

Nouvelle approche pour la modélisation des problèmes multi-échelles en mécanique : la méthode 95/5

Djamel Missoum Benziane

▶ **To cite this version:**

Djamel Missoum Benziane. Nouvelle approche pour la modélisation des problèmes multi-échelles en mécanique : la méthode 95/5. Sciences de l'ingénieur [physics]. Arts et Métiers ParisTech, 2007. Français. NNT : 2007ENAM0007 . pastel-00002617

HAL Id: pastel-00002617
https://pastel.hal.science/pastel-00002617

Submitted on 10 Jul 2007

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.

N°: 2007 ENAM 0007

Ecole doctorale n° 432 : Sciences des Métiers de l'Ingénieur

T H È S E

pour obtenir le grade de

Docteur

de

l'École Nationale Supérieure d'Arts et Métiers

Spécialité "Mécanique"

présentée et soutenue publiquement
par

Djamel MISSOUM BENZIANE

le 15 mai 2007

NOUVELLE APPROCHE POUR LA MODÉLISATION DES PROBLÈMES MULTI ÉCHELLES EN MÉCANIQUE : LA MÉTHODE 95/5

Directeur de thèse : ***Francisco CHINESTA***

Codirecteur(s) de thèse : ***David RYCKELYNCK***

Jury :

M. Georges CAILLETAUD, Professeur, Centre des Matériaux, ENSMP..... Président
M. Hachmi BEN DHIA, Professeur, MSSMAT, École Centrale de Paris ..... Rapporteur
M. Christian REY, Professeur, L.M.T, ENS Cachan ..... Rapporteur
M. Francisco CHINESTA, Professeur, LMSP, ENSAM, Paris..... Examinateur
M. Aziz HAMDOUNI, Professeur, LEPTAB, Université de La Rochelle ..... Examinateur
M. David RYCKELYNCK, MDR/HDR, Centre des Matériaux, ENSMP ..... Examinateur
M. Pierre VILLON, Professeur, LG2mS, UTC Compiègne ..... Examinateur

Laboratoire de Mécanique des Systèmes et des Procédés
ENSAM, CER de Paris

L'ENSAM est un Grand Etablissement dépendant du Ministère de l'Education Nationale, composé de huit centres :
AIX-EN-PROVENCE ANGERS BORDEAUX CHÂLONS-EN-CHAMPAGNE CLUNY LILLE METZ PARIS

Table des matières

1 Introduction **1**

1.1 Mise en contexte 1

1.1.1 Les problèmes nécessitant une analyse multi-échelles 2

1.1.2 Les philosophies courantes de la modélisation multi-échelle . . . 3

1.2 Objectif 5

2 Les approches en calcul multi-échelles **7**

2.1 Approches analytiques basées sur la théorie de l'homogénéisation 7

2.1.1 Théorie du champ moyen 8

2.1.2 Approche asymptotique 12

2.2 Approches numériques basées sur la théorie de l'homogénéisation 14

2.2.1 Simulation directe de la microstructure 15

2.2.2 Méthodes multi-niveaux 15

2.3 Autres approches 22

2.3.1 Discrétisation microscopique, décomposition de domaine 22

2.3.2 Méthode multigrille 24

2.3.3 Enrichissement de l'interpolation éléments finis : 25

2.4 Conclusion 27

3 L'approche proposée **29**

3.1 Modélisation, motivations 29

3.2 Extension du comportement 32

3.2.1 Influence des conditions aux bords sur la solution homogénéisée . 33

3.2.2 L'approche proposée 35

3.3 Méthodes sans maillage 42
3.3.1 Motivations 42
3.3.2 Généralités sur les méthodes sans maillage, historique 42
3.3.3 Méthode des éléments naturels contraints CNEM 45

4 Validation, exemples **53**
4.1 La C-NEM et les problèmes à haute hétérogénéité de densité nodale . . . 53
4.1.1 Étude comparative FEM / C-NEM 53
4.1.2 Évaluation et optimisation de la C-NEM pour le traitement des problèmes multi-échelles 56
4.2 Validation du modèle d'extension du comportement 72
4.2.1 Validation du modèle d'extension du comportement 72
4.2.2 Analyse des limites du modèle d'extension du comportement, longueur de variation des propriétés du materiau 73
4.3 Exemples numériques 85

5 Stratégie de résolution **91**
5.1 Présentation des concepts fondamentaux de l'approche 91
5.1.1 Les méthodes de base réduite : 91
5.1.2 La décomposition de domaine : 92
5.2 Présentation de la stratégie de résolution 94
5.2.1 Analyses et discussion sur la stratégie de résolution 101

6 Conclusions et perspectives **105**

Table des figures

2.1 Milieu hétérogène et son VER, les différentes échelles 9
2.2 Conditions homogènes au contour. 9
2.3 Milieu périodique, définition d'une cellule élémentaire. 12
2.4 Développement asymptotique du champ solution 13
2.5 Stratégie des méthodes EF multi-niveaux 16
2.6 Superposition de maillages S-FEM 18
2.7 Exemple de modélisation Arlequin 20
2.8 Exemple de stratégie multi-niveaux basée sur la méthode VC-FEM 21
2.9 Décomposition en sous domaines et interfaces 23
2.10 Exemple de grilles hiérarchiques pour une résolution multigrille (cas 1D) 24

3.1 Distribution nodale dans les motifs microscopiques et dans le domaine complémentaire. 31
3.2 Structure périodique, les différents problèmes traités. 33
3.3 Module de Young et coefficient de Poisson homogénéisés. 34
3.4 contrainte σ_{xy} pour les 3 types de conditions aux limites relatives à la même sollicitation moyenne. 35
3.5 Décomposition du domaine : motifs microscopiques et domaine complémentaire. 35
3.6 Définition des différents domaines. 36
3.7 Condition de déformation homogène au contour. 37
3.8 Construction des fonctions de formes CNEM 46

4.1 Problème test, définition et discrétisations. 54

4.2 Problème test, groupe de noeuds. 54
4.3 Erreur de discrétisation FEM et C-NEM. 55
4.4 Distribution de l'erreur pour les solutions C-NEM et FEM. 57
4.5 Définition du problème test. 58
4.6 Distribution de l'erreur relative $\eta_{cellule}$, problème linéaire sans interface. . 61
4.7 Distribution de l'erreur relative $\eta_{cellule}$, problème linéaire avec interface. . 62
4.8 Distribution de l'erreur relative $\eta_{cellule}$, problème quadratique sans interface. 63
4.9 Distribution de l'erreur relative $\eta_{cellule}$, problème quadratique avec interface. 64
4.10 Distribution de l'erreur relative $\eta_{cellule}$, problème de degré 3 sans interface. 65
4.11 Distribution de l'erreur relative $\eta_{cellule}$, problème de degré 3 sans interface. 66
4.12 Distribution de l'erreur relative $\eta_{cellule}$ pour les différentes solutions, sans interface. 69
4.13 Distribution de l'erreur relative $\eta_{cellule}$ pour les différentes solutions, avec interface. 71
4.14 Discrétisations : distributions des domaines microscopiques. 73
4.15 Analyse de la convergence : erreur relative globale et microscopique. . . . 74
4.16 Définition du problème test. 75
4.17 Définition du problème test : comportement macroscopique linéaire, disposition des domaines microscopiques. 76
4.18 Évolution linéaire du module d'Young, champ de contrainte solution exacte et calculée. 77
4.19 Évolution linéaire du module d'Young, erreur relative $\eta_{cellule}$. 77
4.20 Évolution sinusoïdale du module d'Young, champ de contrainte solution exacte et calculée. 78
4.21 Évolution sinusoïdale du module d'Young, erreur relative $\eta_{cellule}$. 78
4.22 Définition du problème test : comportement macroscopique sinusoïdal. . . 79
4.23 Évolution sinusoïdale du module d'Young, champ de contrainte solution exacte et calculée. 80
4.24 Évolution sinusoïdale du module d'Young, Erreur relative $\eta_{cellule}$. 80

4.25 Définition du problème test : longueur caractéristique du matériau compatible avec la taille du domaine microscopique. 81
4.26 Champ de contrainte solution exacte et calculée. 82
4.27 Erreur relative $\eta_{cellule}$. 82
4.28 Définition du problème test : longueur de caractéristique du matériau non compatible avec la taille du domaine microscopique. 83
4.29 Champ de contrainte solution exacte et calculée. 84
4.30 Erreur relative $\eta_{cellule}$. 84
4.31 Problème hétérogène introduisant deux matériaux de propriétés différentes. 86
4.32 Distribution de la composante C_{11} du tenseur d'élasticité. 88
4.33 Champ de contrainte équivalente de Von Mises. 88
4.34 Distribution de l'erreur $\eta_{cellule}$ 89

5.1 Décomposition du domaine Ω sans recouvrement. 93
5.2 Cellules de Voronoi dans le voisinage d'un motif microscopique. sous-domaines et zone de recouvrement. 97
5.3 Problème test et discrétisation associée. 103
5.4 détaille du matériau utilisé. 103
5.5 Analyse de l'influence des fonctions de formes solutions des problèmes d'homogénéisation. 104

Résumé

Nous proposons une nouvelle approche de modélisation micro/macro pour les problèmes multi-échelles. Cette approche se destine aux matériaux ayant deux longueurs caratéristiques de variation des propriétés : l'une microscopique et l'autre macroscopique. Ce qui signifie qu'il n'est pas possible de définir une relation de comportement macroscopique unique pour l'ensemble du système étudié.

Nous proposons une méthode de discrétisation pour laquelle la majeure partie du domaine étudié est modélisée exclusivement à l'échelle macroscopique, seules quelques zones relativement petites, appelées motifs microscopiques, sont modélisées à l'échelle microscopique. L'approche développée respecte certaines exigences : une modélisation multi-échelle permettant d'effectuer des simulations macroscopiques en exploitant exclusivement une description du matériau restreinte aux motifs microscopiques du modèle ; une modélisation qui tient compte du couplage entre réponse macroscopique du système mécanique et effets de bord à l'échelle microscopique ; enfin, une stratégie de résolution pouvant tirer profit de la puissance de calcul offerte sur des ordinateurs à architecture parallèle.

La mise en oeuvre de la méthode de modélisation repose sur : un principe d'extension du comportement de l'échelle microscopique afin d'en déduire une relation de comportement numérique à l'échelle macroscopique ; la méthode des éléments naturels contraints CNEM, afin de pouvoir insérer les motifs microscopiques dans une discrétisation macroscopique ; et une méthode de résolution introduisant décomposition de domaine et réduction de modèle pour accélérer le calcul et tirer profit des calculateurs à architecture parallèle.

Nous avons prouvé l'efficacité de notre approche sur des exemples académiques avec une bonne estimation de la solution, et une distribution de l'erreur homogène sur tout le domaine aux échelles microscopique et macroscopique même sur les bords. Cela nous permet d'envisager l'utilisation de l'approche proposée pour la simulation de phénomènes localisés sur le bord et affectant la réponse aux sollicitations du système mécanique (frottement, enlèvement de matière ...).

Abstract

We propose a new micro/macro modelling approach for mechanical problems involving microstructure. This approach is an appealing choice for the treatment of problems involving materials with two behaviour lengths of variation, where it is impossible to define and to apply a single low describing the behaviour of both micro and micro scales.

We propose a discretization for which the major part of the studied field is modelled exclusively on a macroscopic scale. Only some relatively small zones, called microscopic patterns, are modelled on a microscopic scale. The proposed approach respects some requirements : a multi scale modelling allowing to carry out macroscopic simulations by exploiting exclusively a description of the material restricted to the microscopic patterns on the model ; a modelling which takes account of the coupling between macroscopic response of the mechanical system and edge effects on the microscopic scale ; finally, a problem-solving strategy being able to take benefit from the computing power offered on parallel computers.

The implementation of the modelling method rests on : an extension of the behaviour principle from the microscopic scale, in order to deduce a numerical behaviour for the macroscopic scale ; the method of constrained natural elements CNEM, in order to be able to insert the microscopic patterns in a macroscopic discretization ; and a solver introducing domain decomposition and model reduction to accelerate calculation and to take benefit from the parallel calculators.

We proved the effectiveness of the proposed approach on some benchmarks with a good estimation of the solution, and a homogeneous error distribution over the microscopic and macroscopic scales even on the edges. That enables us to consider the use of the suggested approach for the simulation of phenomena located on the edge and affecting the response of the mechanical system (friction, cutting process ...).

Chapitre 1

Introduction

1.1 Mise en contexte

Les problèmes de la mécanique introduisent des entités aux échelles très diverses telles que : atome, molécule, grain, inclusion, fibre, ..., outil et pièce. Pour une majorité de problèmes une analyse considérant un comportement moyenné sur l'ensemble du système isolé à l'échelle du système est suffisante. Cependant, certains problèmes soulevés par les avancées dans la technologie de l'élaboration des matériaux, ou bien de façon plus classique dans le domaine des procédés de fabrication, nécessitent une analyse plus fine avec une prise en compte du couplage fort entre le comportement des entités à l'échelle inférieure (que nous désignerons dorénavant par l'échelle microscopique), et la réponse globale du système (que nous désignerons dorénavant par l'échelle macroscopique). Ainsi, par exemple, dans le cadre de la simulation du processus de coupe, nous sommes particulièrement intéressés par la prévision de l'usure des outils. Ce genre de prévision, nécessite des modèles macroscopiques impliquant la description microscopique de la transformation thermomécanique dans la zone de contact entre l'outil et la pièce usinée. Aussi, pour être pertinents, ces modèles micro/macro doivent permettre une description des phénomènes et des conditions à l'interface de l'outil et de la pièce usinée à l'échelle microscopique dans cette zone.

1.1.1 Les problèmes nécessitant une analyse multi-échelles

La première étape dans la modélisation multi-échelles est d'identifier les propriétés du problème posé, à partir desquelles on pourrait tirer profit pour concevoir des stratégies adaptées. Ainsi, il est utile de trouver une classification des problèmes introduisant la notion de multi-échelles selon leurs propriétés communes. On rencontre dans la littérature [59] la classification suivante :

- *Problèmes de type A :* Ce sont les problèmes qui contiennent des défauts ou des singularités isolées tels que des fissures, dislocations, chocs ou lignes de contact. Pour ces problèmes, un modèle macroscopique adéquat est suffisant dans la majeur partie du domaine, le modèle microscopique est seulement nécessaire dans le voisinage des défauts ou des singularités.
- *Problèmes de type B :* Ce sont les problèmes pour lesquels un modèle macroscopique approprié existe pour un ensemble de variables macroscopiques correctement choisis, mais ce modèle macroscopique n'est pas assez explicite pour être directement employé de façon efficace. Un exemple est le problème d'homogénéisation pour des équations du type : (un problème de conduction thermique par exemple)

  $$-\nabla(a(x)\nabla u(x)) = f(x)$$

  Si le coefficient est de la forme $a^\varepsilon(x) = a(x, x/\varepsilon)$ où ε est le facteur d'échelle, alors il existe une équation effective, l'équation homogénéisée, qui prend la forme

  $$-\nabla(A^H(x)\nabla U(x)) = f(x)$$

  où $A^H(x)$ est le coefficient homogénéisé qu'on ne peut explicitement formuler, excepté pour des problèmes très spéciaux (par exemple, si la dépendance de $a^\varepsilon(x)$ vis-à-vis de la variable rapide $y = x/\varepsilon$ a une certaine forme comme la périodicité). Par conséquent il est difficile de se servir de l'équation homogénéisée dans le cas général directement comme outil de calcul.
  Dans ce type de problèmes, le rôle de la modélisation multi-échelle est d'effectuer des simulations macroscopiques sans faire l'utilisation des relations constitutives à cette échelle. Au lieu de cela, l'information macroscopique nécessaire est extraite à partir de modèles microscopiques sous-jacents.

- *Problèmes de type C :* Ce sont les problèmes qui ont des propriétés du type A et du type B.

1.1.2 Les philosophies courantes de la modélisation multi-échelle

Une façon d'obtenir une réponse macroscopique d'un système à partir d'une description microscopique du comportement est d'utiliser une technique d'homogénéisation. Ce sont souvent des approches analytiques, on retrouve principalement deux grandes familles :

- *Les approches asymptotiques :* les méthodes asymptotiques sont issues de la communauté des mathématiques appliquées et consistent essentiellement en l'étude de l'influence de petits paramètres sur la solution de problèmes mathématiques. Dans ce type d'approche on fait l'hypothèse que les échelles sont parfaitement séparées, que le milieu est périodique. De plus, on considère les champs microscopiques comme une perturbation des champs macroscopiques. Ceci permet de réécrire les équations du problème sur les deux échelles, pour obtenir la solution en résolvant ce jeu d'équations.
- *La théorie du champ moyen :* cette approche a été initialement proposée par les mécaniciens. Tout comme pour l'approche asymptotique on fait l'hypothèse que les échelles sont infiniment séparées, mais en introduisant un niveau intermédiaire, le Volume Elémentaire Représentative "'VER"'. Le VER doit être suffisamment grand pour être statistiquement représentatif du milieu et assez petit pour qu'à l'intérieur les variations des champs macroscopiques soient négligeables. On utilise le VER pour avoir une approximation des champs de déformation et de contrainte sous des conditions aux bords adéquates. Ceci nous permet de remonter à un comportement effectif du milieu homogène.

L'homogénéisation a fait preuve de son efficacité pour un comportement élastique linéaire. Cependant, son extension aux problèmes non linéaires n'est pas triviale. Aussi, les hypothèses de la séparation des échelles et de milieu infini, font que cette approche ne convient pas pour traiter des problèmes complexes nécessitant une description microscopique de la frontière du système.

