSON. « Continuum Models of Ductile Fracture : A Review ». In : *International Journal of Damage Mechanics* 19.1 (2010), pages 3-52. DOI : [10.1177/1056789509103482](https://doi.org/10.1177/1056789509103482) (cf. page [81](#)).
- [83] Z. P. BAŽANT et M. JIRÁSEK. « Nonlocal Integral Formulations of Plasticity and Damage : Survey of Progress ». In : *Journal of Engineering Mechanics* 128.11 (2002), pages 1119-1149. DOI : [10.1061/\(ASCE\)0733-9399\(2002\)128:11\(1119\)](https://doi.org/10.1061/(ASCE)0733-9399(2002)128:11(1119)) (cf. page [81](#)).
- [84] R. H. J. PEERLINGS, R. DE BORST, W. A. M. BREKELMANS et J. H. P. DE VREE. « Gradient enhanced damage for quasi-brittle materials ». In : *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 39.19 (1996), pages 3391-3403. DOI : [10.1002/\(SICI\)1097-0207\(19961015\)39:19<3391::AID-NME7>3.0.CO;2-D](https://doi.org/10.1002/(SICI)1097-0207(19961015)39:19<3391::AID-NME7>3.0.CO;2-D) (cf. page [81](#)).
- [85] Y. CHEN, D. VASIUKOV, L. GÉLÉBART et C. H. PARK. « A FFT solver for variational phase-field modeling of brittle fracture ». In : *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 349 (2019), pages 167-190. DOI : [10.1016/j.cma.2019.02.017](https://doi.org/10.1016/j.cma.2019.02.017) (cf. pages [81](#), [95-97](#)).
- [86] D. JEULIN. « Towards crack paths simulations in media with a random fracture energy ». In : *International Journal of Solids and Structures* 184 (2020), pages 279-286. DOI : [10.1016/j.ijsolstr.2019.06.017](https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2019.06.017) (cf. page [81](#)).
- [87] M. KABEL, T. BÖHLKE et M. SCHNEIDER. « Efficient fixed point and Newton–Krylov solvers for FFT-based homogenization of elasticity at large deformations ». In : *Computational Mechanics* 54.6 (2014), pages 1497-1514. DOI : [10.1007/s00466-014-1071-8](https://doi.org/10.1007/s00466-014-1071-8) (cf. pages [83](#), [85](#), [105](#), [116](#), [117](#)).
- [88] X. MA. « The elastic and damage modeling of heterogeneous materials based on the fast Fourier transform ». Thèse de doctorat. IMT Nord Europe, 2022 (cf. pages [86](#), [89](#), [93](#), [95](#), [104-108](#)).
- [89] F. WILLOT. « Fourier-based schemes for computing the mechanical response of composites with accurate local fields ». In : *Comptes Rendus Mécanique* 343.3 (2015), pages 232-245. DOI : [10.1016/j.crme.2014.12.005](https://doi.org/10.1016/j.crme.2014.12.005) (cf. pages [89](#), [90](#)).
- [90] M. KABEL, S. FLIEGENER et M. SCHNEIDER. « Mixed boundary conditions for FFT-based homogenization at finite strains ». In : *Computational Mechanics* 57.2 (2016), pages 193-210. DOI : [10.1007/s00466-015-1227-1](https://doi.org/10.1007/s00466-015-1227-1) (cf. pages [89](#), [117](#)).
- [91] M. KABEL, D. MERKERT et M. SCHNEIDER. « Use of composite voxels in FFT-based homogenization ». In : *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 294 (2015), pages 168-188. DOI : [10.1016/j.cma.2015.06.003](https://doi.org/10.1016/j.cma.2015.06.003) (cf. page [93](#)).