Pour palier à certains inconvénients de l'homogénéisation analytique, des approches exploitant une discrétisation de la microstructure (généralement de type éléments finis) ont été développées et sont particulièrement intéressantes. Elles facilitent la modélisation de comportements non linéaires à l'échelle microscopique, la prise en compte des interactions entre les différentes phases et l'introduction de l'endommagement. Intégrées au calcul de structures, ces méthodes d'homogénéisation numérique donnent les méthodes multi-niveaux. Le problème du couplage entre effets de bord et évolution de la microstructure ainsi que de la précision de la solution sur le bord restent entier pour ce type de calcul de structures. Ces méthodes sont aussi limitées aux problèmes aux échelles complètement séparées.

Dans le cas de problèmes aux échelles partiellement séparées, ou pour modéliser l'interaction entre les conditions au bord à l'échelle microscopique et les transformations de la microstructure, on peut envisager d'utiliser un modèle défini à l'échelle microscopique sur l'ensemble du domaine. Ceci conduit évidemment au traitement d'un très grand nombre d'inconnues. L'utilisation de méthodes adéquates s'impose, on s'oriente généralement vers :

- L'utilisation d'une discrétisation fine à l'échelle des composantes microscopiques, couplée à des méthodes dites de décomposition de domaines. La résolution du problème se fait entièrement à l'échelle microscopique, en introduisant une échelle macroscopique au niveau du calcul numérique afin d'accélérer la résolution.
- L'utilisation d'une discrétisation plus grossière en enrichissant l'espace d'interpolation des éléments à l'aide de fonctions spéciales, qui dépendent du problème étudié et qui traduisent une connaissance a priori du comportement local de la solution.

Ces méthodes répondent à certains problèmes, mais continuent à en poser d'autres. L'utilisation de discrétisation fine nécessite une grande puissance de calcul, qui n'est disponible actuellement que sur des ordinateurs parallèles et qui impose d'adapter les stratégies à ce type de plateforme. Les méthodes d'enrichissement supposent une connaissance a priori de la forme de la solution locale, cette solution peut être de haute fréquence et peut poser des problèmes lors de l'intégration. De plus, il faut veiller à l'indépendance linéaire des fonctions de base d'enrichissement par rapport aux fonctions classiques.

1.2 Objectif

Nous proposons une nouvelle stratégie de modélisation micro/macro pour les problèmes multi-échelles de type C, dans le cadre de la simulation des procédés de fabrication, où la majeure partie du domaine étudié peut être représentée par un modèle relativement grossier et où seules quelques zones relativement petites nécessitent une modélisation aux échelles inférieures. Le défi réside dans le fait que cette stratégie doit être capable d'apporter des solutions aux insuffisances constatées. Nous cherchons à obtenir :

- Une modélisation multi-échelle permettant d'effectuer des simulations macroscopiques sans connaissance sur le matériau à cette échelle, l'information macroscopique nécessaire est extraite à partir du modèle microscopique sous-jacent ;
- Une approche exploitant une discrétisation de la microstructure facilitant la modélisation de comportements non linéaires à l'échelle microscopique ;
- Une modélisation de l'interaction entre la condition au bord à l'échelle microscopique et les transformations de la microstructure, tout en évitant une modélisation à l'échelle microscopique de l'ensemble du système ;
- Une cinématique unique du problème, les champs microscopiques et macroscopiques sont confondus ;
- Une stratégie de résolution pouvant tirer profit de la puissance de calcul offerte sur des ordinateurs à architecture parallèle.

Pour l'exposé de notre approche et de nos principaux résultats nous procédons comme suit :

Dans Le chapitre 2, on s'attachera à faire un tour d'horizon succinct des différentes stratégies courantes ainsi que des développements récents dans le domaine. Cette démarche a pour but de situer la méthode sur laquelle porte ce document et de donner quelques éclairages sur certaines approches qui nous apparaissent comme révélatrices des principales directions de recherche actuelles.

Le chapitre 3 expose la méthode de modélisation 95/5. Nous y présenterons les composantes classiques et originales sur lesquelles reposent la stratégie multi-échelles proposée :

- L'exploitation de la microstructure et du comportement à l'échelle microscopique

pour la construction d'une formulation du problème à l'échelle macroscopique.

- Les méthodes sans maillages, les facteurs motivants leurs choix et l'exposé des bases de la méthode des éléments naturels contraints CNEM.

Le chapitre 4 présente une discussion sur certains choix et sur les limitations des composantes de l'approche proposée. Nous conclurons ce chapitre par des exemples illustrant les capacités de la méthode 95/5.

Le chapitre 5 expose la mise en oeuvre d'une stratégie de résolution adaptée, pouvant tirer profit de la puissance offerte par le calcul parallèle, intégrant la décomposition de domaine ainsi qu'une ébauche de réduction de modèle.

Enfin, dans le chapitre 6, on conclura sur le potentiel de l'approche proposée ainsi que sur les perspectives possibles .

Chapitre 2

Les Approches en calcul multi-échelles

Un des objectifs important dans l'étude d'un matériau non homogène est la déduction du comportement global "effectif" ou "apparent" du matériau à partir du comportement des constituants, du comportement des interfaces entre eux, et de l'arrangement géométrique des phases. C'est ce qu'on appel *l'homogénéisation*.

Il existe plusieurs approches de l'homogénéisation. Nous nous attacherons à présenter, de manière non exhaustive, les méthodes les plus classiques ainsi que certains développements récents en la matière.

2.1 Approches analytiques basées sur la théorie de l'homogénéisation

Les approches analytiques sont historiquement les plus anciennes, les formulations utilisées considèrent un comportement élastique linéaire. L'extension des formulations au domaine non linéaire n'est pas triviale et reste un domaine ouvert à la recherche.

Globalement les approches analytiques de la théorie de l'homogénéisation se divisent en deux grandes familles :

2.1.1 Théorie du champ moyen

Cette approche s'applique aux milieux hétérogènes aléatoires, on trouve une bonne présentation et un état de l'art récent dans [10]. Cette approche s'appuie sur 3 étapes majeures : *Représentation, Localisation, Homogénéisation.*

Représentation : Travailler sur des milieux hétérogènes impose d'avoir une représentation d'une certaine forme de base de ces derniers, on définit alors un volume d'homogénéisation, *le VER ou Volume Élémentaire Représentatif*. Dans le cas idéal, le VER devrait être choisi pour être un volume élémentaire approprié, c'est un volume secondaire statistiquement représentatif de la géométrie microscopique du matériau. Son choix est conditionné par 3 paramètres :

- d : la taille caractéristique des hétérogénéités et des propriétés sujettes à l'analyse. Il est nécessaire de ne pas descendre inutilement à des niveaux plus fins que nécessaire et de toujours conserver la validité des outils de la mécanique des milieux continus si possible (Dans certaines problèmes il est nécessaire d'aller vers l'échelle nanoscopique et d'utiliser les lois correspondantes : dynamique moléculaire ...) .
- L : la taille de la structure à analyser.
- l : la taille du VER proprement dit. Le rapport l/d doit être suffisamment grand pour permettre un échantillonnage significatif des champs microscopiques. Aussi un rapport l/d insuffisant entraîne une forte fluctuation du comportement global d'une particule macroscopique à l'autre, dû à sa dépendance vis a vis de ses constituants. Phénomène qui s'atténue lorsque l/d augmente. Le rapport L/l doit être suffisamment grand pour que l'influence des gradients macroscopiques soit négligeable. Il est aussi nécessaire pour que l'on puisse traiter la structure comme un milieu continu et y déterminer des champs continus (ou continus par morceaux).

Cette condition est symboliquement dénotée :

$$d << l << L$$

A titre d'exemple pour un alliage poly-cristallin : la taille des grains d est de l'ordre de la dizaine de micromètres, le VER serait alors de taille l de l'ordre de la fraction du millimètre pour une structure de taille L de l'ordre au moins du centimètre.

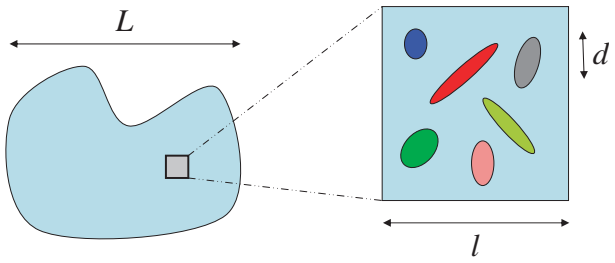


FIG. 2.1 – Milieu hétérogène et son VER, les différentes échelles

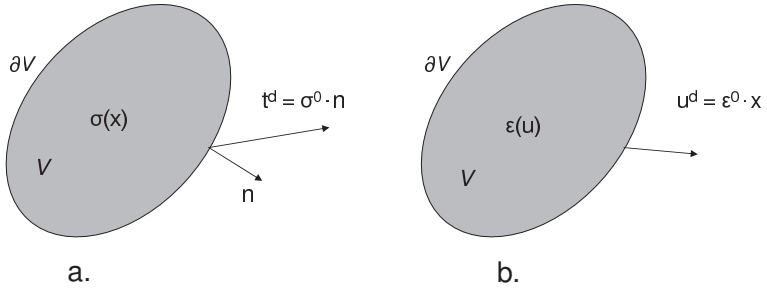


FIG. 2.2 – a. Conditions de contraintes homogènes au contour.
b. Conditions de déformations homogènes au contour.

localisation : Le fait que le VER soit une image statistique et incomplète de la microstructure considérée nous interdit d'affecter à coup sûr des caractéristiques mécaniques précises à tout point du VER, de ce fait la détermination des champs locaux n'a pas de solution unique. De plus le problème est *mal posé* dans le sens où on doit résoudre un problème de structure sans véritables conditions aux limites, on a la place des conditions de moyenne sur les variables locales.

Ceci dit, en pratique on préfère substituer un problème plus classique en imposant des conditions homogènes sur le contour ∂V qui respectent la condition de moyenne ($\overline{\varepsilon} = \varepsilon^0$, $\overline{\sigma} = \sigma^0$) :

$$
\begin{aligned}
&t^d(x) = \sigma^0 \cdot n(x) && \forall x \in \partial V \quad , \quad \textit{conditions de contraintes homogènes au contour} \\
&u^d(x) = \varepsilon^0 \cdot x && \forall x \in \partial V \quad , \quad \textit{conditions de déformations homogènes au contour} \\
&u(x) = \varepsilon^0 \cdot x + u'(x) && \forall x \in V \quad , \quad \textit{conditions de périodicité}
\end{aligned}
\tag{2.1}
$$

σ^0 et ε^0 étant les valeurs macroscopiques de la contrainte et de la déformation au point matériel que représente le VER.

On notera toutefois que ces conditions ne sont pas équivalentes et peuvent conduire à des comportements homogénéisés très différents si la condition $d << l$ n'est pas respectée.

Ainsi et partant de la connaissance de la morphologie des phases, on peut formuler une loi de localisation des contraintes et des déformations qui prendra la forme :

$$
\begin{aligned}
\varepsilon(x) &= f_x(\overline{\varepsilon}, Y_x) \\
\sigma(x) &= g_x(\overline{\sigma}, Y_x)
\end{aligned}
\tag{2.2}
$$

Où ($\varepsilon(x)$, $\sigma(x)$) et ($\overline{\varepsilon}$, $\overline{\sigma}$), sont respectivement les champs de déformation et de contrainte microscopiques et macroscopiques, Y_x représente l'ensemble des paramètres attachés à la description géométrique et mécanique retenu du VER.

Dans les cas simples on pourra écrire ces fonctionnelles sous la forme

$$
\begin{aligned}
\varepsilon(x) &= A(x)\ \overline{\varepsilon} \\
\sigma(x) &= B(x)\ \overline{\sigma}
\end{aligned}
\tag{2.3}
$$

Où A(x) et B(x) sont les tenseurs de concentration de déformation et de contrainte (ou tenseurs de localisation), respectivement.

Homogénéisation : Cette étape vise à trouver l'expression du comportement du milieu homogène équivalent. Ceci s'effectue en exprimant, grâce à la loi de comportement locale et aux conditions aux limites homogènes sur le contour, les champs localisés fonction de

la variable microscopique x. On effectue par la suite une opération de moyenne sur la variable microscopique, couramment définie comme :

$$\begin{aligned} \langle \varepsilon \rangle &= \frac{1}{V_{VER}} \int_{VER} \varepsilon(x) \quad dV \\ \langle \sigma \rangle &= \frac{1}{V_{VER}} \int_{VER} \sigma(x) \quad dV \end{aligned} \tag{2.4}$$

On accède ainsi aux champs macroscopiques associés et on peut à partir de là définir le module effectif qui servira au calcul macroscopique.

Remarques : La résolution du problème microscopique est très complexe, et souvent impossible analytiquement, des approximations sont faites pour simplifier le problème.

En posant que la déformation microscopique est homogène partout et non seulement sur le bord ∂V du VER on obtient alors l'estimation de Voigt :

$$C_{Voigt} = \frac{1}{V_{VER}} \int_{VER} C(x) \quad dV \tag{2.5}$$

En posant que la contrainte microscopique est homogène partout et non seulement sur le bord ∂V du VER on obtient alors l'estimation de Reuss :

$$C^{-1}_{Reuss} = \frac{1}{V_{VER}} \int_{VER} C^{-1}(x) \quad dV \tag{2.6}$$

Ceci nous donne deux bornes grossières (dites du premier ordre) encadrant le comportement effectif :

$$C_{Reuss} \leq C_{eff} \leq C_{Voigt}$$

D'autres auteurs ont par la suite introduit des estimations plus sophistiquées et plus précises : estimation de Hashin-Shtrikman, estimation de Mori-Tanaka et modèle autocohérent.

Par soucis de concision et vue l'abondante littérature existante, on ne détaillera pas les approches classiques pour définir le module effectif d'un matériau hétérogène.

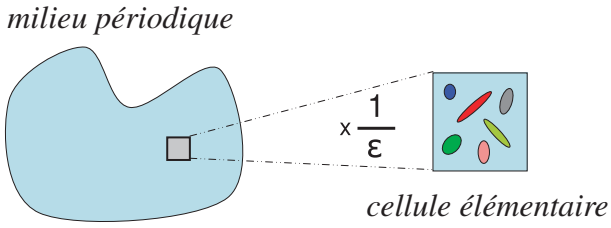


FIG. 2.3 – Milieu périodique, définition d'une cellule élémentaire.

2.1.2 Approche asymptotique

L'approche asymptotique consiste essentiellement en l'étude de l'influence de petits paramètres sur la solution du problème global. Dans ce type d'approche on fait l'hypothèse que le milieu est parfaitement périodique et que les échelles sont infiniment séparées. Ceci se traduit en pratique par des coefficients caractéristiques du matériau $C^\varepsilon(x)$ (conduction thermique, tenseur d'élasticité, ...) *périodiques de période* εP avec un $\varepsilon \longrightarrow 0$. Le facteur ε représentant le rapport entre la dimension du VER et la dimension de l'échelle macro.

On définit alors un espace auxiliaire de variables y reliées à x, la variable d'espace, par la relation d'échelle $y = x/\varepsilon$. Le champ solution de notre problème (déplacement, température, ...) s'écrit alors sous la forme d'un développement asymptotique de la forme :

$$u^\varepsilon(x) = u^0(x) + \varepsilon u^1(x,y) + \varepsilon^2 u^2(x,y) + \ldots \qquad y = x/\varepsilon \tag{2.7}$$

Où les termes $u^i(x,y)$ sont P périodiques en y. Comme dans la pratique seuls les deux premiers termes sont pris en considération, le champ $u^\varepsilon(x)$ se compose d'une fonction régulière de x plus un terme plus petit (d'un facteur ε) d'une fonction fortement oscillante (Fig. 2.4).

On redéfinit aussi l'opérateur gradient qui s'écrit sous la forme :

$$\nabla = \nabla x + \frac{1}{\varepsilon}\nabla y \tag{2.8}$$

Sous ces hypothèses, un problème mécanique d'élasticité linéaire en petites déforma-

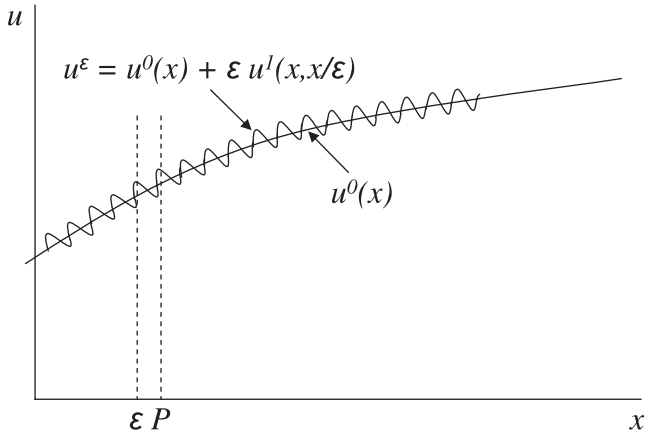


FIG. 2.4 – Développement asymptotique du champ solution

tions s'écrit sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} -\nabla\cdot\sigma(u^\varepsilon(x)) &= f(x) && dans\Omega \\ \sigma(u^\varepsilon(x)) &= C(x/\varepsilon)\, E(u^\varepsilon(x)) && dans\Omega \\ u^\varepsilon(x) &= \varphi(x) && sur\ \partial\Omega \end{aligned} \tag{2.9}$$

avec, comme pour $u^\varepsilon(x)$, les développements asymptotiques de la déformation $E(u^\varepsilon)$ et de la contrainte $\sigma(u^\varepsilon)$ que l'on substituera dans les équations (2.9) :

$$\begin{aligned} E(u^\varepsilon) &= E^0(x,y) \,+\, \varepsilon\, E^1(x,y) \,+\, ... \\ \sigma(u^\varepsilon) &= \sigma^0(x,y) \,+\, \varepsilon\, \sigma^1(x,y) \,+\, ... \end{aligned} \tag{2.10}$$

Ceci revient à résoudre les équations suivantes obtenues en identifiant à zéro les puissances successives de ε) :

- à l'ordre ε^{-1}, on a l'équation régissant le comportement microscopique :

$$\frac{\partial \sigma^0_{ij}}{\partial y_j} = 0 \tag{2.11}$$

- à l'ordre ε^0, on a l'équation régissant le comportement macroscopique :

$$-\frac{\partial \sigma_{ij}^0}{\partial x_j} - \frac{\partial \sigma_{ij}^1}{\partial y_j} = f_i \tag{2.12}$$

Qui devient après l'application de l'opérateur moyenne

$$-\frac{\partial \langle \sigma \rangle_{ij}^0}{\partial x_j} = f_i \tag{2.13}$$

En résumé :

- On résout d'abord l'équation régissant le comportement microscopique, avec les conditions aux limites périodiques. Cela nous permet d'évaluer la raideur homogénéisée.
- La raideur homogénéisée nous permet de résoudre l'équation régissant le comportement macroscopique, avec les conditions aux limites correspondantes.
- Avec la solution l'équation macroscopique, $u^0(x)$, on peut calculer le champ micro $u^1(x,y)$.

Il s'agit d'une stratégie multi-échelle efficace et très répandue, mais qui montre ses limites pour les milieux non périodiques. Également, si l'on s'intéresse aux solutions homogénéisées près des frontières de la structure, un traitement différent est exigé [16]. Une autre limite de la théorie est due à sa nature asymptotique ($\varepsilon \longrightarrow 0$), qui la rend inadaptée pour les cas où les échelles ne peuvent pas être considérées comme infiniment séparées

2.2 Approches numériques basées sur la théorie de l'homogénéisation

L'application analytique de la théorie de l'homogénéisation étant très complexe pour des cas autres que les cas simples, les recherches se sont orientées vers son couplage avec la méthode des éléments finis.

2.2.1 Simulation directe de la microstructure

Une manière de résoudre des problèmes d'homogénéisation est d'employer des techniques de simulation numérique sur des échantillons de microstructures. Dans ce cas, la notion de VER est d'importance primordiale. Habituellement considéré comme un volume de matériel hétérogène incluant efficacement un prélèvement de toutes les hétérogénéités, le VER doit inclure un grand nombre d'hétérogénéités micro (grains, inclusions, vides, fibres, etc...). Il doit cependant rester assez petit pour être considéré comme un volume élémentaire. De plus la réponse du VER doit être indépendante du type de conditions aux limites prescrites sur son bord (contrainte moyenne ou effort moyen donnée), ceci plaide en faveur d'un VER de grande taille. On retrouve un exemple de cette utilisation ainsi qu'une discussion autour de la taille optimale d'un VER dans [30].

2.2.2 Méthodes multi-niveaux

Une avancée intéressante fut de coupler la simulation de microstructure et de l'inclure directement dans la simulation des structures macroscopiques, ceci a donné les méthodes multi-niveaux.

Méthodes multi-niveaux de type I : Plusieurs auteurs [50], [18], [60] nous proposent de remplacer la loi de comportement macroscopique (très utile pour rendre compte de phénomènes non linéaires ou purement microscopiques) par des calculs sur la microstructure sous forme de sous domaines associés aux points d'intégration. La procédure se déroule comme suit 2.5 :

- Assigner à chaque point macroscopique approprié (en fait un point d'intégration dans le maillage éléments finis macroscopique) un VER unique.
- Calculer le tenseur de déformation macroscopique à partir d'une évaluation des déplacements nodaux macroscopiques, et imposer les déplacements appropriés aux bords de la cellule unitaire de telle manière que le tenseur de déformation moyen sur le VER est égal au tenseur de déformation macroscopique (localisation)
- Calculer les champs non uniformes de contrainte et de déformation résultants dans les VER qui sont le résultat des déplacements prescrits aux bords

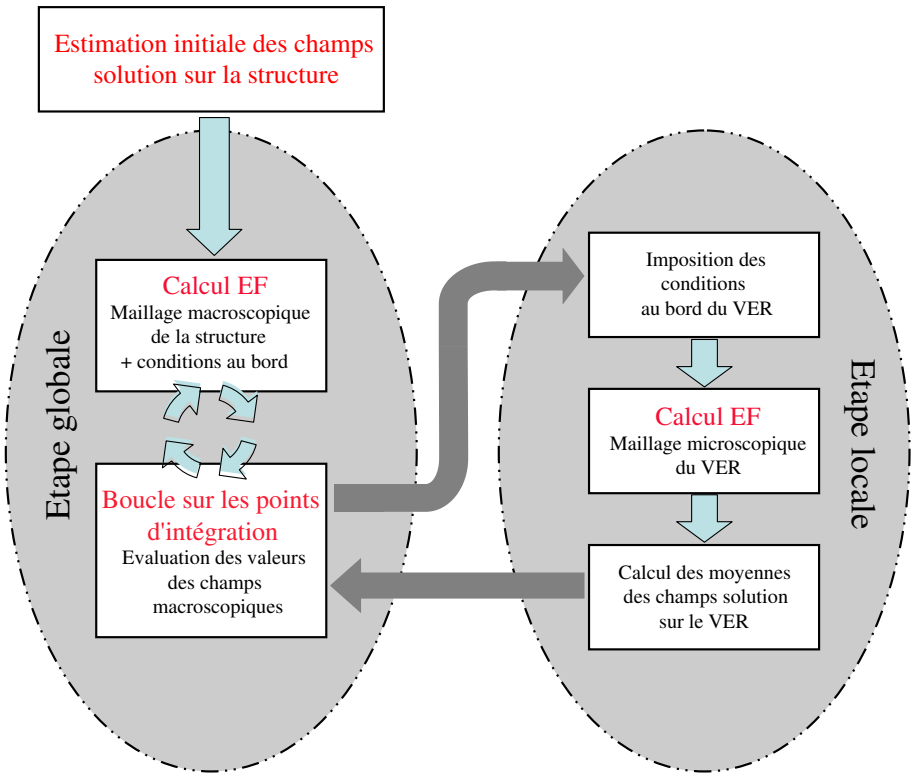


FIG. 2.5 – Stratégie des méthodes EF multi-niveaux

- Calculer la contrainte moyenne dans le VER, le résultat donne la contrainte macroscopique locale (homogénéisation)

Apparemment, la méthode d'homogénéisation ci-dessus découple le champ macroscopique de déplacement de celui microscopique. L'imposition des conditions au bord du VER se fait par une simple hypothèse de périodicité dans [18]. Dans [50] on pose des conditions au bord cinématiques et naturelles combinées pour tenir compte de la continuité de la contrainte sur la frontière et de la compatibilité (issue de l'hypothèse de périodicité du VER).

Dans [60] les auteurs vont plus loin. Ils revisitent la stratégie multi-niveaux sous l'appellation "The Heterogeneous Multiscale Method", on est plus obligé d'avoir recours à la méthode des éléments finis. On définit deux solveurs, l'un macroscopique (volumes finis, éléments finis ...), l'autre microscopique (éléments finis, dynamique moléculaire (MD), Quasicontinuum Method (QC)), puis la démarche à suivre reste sensiblement similaire :

- Identifier les variables et la structure du problème à l'échelle macroscopique : lois de conservation, procédés de diffusion ...
- Exprimer le modèle à l'échelle microscopique sous une forme conforme à la structure identifiée à l'échelle macroscopique. Cela sert de base pour relier les modèles à l'échelle macroscopique et à l'échelle microscopique.
- Choisir le solveur à l'échelle macroscopique, et identifier les données qui doivent être estimées à partir du solveur à l'échelle microscopique.
- Concevoir le solveur contraint à l'échelle microscopique, qui donne les données nécessaires. (techniquement, c'est l'étape la plus difficile.)

Malgré des résultats significatifs, cette approche est confrontée à quelques problèmes. Le coût des calculs est énorme : on est dans un processus itératif qui nécessite qu'on conduise autant de simulations microscopiques que de point d'intégration dans le problème macroscopique à chaque estimation de la solution. De plus, si l'on s'intéresse à l'état microscopique, rien n'est fait pour assurer une bonne solution sur les bords des sous domaines microscopiques (VER). Enfin, il parait irréaliste à l'heure actuelle de vouloir introduire plus que deux échelles de comportement.

Méthodes multi-niveaux de type II : Une autre vision des méthodes multi-niveaux est de les aborder au sens d'une superposition d'éléments macroscopiques et microscopiques [20] [44] [58].

L'idée de superposer des maillages EF n'est pas nouvelle, l'auteur dans [20] la propose en 1992 sous l'appellation "Finite element mesh superposition method" (S-FEM) comme une méthodologie pour améliorer la qualité des calculs éléments finis dans les régions où les erreurs sont inacceptables. A la différence des techniques adaptatives préexistantes, où soit le maillage est raffiné (h-version), soit l'ordre du polynôme est augmenté (p-version), ou bien la combinaison des deux (hp-version), la s-version augmente la résolution par superposition d'un ou plusieurs maillages additionnels de forme arbitraire. La continuité C0 du champ de déplacement est maintenue en imposant des conditions de bord homogènes sur le champ superposé dans la partie de la frontière qui n'est pas contenu dans la frontière du problème.

Cette idée est reprise dans [58], où les auteurs nous proposent d'associer l'homogé-

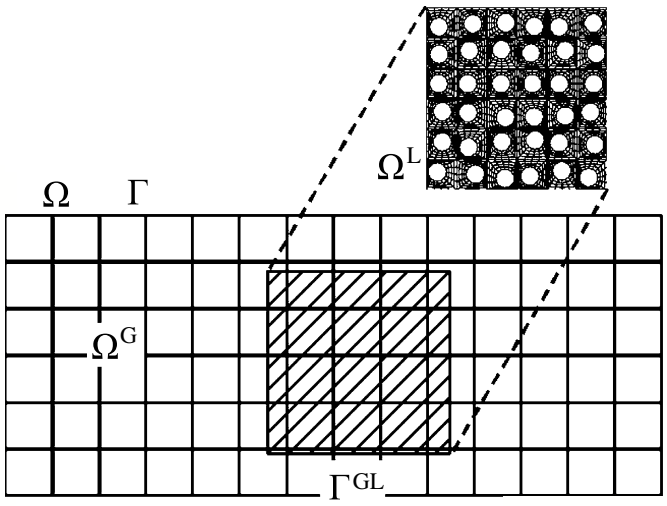


FIG. 2.6 – Superposition de maillages S-FEM

néisation asymptotique et la superposition de maillage pour traiter des problèmes où la condition de séparation d'échelle est satisfaite entre la microstructure et le problème macroscopique, mais où une échelle intermédiaire (représentant défauts, fissure et autres) doit être prise en compte dans la simulation. Certaines restrictions sont alors imposées à la méthode S-FEM.

Si on écrit le déplacement, en adoptant l'indice G pour le maillage global et l'indice L pour le maillage local (Fig. 2.6), sous la forme :

$$u = \begin{cases} u^G & sur \Omega^G, \Gamma^{GL} \\ \\ u^G + u^L & sur \Omega^L \end{cases} \tag{2.14}$$

La méthode S-FEM permettant des maillages de tailles différentes, la connexion entre les champs de déplacement microscopiques et macroscopiques se fait par le biais des fonctions de forme des deux maillages. La continuité est assurée sur le bord Γ^{GL} par :

$$u^L = 0 \qquad sur \Gamma^{GL}$$

Les relations constitutives sont données par :

$$\sigma = \begin{cases} C^G B^G u^G & sur \Omega^G \\ \\ C^L (B^G u^G + B^L u^L) & sur \Omega^L \end{cases} \tag{2.15}$$

Où C, B sont les tenseurs contrainte déformation et déformation déplacement respectivement.

On arrive à écrire la relation suivante :

$$\begin{bmatrix} K^G & K^{GL} \\ \\ (K^{GL})^T & K^L \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u^G \\ \\ u^L \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} f \\ \\ 0 \end{Bmatrix} \tag{2.16}$$

Les matrices de rigidité K^G et K^L sont calculées en utilisant les maillages macroscopiques et microscopiques, respectivement. Le couplage entre les deux maillages est exprimé par K^{GL}. Par conséquent, la méthode S-FEM est avantageuse par rapport aux méthodes de raffinement conventionnelles. Il faut cependant relever quelques problèmes dans cette technique (dus à la nature multi-échelle du problème) :

- l'intégration numérique liée à K^G et K^{GL} est à effectuer avec beaucoup de soins, cela est dû à la différence significative de taille entre les maillages.
- dans les régions où il y a superposition, les équations d'équilibre microscopiques et macroscopiques sont résolues simultanément. Par conséquent la consistance entre ces équations est essentielle. Ceci impose d'utiliser une technique d'homogénéisation (avec toutes les restrictions que cela impose) pour prédire correctement le comportement macroscopique.
- enfin, la discontinuité au bord Γ^{GL} entre le modèle macroscopique et celui microscopique conduit à une marge d'erreur non négligeable autour de Γ^{GL}.

Les auteurs de la méthode "Arlequin" [44] [7] [9] ont une vision plus large et ne parlent pas de superposition de maillage mais de superposition de modèles.

Les différentes zones nécessitant des niveaux d'analyse différents, sont chacune associée à un modèle qui peut être de nature diverse (analytique, numérique, mécanique, physico-chimique, ...). Les domaines de ces modèles ne sont pas astreints à présenter,

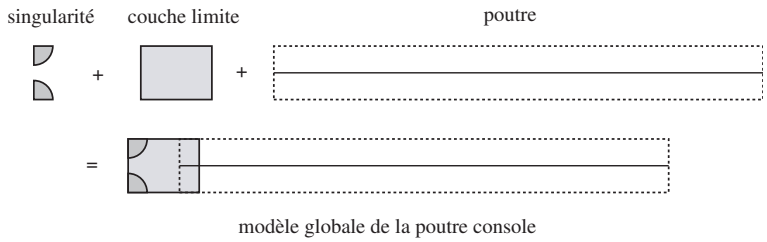


FIG. 2.7 – Exemple de modélisation Arlequin

entre eux, des interfaces géométriquement compatibles, mais peuvent se recouvrir totalement ou partiellement. Une particularité de la méthode Arlequin est alors de raccorder ces modèles, non pas sur une frontière (comme cela se fait classiquement), mais dans le volume. De cette façon, dans les zones de coexistence, la modélisation globale est obtenue par le mélange de plusieurs modélisations (Fig. 2.7).

Le déplacement dans cet exemple est représenté par le triplet ($u_{poutre}, u_{couchelimite}$, $u_{singularite}$) sous la forme :

$$u = \begin{cases} u_{poutre} & sur\ (\Omega_{poutre} - \Omega_{couchelimite}) \\ \alpha\, u_{poutre} + (1-\alpha)\, u_{couchelimite} & sur\ (\Omega_{poutre} \cap \Omega_{couchelimite}) \\ u_{couchelimite} & sur\ (\Omega_{couchelimite} - (\Omega_{poutre} \cup \Omega_{singularite})) \\ \beta\, u_{couchelimite} + (1-\beta)\, u_{singularite} & sur\ \Omega_{singularite} \end{cases}$$

Où α, β sont des valeurs comprises entre 0 et 1.

Pour raccorder les modèles, l'idée est d'activer des forces fictives de couplage contrôlant, sur les zones de recouvrement, l'écart entre leurs états mécaniques (déplacement, déformations, contraintes, ...). Toutefois, pour que chacun des modèles puisse exprimer sa richesse propre, ces écarts sont mesurés de manière affaiblie et à l'aide d'opérateurs moyennant. Dans la formulation, pour ne pas compter plusieurs fois l'énergie du système global dans la zone de recouvrement, chacun des travaux virtuels associés à un modèle est pondéré par une fonction (α, β) dite de pondération ou de mélange. L'ensemble de ces fonctions forme une partition de l'unité sur le domaine d'étude. Ces fonctions représentent

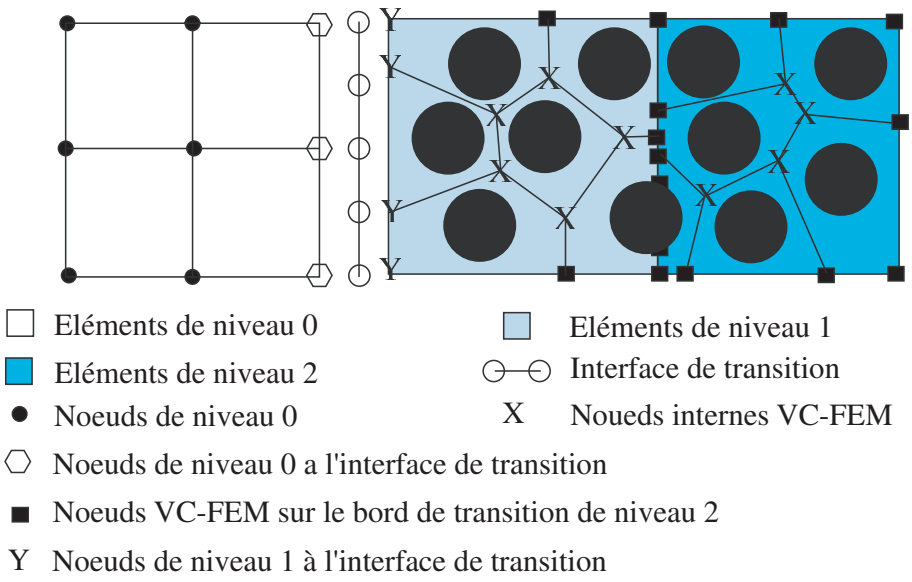


FIG. 2.8 – Exemple de stratégie multi-niveaux basée sur la méthode VC-FEM

un ingrédient important de la méthode, puisqu'elles définissent le niveau de mélange entre les modèles dans la zone de recouvrement. De plus, suivant leurs valeurs, elles précisent quelle part de confiance et de pertinence est accordée à chacun des modèles.