- [92] J.-Y. WU et Y. HUANG. « Comprehensive implementations of phase-field damage models in Abaqus ». In : *Theoretical and Applied Fracture Mechanics* 106. December 2019 (2020), page 102440. doi : [10.1016/j.tafmec.2019.102440](https://doi.org/10.1016/j.tafmec.2019.102440) (cf. pages 104, 106, 108, 129).
- [93] O. GOURY, D. AMSALLEM, S. P. A. BORDAS, W. K. LIU et P. KERFRIDEN. « Automatised selection of load paths to construct reduced-order models in computational damage micromechanics : from dissipation-driven random selection to Bayesian optimization ». In : *Computational Mechanics* 58.2 (2016), pages 213-234. doi : [10.1007/s00466-016-1290-2](https://doi.org/10.1007/s00466-016-1290-2) (cf. page 112).
- [94] M. BESSA, R. BOSTANABAD, Z. LIU, A. HU, D. W. APLEY, C. BRINSON, W. CHEN et W. K. LIU. « A framework for data-driven analysis of materials under uncertainty : Countering the curse of dimensionality ». In : *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 320 (2017), pages 633-667. doi : [10.1016/j.cma.2017.03.037](https://doi.org/10.1016/j.cma.2017.03.037) (cf. page 112).
- [95] J. YVONNET et Q. C. HE. « The reduced model multiscale method (R3M) for the non-linear homogenization of hyperelastic media at finite strains ». In : *Journal of Computational Physics* 223.1 (2007), pages 341-368. doi : [10.1016/j.jcp.2006.09.019](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2006.09.019) (cf. pages 112, 113).
- [96] Z. LIU, M. BESSA et W. K. LIU. « Self-consistent clustering analysis : An efficient multi-scale scheme for inelastic heterogeneous materials ». In : *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 306 (2016), pages 319-341. doi : [10.1016/j.cma.2016.04.004](https://doi.org/10.1016/j.cma.2016.04.004) (cf. pages 112, 113, 115, 118, 146).
- [97] Y. LIANG, H. LEE, S. LIM, W. LIN, K. LEE et C. WU. « Proper orthogonal decomposition and its applications—Part I : Theory ». In : *Journal of Sound and Vibration* 252.3 (2002), pages 527-544. doi : [10.1006/jsvi.2001.4041](https://doi.org/10.1006/jsvi.2001.4041) (cf. page 112).
- [98] T. LIEU, C. FARHAT et M. LESOINNE. « Reduced-order fluid/structure modeling of a complete aircraft configuration ». In : *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 195.41-43 (2006), pages 5730-5742. doi : [10.1016/j.cma.2005.08.026](https://doi.org/10.1016/j.cma.2005.08.026) (cf. page 113).
- [99] D. RYCKELYNCK. « A priori hyperreduction method : an adaptive approach ». In : *Journal of Computational Physics* 202.1 (2005), pages 346-366. doi : [10.1016/j.jcp.2004.07.015](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2004.07.015) (cf. pages 113, 121).
- [100] S. CHATURANTABUT et D. C. SORENSEN. « Nonlinear Model Reduction via Discrete Empirical Interpolation ». In : *SIAM Journal on Scientific Computing* 32.5 (2010), pages 2737-2764. doi : [10.1137/090766498](https://doi.org/10.1137/090766498) (cf. page 113).
- [101] F. L. HITCHCOCK. « The Expression of a Tensor or a Polyadic as a Sum of Products ». In : *Journal of Mathematics and Physics* 6.1-4 (1927), pages 164-189. doi : [10.1002/sapm192761164](https://doi.org/10.1002/sapm192761164) (cf. page 113).
- [102] F. CHINESTA, A. LEYGUE, F. BORDEU, J. V. AGUADO, E. CUETO, D. GONZALEZ, I. ALFARO, A. AMMAR et A. HUERTA. « PGD-Based Computational Vademecum for Efficient Design, Optimization and Control ». In : *Archives of Computational Methods in Engineering* 20.1 (2013), pages 31-59. doi : [10.1007/s11831-013-9080-x](https://doi.org/10.1007/s11831-013-9080-x) (cf. page 113).
- [103] J. MICHEL et P. SUQUET. « Nonuniform transformation field analysis ». In : *International Journal of Solids and Structures* 40.25 (2003), pages 6937-6955. doi : [10.1016/S0020-7683\(03\)00346-9](https://doi.org/10.1016/S0020-7683(03)00346-9) (cf. pages 113, 124).