Cette modélisation est pour le moins séduisante, mais le choix des fonctions de pondération reste assez délicat et dépend de l'expérience et du savoir faire de l'utilisateur.

Méthodes multi-niveaux de type III : La démarche multi-niveaux peut être perçue au sens du mélange d'éléments macroscopiques et microscopiques. Les auteurs dans [45] abordent l'application de l'esprit multi-niveaux dans ce sens. Ils proposent un modèle multi-niveaux adaptatif. Le domaine global est décomposé en un ensemble de sous domaines non intersectés ouverts, le modèle se base sur trois niveaux essentiels (Fig. 2.8) :

- un domaine purement macroscopique (niveau 0).
- un domaine micro-macro basé sur la répétition périodique d'un VER (niveau 1).
- un domaine purement microscopique où le VER cesse d'exister et où la microstructure doit être modélisée (niveau 2).

Une analyse macroscopique pure avec des propriétés homogénéisées (modules effectifs) et une formulation régularisée du problème est conduite dans la région de niveau 0.

La microstructure et le VER correspondant peuvent changer d'un élément à un autre, de ceci résultera différents modules effectifs pour différents éléments. Le modèle peut commencer par la prétention que tous les éléments appartiennent au sous domaine de niveau 0. Des techniques de raffinement et d'adaptation du maillage sont mises en oeuvre pour affiner la solution autant que possible.

Le sous domaine de niveau 1 est introduit dans les régions de niveau 0 où le gradient des variables macroscopiques est localement élevé. Des analyses concourantes du problème macroscopique régularisé et du problème micromécanique basé sur le VER périodique sont conduites dans ce sous domaine pour déterminer la nécessité du passage au domaine de niveau 2. On introduit alors le sous domaine de niveau 2, qui représente la microstructure hétérogène arbitraire. Tous les calculs sont conduits en utilisant une discrétisation en éléments finis adaptatifs basée sur les cellules de Voronoi [27] [28] [26](adaptive Voronoi cell finite element VC-FEM).

Dans cette méthode on est confronté à un coût de calcul élevé sur le domaine entièrement microscopique, ceci pose des restrictions à son utilisation (calculateur parallèle).

2.3 Autres approches

Certaines approches des problèmes multi-échelles n'exploitent pas directement la théorie d'homogénéisation classique (on peut cependant y retrouver quelques ingrédients et similitudes). Ces approches sont intéressantes dans le fait qu'elles s'affranchissent de certaines limitations intrinsèques liées à l'homogénéisation.

2.3.1 Discrétisation microscopique, décomposition de domaine

Cette démarche consiste en l'utilisation d'une discrétisation microscopique totale du problème globale. On peut voir cette stratégie comme multi-niveaux car on est obligé d'avoir des stratégies hiérarchiques avec des *super éléments* homogénéisés pour que le coût du calcul ne soit pas prohibitif.

Dans cette perspective, les auteurs de [34][31] nous proposent une méthode se caractérisant par une subdivision du domaine d'étude. La structure est modélisée comme un

assemblage de sous structures (Ω_E) et d'interfaces (Γ_{EE}) servants au transfert de la distribution de l'effort et du déplacement entre les sous structures, chaque constituant a ses propres variables et ses propres équations (Fig. 2.9).

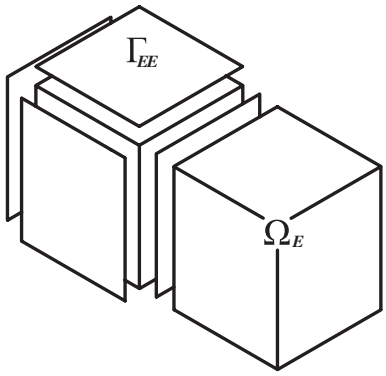


FIG. 2.9 – Décomposition en sous domaines et interfaces

Les inter-efforts F_E sur les interfaces et les déplacements u_E sont décrits sur les deux échelles :

$$F_E = F_E^M + F_E^m$$
$$u_E = u_E^M + u_E^m \tag{2.17}$$

Les inter-efforts et déplacements microscopiques (F_E^m, u_E^m) ne sont pas assujettis à vérifier a priori les conditions de transmission sur (Γ_{EE}) même partiellement, par contre les quantités macroscopiques (F_E^M, u_E^M) le sont.

Pour résoudre le problème ainsi posé, une stratégie itérative basée sur la méthode LATIN est mise en oeuvre. Chaque itération comporte deux étapes :

- une étape locale (possiblement non linéaire) : consiste à satisfaire un jeu d'équations, exprimant pour chaque sous structure le comportement du matériau et le comportement aux deux échelles des interfaces.
- une étape globale linéaire : il s'agit de vérifier un jeu d'équations exprimant l'admissibilité et l'équilibre sur les sous structures. On doit avoir un champ de contraintes sur (Ω_E) en équilibre avec les efforts sur les interfaces (Γ_{EE}), et un champ de déplacements sur (Ω_E) compatible avec les déplacements sur (Γ_{EE}).

  Cette vérification est conduite aux échelles microscopique et macroscopique du pro-

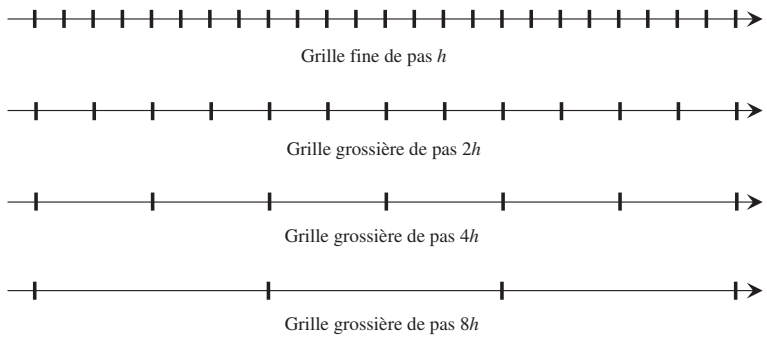


FIG. 2.10 – Exemple de grilles hiérarchiques pour une résolution multigrille (cas 1D)

blème. Sur cette dernière échelle, le problème peut être interprété comme un problème homogénéisé sur la sous structure portant sur des quantités macroscopiques effectives.

Cette technique apparentée aux méthodes de décomposition de domaine est assez lourde en terme de calcul, mais aussi bien adaptée aux architectures parallèles.

2.3.2 Méthode multigrille

La méthode multigrille correspond à une stratégie de calcul itératif particulièrement efficace, proposée initialement pour la résolution de problèmes elliptiques linéaires discrétisés sur des grilles régulières raffinées.

Pour présenter simplement la méthode, on se limite au problème linéaire discret posé sur 2 grilles [51], cette procédure peut être étendue sur autant de grilles que nécessaire (Fig. 2.10) :

$$A\,U_h = F_h$$

Dans ce cas la méthode se compose de deux phases :

- une phase de lissage, correspondant à deux ou trois itérations d'une méthode de relaxation, permettant de réduire les hautes fréquences de l'erreur lorsque l'on décompose celle-ci dans la base des vecteurs propres.
- une phase de correction sur grille grossière qui traite efficacement les basses fréquences de l'erreur. Un mode basse fréquence sur la grille fine se transforme en un mode oscillant sur la grille grossière et sera bien lissé par une méthode de relaxation.

Soit u_h l'estimation obtenue en phase 1 de la solution U_h du problème, $r_h = F_h - A\,u_h$ le résidu. La seconde phase de la méthode consiste alors à :

- définir la restriction r_H du résidu r_h sur la grille grossière à l'aide d'un opérateur de restriction.
- résoudre le système linéaire $A\,V_H = r_H$, donnant la correction V_H sur la grille grossière.
- prolonger V_H obtenue sur la grille grossière en une fonction sur la grille fine, par exemple par interpolation.

La méthode multigrille est adapté dans [21] [22] à l'étude du comportement mécanique de pièces constituées de matériaux composites périodiques. Pour ces problèmes, les auteurs constatent que les opérateurs classiques de prolongement/restriction donnent une mauvaise approximation des composantes basses fréquences de la solution, et proposent une nouvelle expression de ces opérateurs choisie de sorte que le problème sur la grille grossière soit posé avec les propriétés du matériau homogénéisé.

2.3.3 Enrichissement de l'interpolation éléments finis :

Un autre ensemble d'approches récentes cherche à adapter le cadre de la méthode des éléments finis classique, pour pouvoir résoudre des problèmes multi-échelles avec des discrétisations relativement grossières. L'idée consiste à enrichir l'espace d'interpolation éléments finis à l'aide de fonctions qui traduisent une connaissance à priori du comportement local de la solution.

Une des principales approches dans l'enrichissement a été proposée par Babuska et al. sous le nom de "partition de l'unité" (The partition of unity finite element method PU-FEM)[40] [3]. Cette approche offre un cadre simple pour enrichir les espaces d'approximation construits par la méthode des éléments finis, en y ajoutant des fonctions de nature à priori quelconque. Dans le but de localiser cet enrichissement et d'obtenir des champs continus, les auteurs pondèrent les fonctions d'enrichissement par les fonctions de forme éléments finis. Sur chaque élément fini enrichi, le champ de déplacement global de la forme :

$$u(x) = u_H(x) + \delta u_h(x).$$

s'écrit alors avec :

$$u_H(x) = \sum_i u_i \ \varphi_i(x)$$

$$\delta u_h(x) = \sum_i (\sum_j \alpha_{ij} \ f_j(x)) \ \varphi_i(x)$$

Où $f(x)$ représente la fonction d'enrichissement, et $\varphi(x)$ les fonctions de forme éléments finis standard constituant une partition de l'unité.

$$\sum_i \varphi_i(x) = 1$$

Cette approche constitue le point de départ pour plusieurs méthodes. Parmi elles la méthode des éléments finis généralisés (The generalized finite element method GFEM) [53] [52]. L'auteur introduit la notion de fonctions référence ou "handbook functions", connues analytiquement ou générées numériquement, qui reflètent le caractère de la solution dans le domaine ou à proximité bords, inclusions, trous, fissures ... Ces fonctions sont définies comme les solutions de problèmes de référence dont on connaît a priori la géométrie et les conditions aux limites, elles sont utilisées pour l'enrichissement dans le cadre de la méthode de la partition de l'unité.

La mise en oeuvre pratique de cette approche soulève certaines difficultés. Les fonctions spéciales d'enrichissement peuvent être quasi linéairement dépendantes des fonctions de base éléments finis, imposant de recourir à des techniques de factorisation partielle ou à des stratégies de régularisation. D'autre part, des schémas d'intégration adaptatifs sont introduis pour contrôler l'erreur d'intégration numérique afin que les fonctions spéciales soient correctement prises en compte.

Une autre méthode dérivée de la partition de l'unité est la méthode des éléments finis étendus (Extended Finite Element Method X-FEM) [6] [55] [56]. Elle s'adresse à des problèmes où diverses discontinuités (fissures, trous, interfaces) sont introduites dans le modèle éléments finis classique sans en modifier le maillage. Les interfaces Γ sont décrites en s'appuyant sur la technique des "level set" par une fonction distance signée $\psi_\Gamma(x)$ telle que :

$$\psi_\Gamma(x) = \begin{cases} d(x,\Gamma) & \textit{si x se situe dans la région extérieur de } \Gamma \\ \\ -d(x,\Gamma) & \textit{dans le cas contraire} \end{cases}$$

La méthode X-FEM offre une grande souplesse pour introduire des discontinuités, une application particulièrement intéressante concerne la propagation de fissures dans un modèle éléments finis indépendamment de son maillage.

2.4 Conclusion

Dans ce chapitre, on a passé en revue différentes stratégies destinées au calcul multi-échelles. Un grand nombre de méthodes reprennent la philosophie des techniques classiques d'homogénéisation tandis que d'autres radicalement différentes tentent d'améliorer les techniques de modélisation classiques pour qu'elles prennent en compte les effets à plusieurs échelles. Chacune des méthodes présentées est bien adaptée à une classe de problèmes. Celles qui se veulent plus généralistes souffrent souvent d'un coût de calcul élevé, partiellement compensé par leurs aptitudes au parallélisme.

A la lumière de cela, nous allons nous intéresser à présent à la présentation de la méthode de modélisation 95/5 que l'on peut classifier comme une nouvelle vision multi-niveaux des problèmes multi-échelles.

Chapitre 3

Présentation de l'approche proposée : la méthode 95/5

Dans le chapitre précédent on a dressé un aperçu des techniques et stratégies diverses du calcul multi-échelles. Des questions essentielles se posent :

- pourquoi développer une nouvelle méthode de modélisation ?
- pour quelles applications ?

3.1 Modélisation adoptée et motivations

Dans le cadre de la simulation des procédés de fabrication, on s'intéresse généralement à des problèmes multi-échelles de *type C*, où la majeure partie du domaine étudié peut être représentée par un modèle relativement grossier et où seules quelques zones relativement petites nécessitent une modélisation aux échelles inférieures. La stratégie développée se doit de présenter les mêmes avantages que celles passées en revue dans le chapitre 2, tout en évitant les insuffisances. Nous cherchons à obtenir :

- Une modélisation multi-échelle permettant d'effectuer des simulations macroscopiques sans connaissance sur le matériau, l'information macroscopique nécessaire est extraite à partir du modèle microscopique sous-jacent.
- Une approche exploitant une discrétisation de la microstructure facilitant la modélisation de comportements non linéaires à l'échelle microscopique.

- Une modélisation de l'interaction entre les conditions aux bords à l'échelle microscopique et les transformations de la microstructure, tout en évitant une modélisation totalement microscopique du problème.
- Une cinématique unique du problème, les problèmes microscopiques et macroscopiques sont intrinsèquement liés et les champs microscopiques et macroscopiques sont confondus. Ceci permet d'éviter les questions de localisation et de choix des conditions aux limites pour les problèmes d'homogénéisation.
- Une modélisation généraliste, qui ne suppose pas certaines conditions comme la périodicité sur la microstructure.
- Une stratégie de résolution pouvant tirer profit de la puissance de calcul offerte sur des ordinateurs à architecture parallèle.

Nous proposons donc de limiter la description microscopique fine à quelques régions dans le système, dont la taille est très réduite par rapport au domaine entier, mais qui restent assez grandes pour représenter la microstructure locale. La description du champ de déplacements est simple et unique. Le nuage de noeuds pour la discrétisation du problème a simplement une densité plus élevée sur les zones couvertes par un modèle microscopique Ω_i, celles-ci sont entourées par le domaine complémentaire Ξ de densité nodale moindre ($(\cup\Omega_i) \cup \Xi = \Omega$) . Cela est décrit dans la figure Fig. 3.1.

Afin d'avoir une modélisation permettant d'effectuer des simulations macroscopiques sans l'utilisation de relations de comportements à cette échelle, une extension du comportement microscopique à l'échelle macroscopique dans le domaine complémentaire est mise en oeuvre. Pour cela, le comportement homogénéisé calculé dans chaque région microscopique est étendu à son voisinage immédiat, le prolongement au domaine complémentaire s'effectue via une interpolation. Le milieu complémentaire a un rôle particulier dans le modèle multi-échelles, parce qu'il assure le raccordement entre tous les modèles microscopiques.

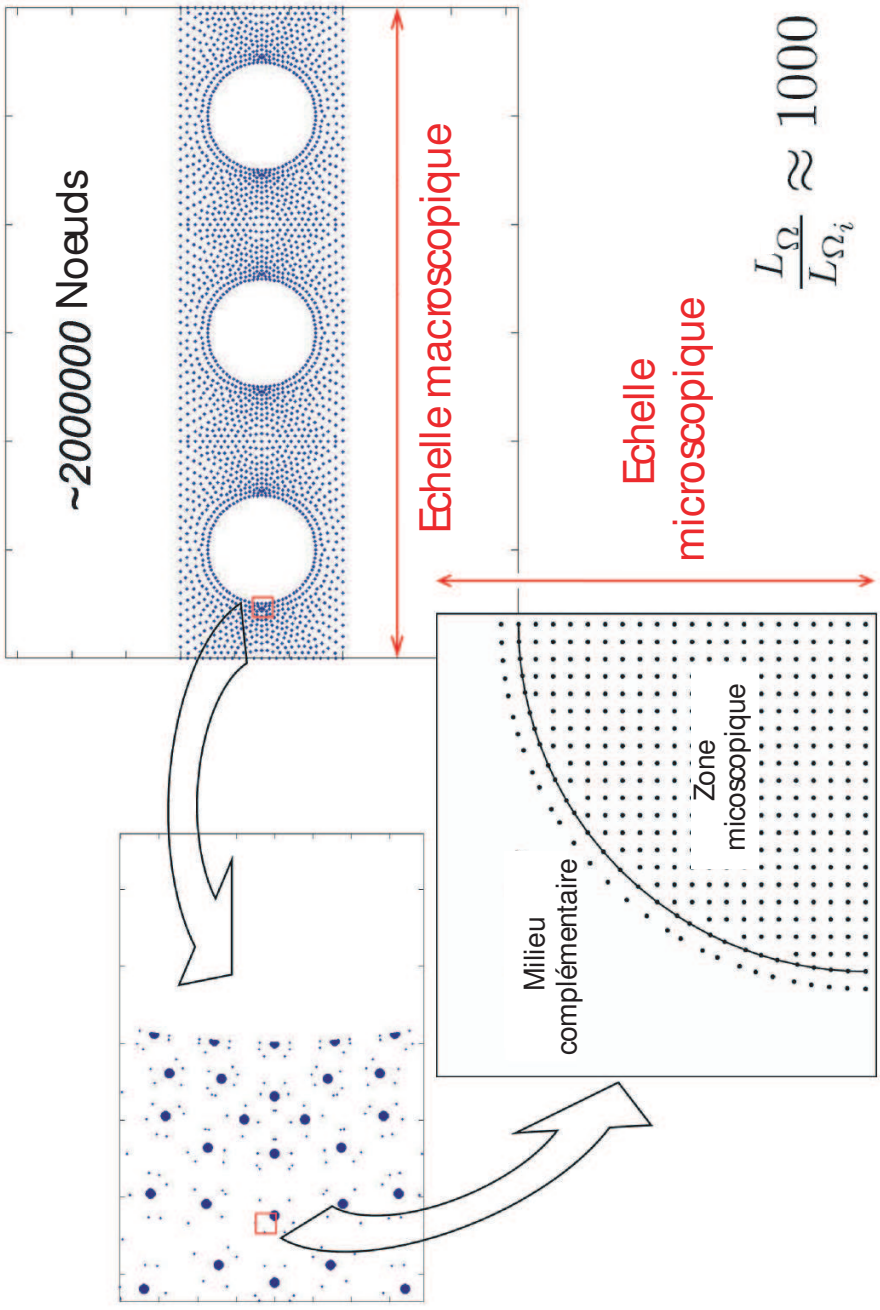


FIG. 3.1 – Distribution nodale dans les motifs microscopiques et dans le domaine complémentaire.