- [104] Z.-H. HU et Y.-L. SONG. « Dimensionality reduction and reconstruction of data based on autoencoder network ». In : *Journal of Electronics & Information Technology* 31.5 (2009), pages 1189-1192. DOI : [10.3724/SP.J.1146.2008.00477](https://doi.org/10.3724/SP.J.1146.2008.00477) (cf. page 113).
- [105] Y. WANG, H. YAO et S. ZHAO. « Auto-encoder based dimensionality reduction ». In : *Neurocomputing* 184 (2016), pages 232-242. DOI : [10.1016/j.neucom.2015.08.104](https://doi.org/10.1016/j.neucom.2015.08.104) (cf. page 113).
- [106] E. PLAUT. « From Principal Subspaces to Principal Components with Linear Autoencoders ». In : *arXiv* (2018). DOI : [10.48550/ARXIV.1804.10253](https://doi.org/10.48550/ARXIV.1804.10253) (cf. page 113).
- [107] K. FUKAMI, K. HASEGAWA, T. NAKAMURA, M. MORIMOTO et K. FUKAGATA. « Model Order Reduction with neural networks : application to laminar and turbulent flows ». In : *SN Computer Science* 2 (2021), page 467. DOI : [10.1007/s42979-021-00867-3](https://doi.org/10.1007/s42979-021-00867-3) (cf. page 114).
- [108] T. MURATA, K. FUKAMI et K. FUKAGATA. « Nonlinear mode decomposition with convolutional neural networks for fluid dynamics. » In : *Journal of Fluid Mechanics* 882 (2020), A13. DOI : [10.1017/jfm.2019.822](https://doi.org/10.1017/jfm.2019.822) (cf. page 114).
- [109] P. PANT, R. DOSHI, P. BAHL et A. BARATI FARIMANI. « Deep learning for reduced order modelling and efficient temporal evolution of fluid simulations ». In : *Physics of Fluids* 33.10 (2021), page 107101. DOI : [10.1063/5.0062546](https://doi.org/10.1063/5.0062546) (cf. pages 114, 133).
- [110] S. E. AHMED, O. SAN, A. RASHEED et T. ILIESCU. « Nonlinear proper orthogonal decomposition for convection-dominated flows ». In : *Physics of Fluids* 33.12 (2021), page 121702. DOI : [10.1063/5.0074310](https://doi.org/10.1063/5.0074310) (cf. page 114).
- [111] J. SIMO. « Algorithms for static and dynamic multiplicative plasticity that preserve the classical return mapping schemes of the infinitesimal theory ». In : *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 99.1 (1992), pages 61-112. DOI : [10.1016/0045-7825\(92\)90123-2](https://doi.org/10.1016/0045-7825(92)90123-2) (cf. page 119).
- [112] F. CHOLLET et al. *Keras*. 2015. URL : <https://github.com/fchollet/keras> (cf. page 130).
- [113] M. ABADI, P. BARHAM, J. CHEN, Z. CHEN, A. DAVIS, J. DEAN, M. DEVIN, S. GHEMAWAT, G. IRVING, M. ISARD, M. KUDLUR, J. LEVENBERG, R. MONGA, S. MOORE, D. G. MURRAY, B. STEINER, P. TUCKER, V. VASUDEVAN, P. WARDEN, M. WICKE, Y. YU et X. ZHENG. « TensorFlow : a system for large-scale machine learning ». In : OSDI'16. Savannah, GA, USA : USENIX Association, 2016, pages 265-283 (cf. page 130).
- [114] T. WEN et Z. ZHANG. « Deep convolution neural network and autoencoders-Based unsupervised feature learning of EEG signals ». In : *IEEE Access* 6 (2018), pages 25399-25410. DOI : [10.1109/ACCESS.2018.2833746](https://doi.org/10.1109/ACCESS.2018.2833746) (cf. page 133).
- [115] M. GEERS, V. KOUZNETSOVA et W. BREKELMANS. « Multi-scale computational homogenization : Trends and challenges ». In : *Journal of Computational and Applied Mathematics* 234.7 (2010), pages 2175-2182. DOI : [10.1016/j.cam.2009.08.077](https://doi.org/10.1016/j.cam.2009.08.077) (cf. page 144).
- [116] K. MATOUŠ, M. G. GEERS, V. G. KOUZNETSOVA et A. GILLMAN. « A review of predictive nonlinear theories for multiscale modeling of heterogeneous materials ». In : *Journal of Computational Physics* 330 (2017), pages 192-220. DOI : [10.1016/j.jcp.2016.10.070](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2016.10.070) (cf. page 144).
- [117] T. MORI et K. TANAKA. « Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions ». In : *Acta Metallurgica* 21.5 (1973), pages 571-574. DOI : [10.1016/0001-6160\(73\)90064-3](https://doi.org/10.1016/0001-6160(73)90064-3) (cf. page 144).