3.2 L'extension du comportement microscopique à l'échelle macroscopique

Il est nécessaire de quantifier et de lier les grandeurs macroscopiques pour conduire une simulation multi-échelles. Afin de définir ce comportement on rencontre dans les techniques courantes de calcul micro/macro plusieurs approches :

- Des lois de comportement distinctes, théoriques ou empiriques, pour chaque échelle (méthodes de type homogénéisation, superposition).
- Le comportement macroscopique n'est pas explicite et est déduit par une moyenne des grandeurs microscopiques sous-jacentes (cas des méthodes multi-niveaux de type FE^2). Ceci est dû au fait que les zones microscopiques sont localisées aux points d'intégration du problème macroscopique.

Dans notre cas, on se propose de suivre une autre voie qui nous permettra un couplage total entre les échelles microscopique et macroscopique et un allègement considérable du calcul, étant donné que l'on est pas obligé de mettre des motifs microscopiques sous chaque point d'intégration. Ce travail se limite pour l'instant aux matériaux élastiques linéaires.

On assume que la loi de comportement est parfaitement définie à l'échelle microscopique à l'intérieur de chacun des modèles microscopiques. Dans le domaine complémentaire nous supposons que les variations spatiales des champs de contrainte et de déformation sont assez lisses, cette régularité des champs de contrainte et de déformation conditionne le nombre de domaines microscopiques nécessaires pour avoir une bonne estimation du comportement du milieu complémentaire. Comme nous le verrons dans les exemples numériques, notre approche marche bien dans le cas des petites et grandes longueurs de variation (dans le cas où la longueur de variation est inférieure à la taille des domaines microscopiques, et le cas où la longueur de variation est très grande par rapport à la taille des domaines microscopiques), le cas des longueurs de variations intermédiaires conduit à la dégénérescence de la méthode vers une modélisation entièrement microscopique en nécessitant un très grand nombre de domaines microscopiques.

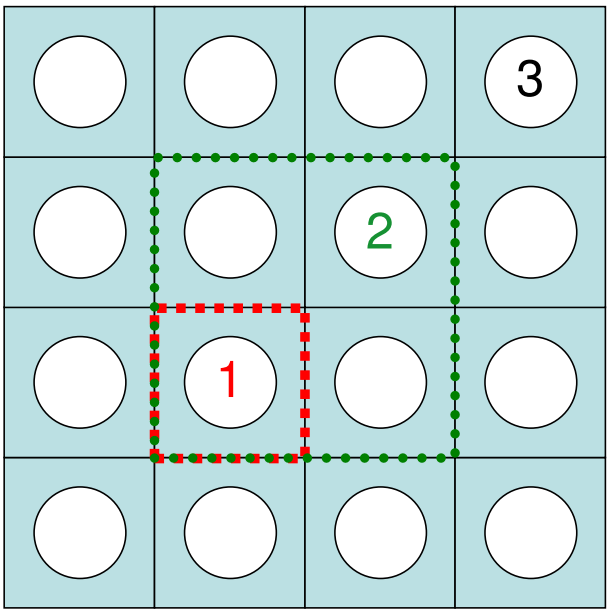


FIG. 3.2 – Structure périodique, les différents problèmes traités.

3.2.1 Influence des conditions aux bords sur la solution homogénéisée

On a présenté dans le chapitre 2 les problèmes liés à l'homogénéisation. Plus précisément, le fait que le problème mécanique soit *mal posé* dans le sens où on doit résoudre un problème de structure sans véritables conditions aux limites. Dans la pratique, on doit traiter des problèmes *bien posés* équivalents à ceux initiaux avec des conditions de moyenne sur les variables locales. Pour cela traditionnellement on a recours à trois approches :

- Problèmes avec condition de contrainte homogène au contour (CH).
- Problèmes avec condition de déformation homogène au contour (DH).
- Problèmes avec condition de périodicité (#).

Ces trois approches sont théoriquement équivalentes au problème initial avec des conditions de moyenne sur les variables locales. Cependant en pratique on constate que les résultats peuvent varier considérablement.

Afin d'illustrer ceci considérons le problème (inspiré d'un problème qu'on peut trouver sur [10]) d'homogénéisation de la structure Fig.3.2 composée d'éléments de base quadrilatères percés en leur centre, le matériau constitutif a un comportement élastique

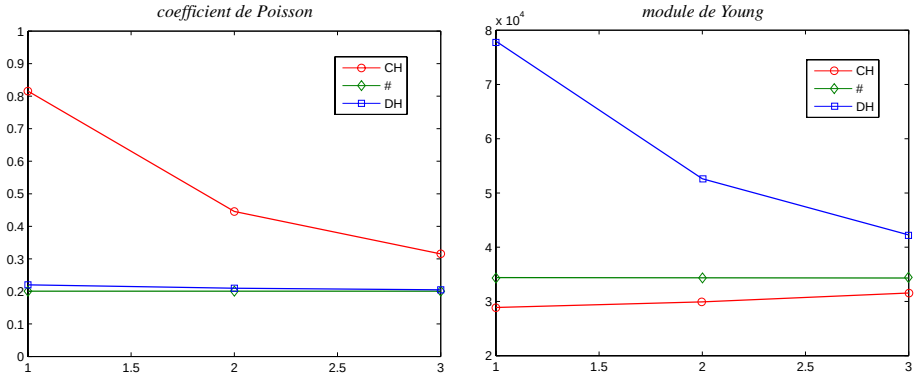


FIG. 3.3 – Module de Young et coefficient de Poisson homogénéisés.

isotrope. Cette structure est délibérément périodique de manière à avoir une solution exacte (#) qui servira de référence. On applique les trois approches (CH, DH, #) aux sous structures 1,2 et 3, et on détermine pour chaque structure les modules de Young et les coefficients de Poisson correspondants. Les résultats sont synthétisés sur les courbes Fig.3.3.

On observe une convergence des résultats des trois approches pour des structures de plus en plus grandes et contenant de plus en plus d'éléments de base. On peut montrer[57] que :

$$Lim_{N\to+\infty}\mathbf{C}_{DH} = Lim_{N\to+\infty}\mathbf{C}_{CH} = \mathbf{C}_{\#}. \tag{3.1}$$

Avec N le nombre d'éléments de base.

On peut aussi constater sur la figure Fig.3.4, représentant la forme de la distribution de la contrainte de cisaillement pour les trois approches, que la différence n'est sensible que près des bords où sont imposées les conditions aux limites.

Analyse de la situation : On note une sensibilité assez grande du comportement homogénéisé vis-à-vis des conditions aux limites. L'avantage de notre approche totalement couplée avec une cinématique unique est de pouvoir avoir les conditions aux limites réelles sur la frontière des domaines microscopiques et donc une réponse et un comportement homogénéisé plus réalistes que ceux calculés sur la base des problèmes DH, CH, #.

Cependant, cette connaissance des conditions aux limites réelles reste insuffisante pour définir le tenseur d'élasticité. En général on doit résoudre 3 problèmes indépen-

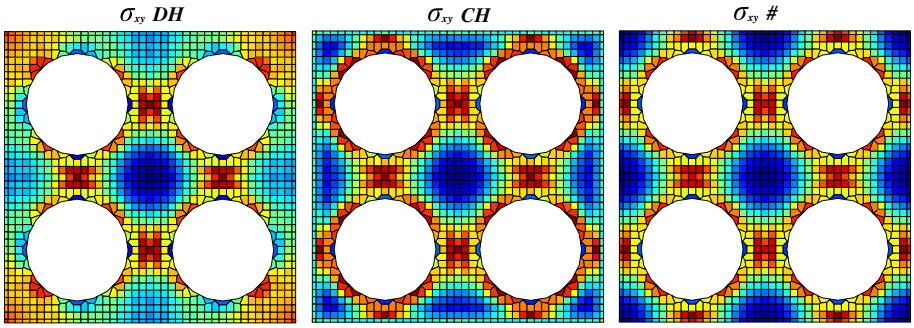


FIG. 3.4 – contrainte σ_{xy} pour les 3 types de conditions aux limites relatives à la même sollicitation moyenne.

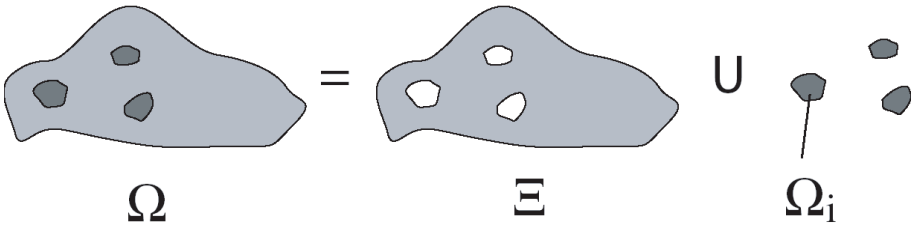


FIG. 3.5 – Décomposition du domaine : motifs microscopiques et domaine complémentaire.

dants pour avoir toutes les composantes du tenseur d'élasticité dans le cas 2D. On peut toutefois exploiter cette information pour minimiser l'erreur commise sur l'estimation du comportement homogénéisé.

3.2.2 L'approche proposée

Dans la modélisation que l'on propose, nous avons partitionné le problème Ω en zones microscopiques $(\Omega_i)_{i=1...m}$. Chaque Ω_i est un motif microscopique décrivant l'arrangement des constituants et leur comportement à l'échelle microscopique. Ces motifs sont noyés dans une matrice virtuelle ou milieu complémentaire Ξ,(Fig. 3.5).

Puisque la technique que nous proposons n'est pas en fait une méthode multi-niveaux au sens courant du terme, nous ne différencions pas les champs déplacements, de contrainte et de déformation entre le modèle microscopique et celui, macroscopique, associé au do-

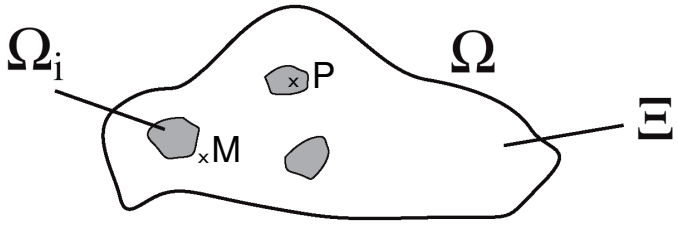


FIG. 3.6 – Définition des différents domaines.

maine complémentaire. Ainsi, nous différencions seulement la loi de comportement dans les zones à l'échelle microscopique Ω_i (où elle est parfaitement définie) et dans les zones à l'échelle macroscopique Ξ (obtenu par interpolation de celles homogénéisées dans les domaines microscopiques).

A chaque point $P \in \Omega_i$ le comportement élastique est décrit comme suit :

$$\sigma_{|P} = C(P)\,\varepsilon_{|P} \qquad \forall P \in \Omega_i \tag{3.2}$$

où C est le tenseur élastique microscopique local. Ce tenseur est parfaitement définit sur Ω, en dépit du fait que l'on ne peut avoir son expression explicitement qu'à l'intérieur des domaines microscopiques.

Maintenant considérons le domaine microscopique Ω_i, dont le bord est noté $\partial\Omega_i$. On utilise une méthode d'homogénéisation classique avec condition de déformation homogène au contour (DH) : on applique les 3 champs de déplacement représentés dans la figure (Fig. 3.7).

Il est simple de démontrer (par le théorème de Stokes) que le fait d'appliquer les champs de déplacement :

$$U_d(\mathbf{x} \in \partial\Omega_i) = \begin{pmatrix} x \\ 0 \end{pmatrix},\ U_d(\mathbf{x} \in \partial\Omega_i) = \begin{pmatrix} 0 \\ y \end{pmatrix},$$
$$U_d(\mathbf{x} \in \partial\Omega_i) = \begin{pmatrix} y \\ x \end{pmatrix},\ \textit{sur } \partial\Omega_i$$

donne respectivement les déformations moyennes

$$\langle\varepsilon\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \textit{dans } \Omega_i. \quad \langle\varepsilon\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \textit{dans } \Omega_i. \quad \langle\varepsilon\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \textit{dans } \Omega_i.$$

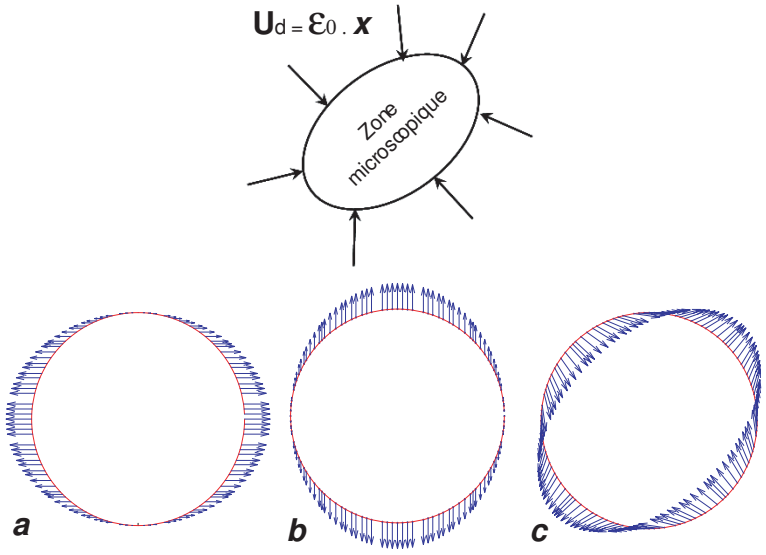


FIG. 3.7 – Condition de déformation homogène au contour.

$$\text{a. } U_d = \begin{pmatrix} x \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{b. } U_d = \begin{pmatrix} 0 \\ y \end{pmatrix} \quad \text{c. } U_d = \begin{pmatrix} y \\ x \end{pmatrix}$$

A chaque cas de conditions aux limites correspond des champs de contrainte et de déformation solution du problème élastique ainsi défini. Les valeurs moyennes des contraintes et des déformations, évaluées sur Ω_i sont notées $\langle\sigma\rangle_i^{DH}$ et $\langle\varepsilon\rangle_i^{DH}$ respectivement :

$$\langle\sigma\rangle_i^{DH} = \frac{1}{|\Omega_i|} \int_{\Omega_i} \sigma_{|P} \; dP \tag{3.3}$$

$$\langle\varepsilon\rangle_i^{DH} = \frac{1}{|\Omega_i|} \int_{\Omega_i} \varepsilon_{|P} \; dP \tag{3.4}$$

où $|\Omega_i|$ est l'aire (volume en 3D) de Ω_i.

La technique d'homogénéisation classique (DH) employée définit le tenseur élastique homogénéisé $\widehat{C}_i^{DH}$ tel que :

$$\langle\sigma\rangle_i^{DH} = \widehat{C}_i^{DH} \langle\varepsilon\rangle_i^{DH} \tag{3.5}$$

On note ainsi que les valeurs moyennes des contraintes $\langle\sigma\rangle_i^{DH}$ associées aux solutions du problème élastique décrit par la figure (Fig. 3.7), définissent les colonnes de la matrice représentative du tenseur de comportement homogénéisé $\widehat{C}_i^{DH}$.

De manière évidente, ce tenseur $\widehat{C}_i^{DH}$ obtenu par le biais d'une méthode d'homogénéisation simpliste ne correspond pas au tenseur macroscopique exact $\widehat{C}_i^{exact}$ dans le cas le plus général d'un milieu hétérogène et d'un chargement quelconque ; particulièrement quand le domaine microscopique Ω_i approche la frontière de domaine Ω. on peut traduire ceci sous la forme suivante :

$$\begin{cases} \langle\sigma\rangle_i = \widehat{C}_i^{exact} \langle\varepsilon\rangle_i \\ \\ \langle\sigma\rangle_i^{DH} = \widehat{C}_i^{exact} \langle\varepsilon\rangle_i^{DH} \\ \\ \langle\sigma\rangle_i \neq \widehat{C}_i^{DH} \langle\varepsilon\rangle_i \end{cases} \tag{3.6}$$

Supposons maintenant que l'on prend ce tenseur élastique homogénéisé $\widehat{C}_i^{DH}$ comme comportement macroscopique. Pour tout point M à l'intérieur de Ξ, assez proche du motif microscopique Ω_i (Fig. 3.6), la loi de comportement macroscopique estimée en ce point introduit les tenseurs de contrainte et de déformation macroscopiques $\sigma_{|M}$ et $\varepsilon_{|M}$ respectivement.

$$\sigma_{|M} = \widehat{C}_i^{DH} \varepsilon_{|M} + Erreur \tag{3.7}$$

Cette loi de comportement macroscopique estimée est entachée d'une erreur qu'il faut corriger. Partant sur l'idée que l'erreur sur la formulation (Eq.3.7) est du même ordre de grandeur que celle sur la relation suivante :

$$\langle\sigma\rangle_i = \widehat{C}_i^{DH} \langle\varepsilon\rangle_i + Erreur \tag{3.8}$$

En négligeant l'erreur résiduelle issue de la soustraction des deux équations (Eq.3.7) et (Eq.3.8) membre à membre, on obtient :

$$\sigma_{|M} = \langle\sigma\rangle_i + \widehat{C}_i^{DH} \left(\varepsilon_{|M} - \langle\varepsilon\rangle_i\right) \qquad \forall M \in \Xi \text{ dans le voisinage de } \Omega_i \tag{3.9}$$

Cette loi de comportement (Eq.3.9) tient compte du fait que le tenseur $\widehat{C}_i^{DH}$ calculé ne correspond pas au tenseur homogénéisé exact. Au contraire, si le tenseur $\widehat{C}_i^{DH} = \widehat{C}_i^{exact}$ représente exactement le comportement homogénéisé, alors les contributions non-locales disparaissent, et la loi homogénéisée habituelle est obtenue :

$$\langle\sigma\rangle_i = \widehat{C}_i^{exact}\ \langle\varepsilon\rangle_i \implies \sigma_{|M} = \widehat{C}_i^{exact}\ \varepsilon_{|M} \tag{3.10}$$

Ainsi on a obtenu une formulation du comportement tenant compte et corrigeant les éventuelles erreurs d'évaluation du comportement homogénéisé, la seule restriction est que cette loi est définie *pour tout pointM* $\in \Xi$ *dans le voisinage de* Ω_i.

Analyse de la correction d'évaluation du comportement homogénéisé : Pour s'assurer de la validité de la formulation (Eq.3.9), analysons les résultats qu'elle engendre.

A partir de (Eq.3.6) on a :

$$\langle\sigma\rangle_i = \widehat{C}_i^{exact}\ \langle\varepsilon\rangle_i$$

que l'on substitue dans la formulation (Eq.3.9) pour avoir :

$$\sigma_{|M} = \widehat{C}_i^{exact}\ \langle\varepsilon\rangle_i + \widehat{C}_i^{DH}\left(\varepsilon_{|M} - \langle\varepsilon\rangle_i\right) \qquad \forall M \in \Xi \textit{ dans le voisinage de } \Omega_i$$

Comme *le point* $M \in \Xi$ *dans le voisinage de* Ω_i et en se basant sur la régularité des champs précédemment énoncée, on peut écrire :

$$\langle\varepsilon\rangle_i = \varepsilon_{|M} + \delta\varepsilon \qquad \forall M \in \Xi \textit{ dans le voisinage de } \Omega_i$$

Ceci nous donne l'expression suivante :

$$\sigma_{|M} = \widehat{C}_i^{exact}\left(\varepsilon_{|M} + \delta\varepsilon\right) + \widehat{C}_i^{DH}\left(\varepsilon_{|M} - \left(\varepsilon_{|M} + \delta\varepsilon\right)\right) \qquad \forall M \in \Xi \textit{ dans le voisinage de } \Omega_i$$

$$\sigma_{|M} = \widehat{C}_i^{exact}\varepsilon_{|M} + \left(\widehat{C}_i^{exact} - \widehat{C}_i^{DH}\right)\delta\varepsilon \qquad \forall M \in \Xi \textit{ dans le voisinage de } \Omega_i$$

ou encore :

$$\sigma_{|M} = \widehat{C}_i^{exact}\varepsilon_{|M} + \delta\widehat{C}_i\ \delta\varepsilon \qquad \forall M \in \Xi \textit{ dans le voisinage de } \Omega_i \tag{3.11}$$

La formulation (Eq.3.9) conduit donc à la formulation (Eq.3.11) où on retrouve indirectement le tenseur homogénéisé exact $\widehat{C}_i^{exact}$ même si on ne dispose pas de sa forme explicite.

L'erreur sur La formulation (Eq.3.9) est du second ordre ($\delta\widehat{C}_i\ \delta\varepsilon$). On peut la minimiser encore plus en prenant un domaine microscopique assez riche ($\delta\widehat{C}_i \to 0$) et en respectant la condition de régularité des champs macroscopiques ($\delta\varepsilon \to 0$)

Extension de la formulation pour les points du domaine complémentaire Ξ non voisins d'un domaine microscopique : Une façon simple pour définir le comportement en un point quelconque du domaine complémentaire Ξ (non dans le voisinage d'un domaine microscopique) consiste en l'emploi d'une interpolation des comportements des domaines microscopiques les plus proches. Ceci nous oblige a définir une notion de voisinage, chose que l'on obtient naturellement en utilisant une interpolation C-NEM construite sur la base du diagramme de Voronoï lié au nuage des points comprenant le centre de la gravité des domaines microscopiques (les détails au sujet de cette interpolation seront donnés dans la prochaine section).

Soit $\widetilde{\phi}_i$ la fonction de forme associée au centre de gravité de Ω_i. $\widetilde{\phi}_i$ est parfaitement définie dans le domaine entier Ω. Ainsi, la loi de comportement macroscopique résultante est de la forme :

$$\sigma_{|M} = \widetilde{\sigma}_{|M} + \widetilde{C}_{|M}\left(\varepsilon_{|M} - \widetilde{\varepsilon}_{|M}\right) \qquad \forall M \in \Xi \tag{3.12}$$

avec :

$$\widetilde{\sigma}_{|M} = \sum_{i=1}^{i=V} \widetilde{\phi}_i(M)\,\langle\sigma\rangle_i \tag{3.13}$$

$$\widetilde{\varepsilon}_{|M} = \sum_{i=1}^{i=V} \widetilde{\phi}_i(M)\,\langle\varepsilon\rangle_i \tag{3.14}$$

$$\widetilde{C}_{|M} = \sum_{i=1}^{i=V} \widetilde{\phi}_i(M)\,\widehat{C}_i \tag{3.15}$$

où V est le nombre de voisins naturels visibles du point M.

Le problème mécanique en élasticité linéaire (HPP) s'écrit alors sous la forme :

Trouver un champs de déplacement régulier sur Ω *vérifiant les conditions aux limites essentielles*

$$U = U_c \text{ sur } \partial_U\Omega \quad avec \quad \partial\Omega = \partial_U\Omega \cup \partial_F\Omega \tag{3.16}$$

ainsi que les équations d'équilibre

$$\begin{aligned} &\sum_{i=1}^{i=m} \int_{\Omega_i} Tr\left[\varepsilon_{|P}(U^*)\, C(P)\, \varepsilon_{|P}(U)\right] dP \\ &+ \int_{\Xi} Tr\left[\varepsilon_{|M}(U^*)\, \widetilde{C}_{|M} \varepsilon_{|M}(U)\right] dM \\ &+ \sum_{i=1}^{i=m} \tfrac{1}{|\Omega_i|} \int_{\Xi} \int_{\Omega_i} \widetilde{\phi}_i(M)\, Tr\left[\varepsilon_{|M}(U^*)\left(C(P) - \widetilde{C}_{|M}\right)\varepsilon_{|P}(U)\right] dP\, dM \\ &= \int_{\Omega} U^* f dM + \int_{\partial_F\Omega} U^* F_c d\Gamma \\ &\forall U^* \ tel\ que\ U^* = 0 \ sur\ \partial_U\Omega \end{aligned} \tag{3.17}$$

Dans le cas d'un matériau parfaitement homogène le terme $\left(C(P) - \widetilde{C}_{|M}\right)$ disparaît, pour nous donner une formulation classique des conditions d'équilibre

3.3 Méthodes sans maillage

3.3.1 Motivations

Dans la modélisations adoptée, environ 95% des noeuds sont situés dans moins de 5% du volume du domaine d'où l'appellation 95/5. la densité nodale dans les zones microscopiques doit etre suffisante pour une représentation correcte et précise de la structure. Dans le milieu complémentaire elle doit être suffisante pour représenter la réponse globale de la structure considérée.

Étant donné que les domaines microscopiques sont directement couplés au domaine complémentaire par leurs frontières, ceci afin d'assurer une transmission appropriée entre les deux types de domaines, la densité nodale évolue soudainement au passage d'une région microscopique au milieu complémentaire. Ainsi on obtient une discrétisation hautement hétérogène conduisant a un maillage très distordu pratiquement inutilisable dans le cadre de la méthode des éléments finis classiques.

Pour ces raisons, l'utilisation de méthodes dites "sans maillage" (meshless) moins sensibles à la forme de la distribution des noeuds et ainsi à la distortion du maillage semble la plus appropriée pour la modélisation qu'on propose.

3.3.2 Généralités sur les méthodes sans maillage, historique

La question du choix et de l'évaluation des performances des différentes méthodes sans maillage a été abordée dans notre laboratoire au cours de la thèse de J. Yvonnet [63]. On peut aussi y trouver un état de l'art complet sur ces méthodes. On se reposera donc sur les développements et conclusions issues de ce travail pour ce qui est du choix et de la mise en oeuvre de la méthode sans maillage à employer.

Historique : L'origine des méthodes sans maillage remonte à la fin des années 70, cependant elles sont restées peu utilisées jusqu'au début des années 90. On trouve une revue intéressante de ces méthodes dans [24].

Les méthodes sans maillage furent initiées avec la méthode "Smooth Particle Hydrodynamics" (SPH) [38], qui fut créée à l'origine pour la simulation des phénomènes

astrophysiques. La généralisation de l'approximation SPH qui consiste à introduire une fonction de correction dans la fonction noyau [37] pour obtenir la consistance d'ordre supérieure a donné naissance à la technique "Reproducing Kernel Particle Method" (RKPM)

Une 2^{eme} grande famille de méthodes sans maillage est basée sur la technique des "Moindres Carrés Mobiles" (MLS). plusieurs méthodes se sont inspirées de cette approche dont on peut citer la "méthode des éléments diffus" (DEM) [41]. La méthode "Element Free Galerkin" [4] est aussi basée sur le MLS, elle est plus performante et plus précise que la méthode DEM.

D'autres approches ont été proposées comme la méthode des différences finies généralisées [36], pouvant être appliquées pour des nuages de noeuds quelconques.

Une méthode sans maillage basée sur des principes totalement différents a émergé récemment sous le nom de "méthode des éléments naturels - NEM" [54], [47], [14]. Cette technique utilise des fonctions de forme très particulières, basées sur les constructions géométriques du diagramme de Voronoi et de son dual, la triangulation de Delaunay. Cette technique offre presque tous les avantages des méthodes sans maillage, tout en éliminant un grand nombre d'inconvénients. De plus, les fonctions de forme, bien que construites uniquement à partir des noeuds, deviennent linéaires sur les bords du domaine, ce qui permet de les substituer directement aux fonctions de forme éléments finis linéaires dans un code de calcul conçu au départ sur la base d'une interpolation éléments finis.

Avantages : Contrairement à l'approche éléments finis dans laquelle l'approximation est liée aux éléments, dans les méthodes sans maillage l'approximation est construite exclusivement à l'aide des données nodales. Ces caractéristiques offrent de nombreux avantages :

- La possibilité de traiter plus facilement les problèmes en grandes transformations que dans la méthode des éléments finis, et pour les mêmes raisons la possibilité de traiter des problèmes avec une haute hétérogénéité de densité nodale (le cas qui se pose dans le présent travail). Les performances des méthodes meshless (plus particulièrement la NEM) sont expliquées par les facteurs suivants :
  - Une connectivité variable. Les voisins naturels (NEM) ont un support de fonctions de forme plus large que les seuls noeuds de l'élément dans la méthode des

éléments finis. Ainsi, la matrice jacobienne associée ne deviendra singulière que pour des distorsions beaucoup plus importantes du voisinage [35]

  - La qualité de la solution est moins sensible à la position relative des noeuds (comme cela va être montré dans la suite), autorisant la construction de la solution à partir de positions relatives entre les noeuds déconseillées dans la méthode des éléments finis

- La possibilité d'insérer, ou de retirer des noeuds assez facilement en général. Ce point est particulièrement attrayant pour définir des stratégies de raffinement, pour les problèmes présentant de la localisation.

Remarque : Si un support de fonction de forme moins large est utilisé (pour des raisons de coût et de qualité), les problèmes rencontrés avec la méthode des éléments finis réapparaissent. Même si les difficultés sont moindres, elles subsistent donc dans le cas général.

Inconvénients : En contrepartie, un certain nombre de difficultés apparaissent dans les méthodes sans maillage :

- Le principal défaut de la plupart des méthodes sans maillage "classiques" (SPH, RKPM, DEM, EFG) est la difficulté liée à l'imposition des conditions aux limites. En effet, pour pouvoir imposer les conditions aux limites de type Dirichelt de manière directe comme dans la méthode des éléments finis, il est nécessaire :
  - que l'approximation construite passe par les valeurs nodales (interpolation stricte) ;
  - que l'influence des noeuds intérieurs s'annule sur le bord du domaine.

  Or la fonction d'approximation construite par les méthodes sans maillage les plus répandues ne vérifient aucune de ces deux conditions. Différentes techniques pour imposer les conditions aux limites dans les méthodes sans maillage les plus utilisées ont depuis été proposées. Ces techniques entraînent des coûts supplémentaires.
- Le second inconvénient est lié à l'intégration numérique. Dans la majorité des cas, les fonctions de forme meshless ne sont pas polynomiales mais rationnelles, ce qui rend les schémas d'intégration de type Gauss non optimaux. Toutefois des solutions ont été proposées pour remédier à ces difficultés [15] [11] [12].
- Un autre inconvénient des techniques "meshless" est lié au support des fonctions

de forme. Dans la plupart de ces approches, le support, ou domaine d'influence d'un noeud est défini par une sphère ou un parallélépipède centré sur le noeud. Un support suffisamment large est nécessaire pour que la méthode soit stable, mais un support trop large entraîne des coûts de calcul plus importants et une qualité fortement dégradée à cause du lissage qu'il entraîne.
A noter toutefois que "la méthode des éléments naturels" avec son support basé sur le diagramme de Voronoï ne souffre pas de ce problème.

- Des difficultés apparaissent pour des géométries non convexes (la présence d'un bord concave, d'une cavité ou d'une fissure). Le problème essentiel est lié à la définition du support des fonctions de forme, cela vient des influences entre noeuds de part et d'autre du bord non convexe. La technique dite du critère de visibilité introduite dans [8], permet de supprimer ces influences. Cependant, dans certains cas, cela introduit des discontinuités parasites. De plus les techniques décrites ne peuvent être étendues facilement au cas 3D.

3.3.3 Méthode des éléments naturels contraints CNEM

Les différents inconvénients précités ont largement contribué à un déclin de l'utilisation des méthodes "meshless" de type moindre carrés mobiles depuis quelques années. L'utilisation de la méthode des éléments naturels et de ses extensions permet grâce à ses fonctions de forme particulière de contourner la plupart des difficultés bien connues dans la majorité des méthode sans maillage, telles que l'imposition des conditions aux limites de type Dirichlet ou le réglage de la taille du support définissant le schéma local d'interpolation. De plus la méthode NEM partage beaucoup de caractéristiques avec la méthode des éléments finis notamment sur le bord du domaine, en conservant en partie les avantages des méthodes sans maillage.

L'interpolation basée sur les éléments naturels contraints : L'interpolation NEM est construite sur la base du diagramme de Voronoï associé au nuage de noeuds considéré (le diagramme de Voronoï étant le dual de la triangulation de Delaunay). Pour un approfondissement sur l'interpolation NEM Sibsonienne et ses applications dans la résolution des équations différentielles de second ordre on peut se référer à Braun et Sambridge [47]

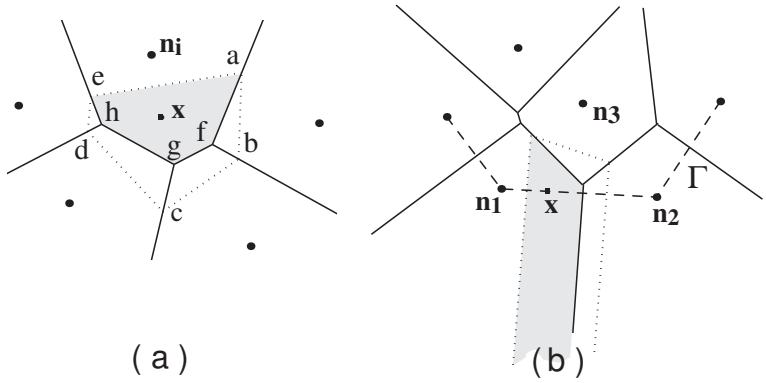


FIG. 3.8 – (a) Construction des fonctions de formes Sibsoniennes.
(b) linéarité sur les bords convexes

et Sukumar *et al.* [54].

Pour faire simple on se restreindra au cas 2D. le développement du cas 3D, qui est une extension directe du cas 2D, fait l'objet de développements au sein de notre laboratoire.

Soit $S = \{\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2, \ldots, \mathbf{n}_N\}$ un nuage de noeuds dans $\Re^2$ de coordonnées $\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \ldots, \mathbf{x}_N\}$. le diagramme de Voronoï est la subdivision de $\Re^2$ en régions T_i (cellules de Voronoï) tel que :

$$T_i = \{\mathbf{x} \in \Re^2 : d(\mathbf{x}, \mathbf{n}_i) < d(\mathbf{x}, \mathbf{n}_j)\}, \quad \forall\, i, \forall j \neq i \tag{3.18}$$

où $d(.,.)$ est la distance euclidienne.