- [118] A. L. GURSON. « Continuum Theory of Ductile Rupture by Void Nucleation and Growth : Part I—Yield Criteria and Flow Rules for Porous Ductile Media ». In : *Journal of Engineering Materials and Technology* 99.1 (1977), pages 2-15. doi : [10.1115/1.3443401](https://doi.org/10.1115/1.3443401) (cf. page 144).
- [119] F. FEYEL. « Multiscale FE2 elastoviscoplastic analysis of composite structures ». In : *Computational Materials Science* 16.1-4 (1999), pages 344-354. doi : [10.1016/S0927-0256\(99\)00077-4](https://doi.org/10.1016/S0927-0256(99)00077-4) (cf. page 144).
- [120] A. Y. BELIAEV et S. M. KOZLOV. « Darcy equation for random porous media ». In : *Communications on Pure and Applied Mathematics* 49.1 (1996), pages 1-34 (cf. page 145).
- [121] E. SKJETNE et J. L. AURIAULT. « New insights on steady, non-linear flow in porous media ». In : *European Journal of Mechanics - B/Fluids* 18.1 (1999), pages 131-145. doi : [10.1016/S0997-7546\(99\)80010-7](https://doi.org/10.1016/S0997-7546(99)80010-7) (cf. page 145).
- [122] E. SKJETNE et J. L. AURIAULT. « High-velocity laminar and turbulent flow in porous media ». In : *Transport in Porous Media* 36.2 (1999), pages 131-147. doi : [10.1023/A:1006582211517](https://doi.org/10.1023/A:1006582211517) (cf. page 145).
- [123] P. J. BLANCO, A. CLAUSSE et R. A. FEIJÓO. « Homogenization of the Navier-Stokes equations by means of the Multi-scale Virtual Power Principle ». In : *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 315 (2017), pages 760-779. doi : [10.1016/j.cma.2016.11.022](https://doi.org/10.1016/j.cma.2016.11.022) (cf. pages 145, 152).
- [124] Z. LIU, M. FLEMING et W. K. LIU. « Microstructural material database for self-consistent clustering analysis of elastoplastic strain softening materials ». In : *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 330 (2018), pages 547-577. doi : [10.1016/j.cma.2017.11.005](https://doi.org/10.1016/j.cma.2017.11.005) (cf. pages 146, 148).
- [125] A. MELRO, P. CAMANHO, F. ANDRADE PIRES et S. PINHO. « Micromechanical analysis of polymer composites reinforced by unidirectional fibres : Part I – Constitutive modelling ». In : *International Journal of Solids and Structures* 50.11-12 (2013), pages 1897-1905. doi : [10.1016/j.ijsolstr.2013.02.009](https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2013.02.009) (cf. page 148).
- [126] P. J. BLANCO, P. J. SÁNCHEZ, E. A. DE SOUZA NETO et R. A. FEIJÓO. « Variational Foundations and Generalized Unified Theory of RVE-Based Multiscale Models ». In : *Archives of Computational Methods in Engineering* 23.2 (2016), pages 191-253. doi : [10.1007/s11831-014-9137-5](https://doi.org/10.1007/s11831-014-9137-5) (cf. page 153).
- [127] R. BHARALI, F. LARSSON et R. JÄNICKE. « Computational homogenisation of phase-field fracture ». In : *European Journal of Mechanics - A/Solids* 88 (2021), page 104247. doi : [10.1016/j.euromechsol.2021.104247](https://doi.org/10.1016/j.euromechsol.2021.104247) (cf. page 165).

Résumé

Dans le but d'obtenir mon habilitation à diriger des recherches, je résume brièvement mon parcours et mes activités d'enseignement et de recherche, ainsi que mon investissement dans les activités collectives. Je présente ensuite mes activités de recherche plus en détails. Celles-ci se focalisent sur la modélisation numérique de phénomènes mécaniques non linéaires pour des matériaux hétérogènes. Les deux phénomènes étudiés sont les écoulements monophasés ou biphasés où l'hétérogénéité est due à des obstacles d'une taille très petite par rapport à celle du domaine de calcul, et l'endommagement et la rupture de structures où c'est la mésostructure et/ou la microstructure du matériau qui est hétérogène. Dans les deux cas, la modélisation numérique repose sur une représentation de l'hétérogénéité et d'une interface supplémentaire, celle entre les deux phases dans le cas d'écoulements biphasés, et la fissure dans le cas de la rupture. Ces calculs sont extrêmement coûteux en raison de la non-linéarité des phénomènes modélisés et de la présence d'interfaces à une échelle très fine. C'est pourquoi il convient d'accélérer ces calculs par la réduction de modèle et aussi par la modélisation multi-échelle. L'originalité de mes travaux de recherche réside essentiellement dans le développement de méthodes numériques avancées. La discrétisation de l'hétérogénéité est réalisée soit par la génération et l'adaptation de maillages éléments finis, soit par l'utilisation de maillages voxélisés et de la méthode numérique basée sur la transformée de Fourier rapide. La modélisation des interfaces dans les écoulements est traitée avec les fonctions de niveau et une interpolation éléments finis quadratique, tandis que la modélisation des fissures est traitée par une approche champ de phase. Celle-ci est revisitée afin d'être appliquée à des matériaux hétérogènes, notamment en ce qui concerne la longueur caractéristique. Les méthodes de réduction de modèle développées s'appuient sur des concepts issus de la science des données et l'apprentissage profond, mais aussi sur des principes fondamentaux de la mécanique. Différentes contributions à la modélisation multi-échelle permettent de s'attaquer à des problèmes d'écoulement et de rupture peu traités dans la littérature.

Mots Clés

Modélisation numérique ; mécanique ; hétérogène ; éléments finis ; fonctions de niveau ; transformée de Fourier rapide ; champ de phase ; multi-échelle ; homogénéisation numérique ; réduction de modèle ; autoencodeurs