A un point $\mathbf{x}$, on associe à chaque noeud $\mathbf{n}_i$ la fonction de forme $\phi_i(\mathbf{x})$ définie comme un rapport d'aires (ou de volumes en 3D) entre la cellule résultante de l'introduction du point $\mathbf{x}$ dans le diagramme de Voronoï originel et celle résultant de son intersection avec la cellule centrée sur le noeud $\mathbf{n}_i$. voir Fig. 3.8.a .

$$\phi_i(\mathbf{x}) = \frac{Aire(afghe)}{Aire(abcde)} \tag{3.19}$$

On note bien que si le point $\mathbf{x}$ coïncide avec le noeud $\mathbf{n}_i$, alors la fonction de forme $\phi_i(\mathbf{x}_i) = 1$, et toutes les autres fonctions de formes s'annulent. On vérifie là une propriété essentielle, celle du delta de Kronecker. Les fonctions de forme CNEM vérifient d'autres propriétés intéressantes (positivité, consistance linéaire ainsi que la partition de l'unité) que le lecteur intéressé peut trouver en détails dans les travaux de Sukumar [54] :

$$\begin{cases} \phi_i(\mathbf{x}_j) = \delta_{ij} & \textit{Delta de Kronecker} \\ 0 \leq \phi_i(\mathbf{x}) \leq 1 & \textit{Positivité} \\ \mathbf{x} = \sum_{i=1}^{n} \phi_i(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{x}_i & \textit{Consistance linéaire} \\ \sum_{i=1}^{n} \phi_i(\mathbf{x}) = 1 & \textit{Partition de l'unité} \end{cases} \tag{3.20}$$

où n est le nombre de noeuds voisins du point $\mathbf{x}$.

Les fonctions de forme éléments naturels sont C^{∞} à n'importe quel point, excepté sur les bords des cercles de Delaunay (sphères en 3D) où elles sont C^1 (à cause du changement de voisins naturels), et aux noeuds où elles sont seulement C^0.

Une autre propriété importante de l'interpolation basée sur les éléments naturels est sa capacité à reproduire les fonctions linéaires sur les bords des domaines convexes que nous illustrons dans la figure (Fig. 3.8 (b)). La démonstration a été apportée par Sukumar *et al.* [54] : étant donné que les aires des cellules de Voronoï associées aux points sur la frontière deviennent infinis, la contribution des points internes disparaît à la limite quand le point approche la frontière convexe, et les fonctions de forme liées aux noeuds n_1 et n_2 deviennent linéaires sur le segment $(n_1 - n_2)$. Ce n'est pas le cas quand des frontières non convexes sont considérées.

Ainsi, l'interpolation d'une fonction vectorielle $\mathbf{u}(\mathbf{x}) : \Omega \subset \Re^2 \rightarrow \Re^2$, s'écrit sous la forme :

$$U^h(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{n} \phi_i(\mathbf{x}) U_i \tag{3.21}$$

Où U_i représente les vecteurs des degrés de liberté aux n voisins naturels du point $\mathbf{x}$, et $\phi_i(\mathbf{X})$ sont les fonctions de forme de Sibson définies dans (Eq.3.19) associées à chaque noeud n_i.

Revenons sur le cas des frontières non convexes : un développement récent dans la NEM, la méthode des éléments naturels contrainte (C-NEM), est proposé dans [62, 65] afin d'éviter les problèmes induits par des domaines non convexes. Dans cette approche, un critère de visibilité est présenté pour limiter les voisins naturels (noeuds influents).

Pour cela le diagramme de Voronoï contraint est construit, à partir duquel les fonctions de forme peuvent être facilement calculées. De cette manière, l'interpolation linéaire est récupérée le long de la frontière des domaines non convexes, rendant possible l'introduction de conditions aux limites essentielles aussi bien que le traitement des discontinuités fixes ou mobiles.

Dans le cadre de C-NEM, l'interpolation peut être exprimée par :

$$U^h(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{V} \phi_i^C(\mathbf{x}) U_i \tag{3.22}$$

Où V représente le nombre de voisins naturels visibles depuis le point $\mathbf{x}$ et ϕ_i^C les fonctions de forme éléments naturels contraintes, calculées de manière similaire aux fonctions NEM classiques (Sibson) mais à partir du diagramme de Voronoï contraint [62].

Formulation CNEM d'un problème classique en élasticité linéaire HPP : Nous considérons le problème d'élasticité linaire en petites perturbations 2D, décrit par l'équation d'équilibre :

$$\nabla \cdot \sigma + \mathbf{b} = \mathbf{0} \quad dans \ \ \Omega \tag{3.23}$$

où $\Omega \in \Re^2$ est le domaine matériel, $\nabla\cdot$ est l'opérateur divergence, σ est le tenseur des contraintes de Cauchy et $\mathbf{b}$ est un terme de force volumique.

La relation de comportement est donnée par :

$$\sigma = \mathbf{C}\varepsilon \tag{3.24}$$

où σ et ε sont les formes vectorielles du tenseurs de contrainte et du tenseur des déformations linéarisé (partie symétrique), respectivement. avec $\mathbf{C}$ le tenseur élastique sous sa forme matricielle.

Les conditions aux limites essentielles et naturelles sont données par :

$$\begin{aligned} U &= U_c \ sur \ \partial_U \Omega \\ \sigma \mathbf{n} &= F_c \ sur \ \partial_F \Omega \end{aligned} \tag{3.25}$$

où $\partial\Omega = \partial_U\Omega \cup \partial_F\Omega$ est le bord du domaine Ω, $\mathbf{n}$ est la normale unitaire sortante sur $\partial\Omega$,U_c et F_c sont les déplacements et efforts imposés, respectivement.

La formulation variationnelle associée au problème élastostatique est donnée par :

Trouver $U \in H^1(\Omega)$ *cinématiquement admissible* $(U = U_c$ *sur* $\partial_U\Omega)$ *tel que*

$$\int_\Omega \sigma \cdot \varepsilon^* d\Omega = \int_\Omega f \cdot U^* d\Omega + \int_{\partial_F\Omega} F_c \cdot U^* d\Gamma, \ \ \forall U^* \in H_0^1(\Omega) \tag{3.26}$$

où $H^1(\Omega)$ et $H_0^1(\Omega)$ sont les espaces fonctionnels de Sobolev usuels.

En substituant les fonctions d'approximation et les fonctions test (toutes les deux approximées par le schéma C-NEM) dans l'équation précédente et en utilisant le fait que le champ U^* est arbitraire, on obtient le système d'équations linéaires après intégration numérique (que nous détaillerons dans la prochaine section) :

$$\mathbf{Kq} = \mathbf{f}^{ext} \tag{3.27}$$

où $\mathbf{q}$ est le vecteur des degrés de liberté, avec la matrice $\mathbf{K}$ et le vecteur $\mathbf{f}^{ext}$ donnés par :

$$K = \int_\Omega B^t C B d\Omega \tag{3.28}$$

$$\mathbf{f}^{ext} = \int_{\partial_F\Omega} N^t F_c d\Gamma + \int_\Omega N^t f d\Omega \tag{3.29}$$

où $\mathbf{N}$ et $\mathbf{B}$ sont les matrices des fonctions de forme et leurs dérivées respectivement.

L'intégration nodale stabilisée conforme : Dans le cadre des méthodes sans maillage "meshless" plusieurs procédures d'intégration numérique ont été proposées. En effet l'intégration de Gauss réalisée sur les triangles de Delaunay introduit une erreur due aux points suivants :

- Supports des fonctions de forme meshless ne coïncident pas avec les triangles de Delaunay
- Caractère non polynomiale des fonctions de forme meshless, un grand nombre de points d'intégration est donc nécessaire pour minimiser l'erreur, rendant l'intégration numérique coûteuse.[15].

Aussi, l'intégration nodale directe, utilisant les noeuds comme des points d'intégration, conduit à des instabilités numériques [12].

Dans ce travail, nous utilisons la procédure d'intégration nodale stabilisée conforme (SCNI) [11]. Cette approche fut appliquée pour la première fois dans la méthode NEM dans [25], et a permis de mettre en évidence une amélioration significative de la qualité en comparaison avec l'intégration de Gauss. Cette technique d'intégration numérique peut être naturellement appliquée à la méthode C-NEM, car les domaines d'intégration coïncident exactement avec les cellules de Voronoï contraintes.

Cette approche consiste en une intégration nodale et une stabilisation basée sur la substitution du gradient par un gradient moyenné sur un domaine représentatif entourant le noeud, *la cellule de Voronoi* (Eq. (3.30)) . Ceci permet d'éviter les oscillations parasites inhérentes à l'intégration nodale.

$$\tilde{\nabla} U^h(\mathbf{x}_i) = \frac{1}{|\omega_i|} \int_{\omega_i} \nabla U^h(\mathbf{x}) d\omega \tag{3.30}$$

Où $\mathbf{x}_i$ sont les coordonnées du noeud n_i, ω_i est la cellule de Voronoi associée au noeud n_i.

Le tenseur des déformations modifié est alors donnée par :

$$\tilde{\varepsilon}^h(\mathbf{x}_i) = \frac{1}{|\omega_i|} \int_{\omega_i} \varepsilon^h(\mathbf{x}) d\omega = \frac{1}{|\omega_i|} \int_{\omega_i} \begin{Bmatrix} \frac{\partial u_1^h(\mathbf{x})}{\partial x} \\ \\ \frac{\partial u_2^h(\mathbf{x})}{\partial y} \\ \\ \frac{\partial u_1^h(\mathbf{x})}{\partial y} + \frac{\partial u_2^h(\mathbf{x})}{\partial x} \end{Bmatrix} d\Omega \tag{3.31}$$

Où u_1 et u_2 sont les composantes du vecteur U

En appliquant le théorème de la divergence, on obtient la forme suivante :

$$\tilde{\varepsilon}^h(\mathbf{x}_i) = \frac{1}{|\omega_i|} \int_{\partial\omega_i} \begin{Bmatrix} u_1^h(\mathbf{x}) n_1 \\ \\ u_2^h(\mathbf{x}) n_2 \\ \\ u_1^h(\mathbf{x}) n_2 + u_2^h(\mathbf{x}) n_1 \end{Bmatrix} d\Gamma \tag{3.32}$$

Où : $\partial\omega_i$ la frontière de la cellule de Voronoi. $|\omega_i|$ l'aire ou le volume en 3D.
En introduisant à présent l'approximation NEM Eq. (3.22) on obtient :

$$\tilde{\varepsilon}^h(\mathbf{x}_i) = \tilde{\mathbf{B}}_\mathbf{i}\mathbf{q} \tag{3.33}$$

Qui est donnée explicitement par :

$$\tilde{\varepsilon}^h(\mathbf{x}_i) = \begin{Bmatrix} \frac{\partial\tilde{\phi}_1(\mathbf{x}_i)}{\partial x} & 0 & \frac{\partial\tilde{\phi}_2(\mathbf{x}_i)}{\partial x} & 0 & \cdots & \frac{\partial\tilde{\phi}_N(\mathbf{x}_i)}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial\tilde{\phi}_1(\mathbf{x}_i)}{\partial y} & 0 & \frac{\partial\tilde{\phi}_2(\mathbf{x}_i)}{\partial y} & \cdots & 0 & \frac{\partial\tilde{\phi}_N(\mathbf{x}_i)}{\partial y} \\ \frac{\partial\tilde{\phi}_1(\mathbf{x}_i)}{\partial y} & \frac{\partial\tilde{\phi}_1(\mathbf{x}_i)}{\partial x} & \frac{\partial\tilde{\phi}_2(\mathbf{x}_i)}{\partial y} & \frac{\partial\tilde{\phi}_2(\mathbf{x}_i)}{\partial x} & \cdots & \frac{\partial\tilde{\phi}_N(\mathbf{x}_i)}{\partial y} & \frac{\partial\tilde{\phi}_N(\mathbf{x}_i)}{\partial x} \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} u_{11} \\ u_{12} \\ u_{21} \\ u_{22} \\ \vdots \\ u_{N1} \\ u_{N2} \end{Bmatrix}$$

$$= \tilde{\mathbf{B}}_\mathbf{i}\mathbf{q} \tag{3.34}$$

Où les composantes de $\tilde{B}_i$ sont définies par :

$$\frac{\partial\tilde{\phi}_j(\mathbf{x}_i)}{\partial x} = \frac{1}{|\omega_i|}\int_{\partial\omega_i}\phi_j(\mathbf{x})n_1(\mathbf{x})d\Gamma \tag{3.35}$$

$$\frac{\partial\tilde{\phi}_j(\mathbf{x}_i)}{\partial y} = \frac{1}{|\omega_i|}\int_{\partial\omega_i}\phi_j(\mathbf{x})n_2(\mathbf{x})d\Gamma \tag{3.36}$$

Il est évident qu'un grand nombre de termes dans la matrice $\tilde{\mathbf{B}}_\mathbf{i}$ sont nuls du fait du support compact des fonctions de forme C-NEM. En introduisant l'approximation C-NEM, la déformation stabilisée et l'intégration nodale, la matrice de rigidité globale est obtenue en assemblant la contribution de chacun des noeuds n_i :

$$\mathbf{K} = \sum_i \tilde{\mathbf{K}}_i = \sum_i |\omega_i|\,\tilde{\mathbf{B}}_i^t\mathbf{C}\tilde{\mathbf{B}}_i \tag{3.37}$$

Ensuite, on associe à chaque cellule une contrainte donnée par :

$$\tilde{\sigma}_i^h = \mathbf{C}\tilde{\mathbf{B}}_i\mathbf{q} \tag{3.38}$$

La contrainte ainsi trouvée est de la même forme que le gradient stabilisé et donc constante sur chaque cellule de Voronoi.

L'application du théorème de la divergence permet d'éviter le calcul des dérivées des fonctions de forme, seules les fonctions de forme sont requises.

Chapitre 4

Tests, critiques et validations numériques

4.1 Évaluation de l'aptitude de la C-NEM à traiter les problèmes avec hétérogénéité de densité nodale

4.1.1 Étude comparative FEM / C-NEM

Afin d'évaluer l'aptitude de la méthode des éléments naturels contraints à traiter les problèmes introduisant une haute hétérogénéité de densité nodale, on procède d'abord à une évaluation comparative avec les éléments finis (éléments triangulaires linéaires standards). On considère le problème mécanique reporté dans [33], que l'on décrit sur la figure Fig. 4.1 avec les différentes discrétisations. Une discrétisation plus fine est obtenue en introduisant un noeud sur chaque arête d'un triangle afin de conserver la qualité de la discrétisation initiale. Sur la figure Fig. 4.1, seuls les noeuds du maillage initial sont représentés, ils servent à définir l'emplacement des groupes de noeuds (Fig. 4.2) à l'échelle microscopique ainsi qu'une discrétisation du milieu complémentaire. Le comportement considéré est élastique linéaire avec un matériau homogène sur tout le domaine. Le chargement est défini par :

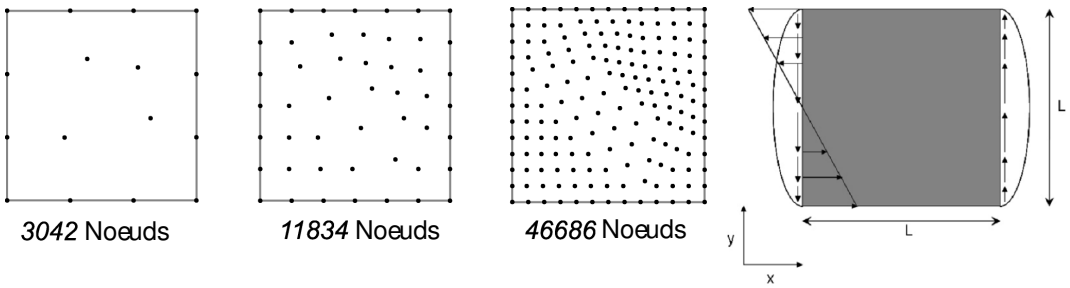


FIG. 4.1 – Problème test, définition et discrétisations.

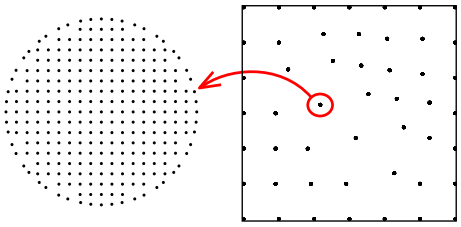


FIG. 4.2 – Problème test, groupe de noeuds.

$$\begin{cases} F_x(x=0) = \frac{2y}{L} - 1 \\ F_y(x=0) = -\frac{y}{L}\left(1-\frac{y}{L}\right) \\ F_y(x=L) = \frac{y}{L}\left(1-\frac{y}{L}\right) \end{cases} \tag{4.1}$$

La solution exacte du problème est donné par :

$$\begin{cases} \sigma_{11}^{ex} = \left(\frac{2y}{L} - 1\right)\left(\frac{x}{L} - 1\right) \\ \sigma_{22}^{ex} = 0 \\ \sigma_{12}^{ex} = \frac{y}{L}\left(1-\frac{y}{L}\right) \end{cases} \tag{4.2}$$

Dans ce premier test on s'attache à évaluer les performances globales ainsi que l'ordre de convergence de la méthode C-NEM et FEM dans le cadre de forte hétérogénéité de la densité nodale. On définit alors une mesure globale de l'erreur relative sur le domaine Ω :

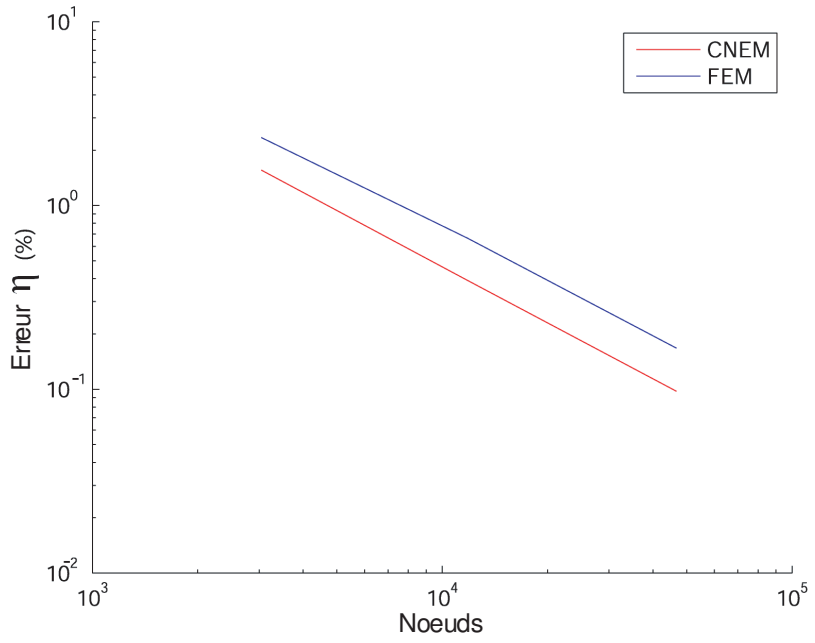


FIG. 4.3 – Erreur de discrétisation FEM et C-NEM.

$$\eta^2 = \frac{\int_\Omega (\sigma - \sigma^{ex}) C^{-1} (\sigma - \sigma^{ex})\, dM}{\int_\Omega \sigma^{ex} C^{-1} \sigma^{ex} dM} \tag{4.3}$$

Les résultats sont présentés sous forme de courbes de convergence Fig. 4.3. Le taux de convergence des deux approches C-NEM et FEM est du premier ordre comme dans le cas standard de discrétisations sans gradient de densité nodale. On constate cependant que la méthode C-NEM introduit une erreur globale deux fois inférieure à celle introduite par la méthode FEM. *Remarque* : Une forte hétérogénéité de la densité nodale entraîne une grande distorsion du maillage pour la FEM et l'on s'attend à avoir un plus grand écart avec la C-NEM moins sensible. Cependant, notre maillage est constitué de triangles aplatis avec un angle petit et deux proches de $\pi/2$ qui ne sont pas source d'erreur comme on le retrouve dans [1], l'erreur étant introduite plus par des triangles plats avec un angle approchant π qui sont absent dans notre cas. On se met donc dans le cas le plus favorable à la FEM possible (utilisation d'une triangulation de Delaunay).

Pour avoir plus de détails sur la distribution de l'erreur, on définit une mesure locale de

l'erreur absolue sur l'élément pour la FEM et sur la cellule de Voronoi pour la C-NEM :

$$Err_e^{FEM} = Tr\ \left[\left(\sigma_e^{FEM} - \sigma_e^{ex}\right) C_e^{-1} \left(\sigma_e^{FEM} - \sigma_e^{ex}\right)\right] \tag{4.4}$$

$$Err_c^{C-NEM} = Tr\ \left[\left(\sigma_c^{C-NEM} - \sigma_c^{ex}\right) C_c^{-1} \left(\sigma_c^{C-NEM} - \sigma_c^{ex}\right)\right] \tag{4.5}$$

Où : σ_e^{FEM} est la valeur du champ de contrainte calculée par la méthode des éléments finis dans l'élément *e*, la contrainte et la déformation sont constantes sur l'élément du fait de l'interpolation linéaire du champ de déplacement.

σ_c^{C-NEM} est la valeur du champ de contrainte calculée par la méthode des éléments naturels contraints dans la cellule de Voronoi *c*, la contrainte et la déformation sont constantes sur la cellule de Voronoi du fait de l'utilisation de l'intégration nodale stabilisée conforme (SCNI).

La mesure de l'erreur définie en Eq. (4.4) et Eq. (4.5), n'est pas affectée par l'aire (où volume en 3D) de l'élément pour la FEM ou de la cellule de Voronoi pour la C-NEM, on évalue ainsi directement et en même temps l'erreur aux deux échelles. On observe sur la figure Fig. 4.4 une distribution uniforme de l'erreur pour la C-NEM, contrairement à la FEM où on retrouve certains éléments avec une erreur très supérieure à la moyenne. L'origine de l'erreur en FEM est en partie due à la finesse de la discrétisation, elle se concentre plutôt dans les éléments les plus gros, où la nature linéaire des éléments (les fonctions de forme rationnelles C-NEM sont plus performantes) ne peut reproduire les champs de contrainte quadratique (4.2) et de déplacement d'ordre 3.

4.1.2 Évaluation et optimisation de la C-NEM pour le traitement des problèmes multi-échelles

On est arrivé dans la section précédente à la conclusion que la C-NEM est plus apte que la FEM à traiter les problèmes avec une haute hétérogénéité de densité nodale. Cependant, une question reste posée et on ne retrouve pas dans la littérature de réponse claire à ce sujet : les méthodes " meshless ", et plus précisément la méthode des éléments naturels contraints, sont elles inconditionnellement robustes vis-à-vis de ce problème, y a-t-il une limitation ?

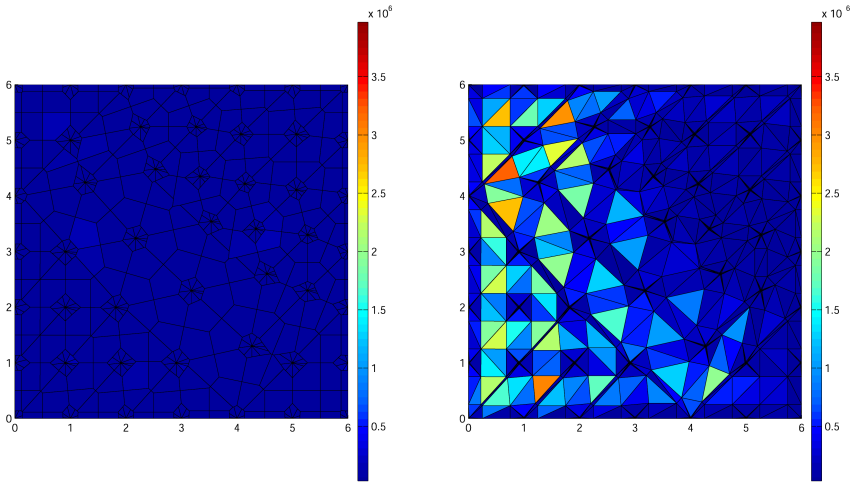


FIG. 4.4 – Distribution de l'erreur pour les solutions C-NEM et FEM.

Évaluation des problèmes : Pour répondre à cette question on va explorer un problème correspondant à notre problématique de modélisation multi-échelles. On considère un problème mécanique en élasticité linéaire HPP avec un matériau homogène sur tout le domaine, ce comportement est défini par :

$$\begin{Bmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{xy} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ 2\varepsilon_{xy} \end{Bmatrix}$$

A partir de ce problème de base, on construit 3 problèmes de manière à avoir les champs de déplacement suivants définis sur tout le domaine Ω :

$$\begin{cases} U_x^I = x \\ U_y^I = y \end{cases} \quad \begin{cases} U_x^{II} = x^2 \\ U_y^{II} = y^2 \end{cases} \quad \begin{cases} U_x^{III} = x^3 \\ U_y^{III} = y^3 \end{cases} \qquad dans\ \Omega \tag{4.6}$$

Pour cela on impose les conditions aux limites suivantes (Fig.4.5) :

$$\begin{cases} U_x^I = x \\ U_y^I = y \end{cases} \quad sur\ \partial\Omega \qquad \begin{cases} f_x^I = 0 \\ f_y^I = 0 \end{cases} \quad dans\ \Omega \tag{4.7}$$

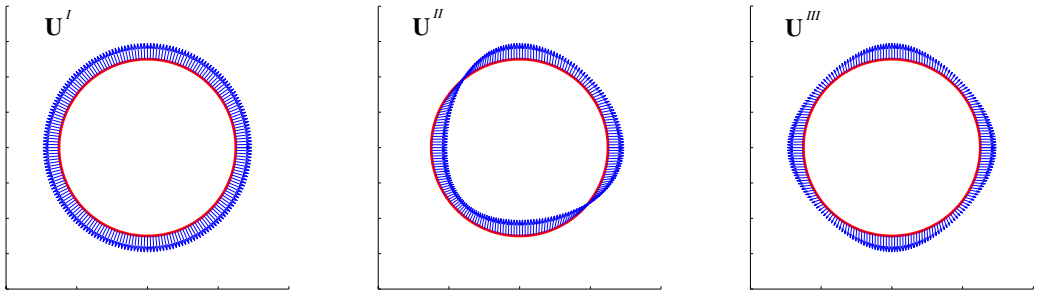


FIG. 4.5 – Définition du problème test.

$$\begin{cases} U_x^{II} = x^2 \\ \\ U_y^{II} = y^2 \end{cases} \quad sur\ \partial\Omega \qquad \begin{cases} f_x^{II} = -2C_{11} \\ \\ f_y^{II} = -2C_{11} \end{cases} \quad dans\ \Omega \tag{4.8}$$

$$\begin{cases} U_x^{III} = x^3 \\ \\ U_y^{III} = y^3 \end{cases} \quad sur\ \partial\Omega \qquad \begin{cases} f_x^{III} = -6C_{11}\, x \\ \\ f_y^{III} = -6C_{11}\, y \end{cases} \quad dans\ \Omega \tag{4.9}$$

Où $\left\{ \begin{array}{c} f_x \\ f_y \end{array} \right\}$ représente les forces volumiques dans Ω.

Les discrétisations sont représentées sur les figures des résultats de simulation (Fig.4.6). Le domaine au centre représentera le domaine microscopique, celui qui l'entoure représentera le domaine complémentaire. Dans la première discrétisation, on attribue au domaine microscopique une taille du même ordre que celle de la structure, ceci ne correspond évidement pas à notre problème multi-échelles et nous servira de cas de référence. Les trois autres discrétisations sont semblables à la première pour ce qui est du pas de discrétisation du domaine complémentaire et du nombre de noeuds du domaine microscopique mais avec une taille de celui-ci réduite d'un ordre de grandeur à chaque fois. Afin d'évaluer en même temps l'effet de l'introduction d'une frontière (donc une discontinuité) entre les deux domaines, qui est nécessaire à la modélisation de l'extension du comportement et la résolution, on considère les deux cas de figure : avec et sans frontière. A noter que pour cette étude on considère un comportement élastique linéaire avec le même matériau homogène sur tout le domaine microscopique et complémentaire, ceci afin de s'affranchir des erreurs relatives à la modélisation.

La mesure de l'erreur globale sur Ω utilisée est celle définie en Eq.4.3 :

$$\eta^2 = \frac{\int_\Omega Tr\ \left[(\sigma - \sigma^{ex}) C^{-1} (\sigma - \sigma^{ex})\right] dM}{\int_\Omega Tr\ \left[\sigma^{ex} C^{-1} \sigma^{ex}\right] dM}$$

De la même manière on définit la mesure de l'erreur globale sur le domaine microscopique Ω_i :

$$\eta^2_{\Omega_i} = \frac{\int_{\Omega_i} Tr\ \left[(\sigma - \sigma^{ex}) C^{-1} (\sigma - \sigma^{ex})\right] dM}{\int_{\Omega_i} Tr\ \left[\sigma^{ex} C^{-1} \sigma^{ex}\right] dM} \tag{4.10}$$

Pour rendre compte de l'erreur dans chaque cellule de Voronoi indépendamment de son aire, on utilise la même mesure d'erreur non pondérée par l'aire de la cellule de Voronoi et rapportée à l'énergie de déformation moyenne sur le domaine Ω :

$$\eta^2_{cellule} = \frac{Tr\ \left[(\sigma - \sigma^{ex}) C^{-1} (\sigma - \sigma^{ex})\right]}{\frac{1}{|\Omega|} \int_\Omega Tr\ \left[\sigma^{ex} C^{-1} \sigma^{ex}\right] dM} \tag{4.11}$$

Les résultats des simulations en terme d'erreurs relatives globale (η) et microscopique (η_{Ω_i}), relatives au problème avec frontière à l'interface micro/macro, sont récapitulés dans le tableau suivant :

Erreur relative avec frontière à l'interface Micro/Macro					
		$Micro/Macro$ $1/1$	$Micro/Macro$ $1/10$	$Micro/Macro$ $1/100$	$Micro/Macro$ $1/1000$
$U_x = x$ $U_y = y$	Globale	$1.85e-12\%$	$2.28e-12\%$	$2.10e-12\%$	$2.17e-12\%$
	Micro	$1.06-12\%$	$6.87e-12\%$	$9.38e-11\%$	$8.02e-10\%$
$U_x = x^2$ $U_y = y^2$	Globale	0.38%	0.37%	0.35%	0.35%
	Micro	0.37%	0.37%	2.47%	29.25%
$U_x = x^3$ $U_y = y^3$	Globale	0.67%	0.64%	0.64%	0.64%
	Micro	0.73%	0.75%	4.94%	58.97%

Le détail de la répartition de l'erreur relative locale $\eta_{cellule}$ est illustré sur les figures suivantes :

- Fig.4.6, Fig.4.7, pour le champ de déplacement U^I linéaire dans Ω
- Fig.4.8, Fig.4.9, pour le champ de déplacement U^{II} quadratique dans Ω
- Fig.4.10, Fig.4.11, pour le champ de déplacement U^{III} cubique dans Ω

L'échelle de l'erreur utilisée est identique sur une même figure mais diffère d'une figure à l'autre, elle représente la mesure d'erreur décrite dans Eq.4.11 et est donnée en pourcentage (%).

On note que pour le champ de déplacement linéaire sur Ω (donc des champs de déformation et de contrainte constants sur le domaine Ω) l'erreur est purement numérique (Fig.4.6, Fig.4.7). Les différents cas de figure : avec et sans transition d'échelle et avec et sans frontière entre le domaine microscopique et complémentaire, sont pratiquement équivalents et ne nous permettent pas de porter un jugement fiable. On attribue ce résultat à la forme des fonctions de forme C-NEM qui reproduisent parfaitement les champs linéaires, l'introduction d'une frontière a pour effet de séparer les influences de part et d'autre de celle-ci et est censée réduire l'interpolation à une simple interpolation linéaire

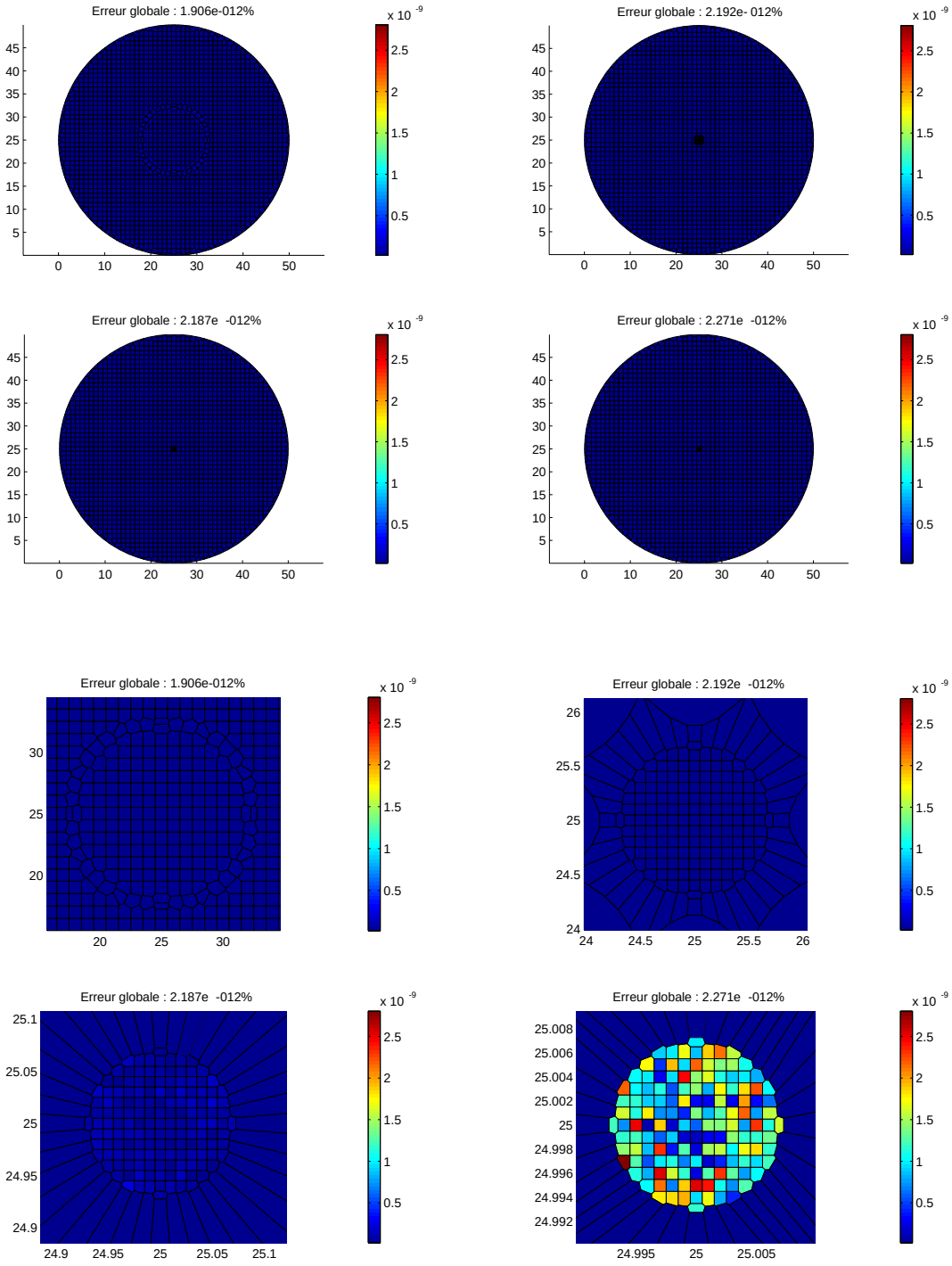


FIG. 4.6 – Distribution de l'erreur relative $\eta_{cellule}$, problème linéaire sans interface.

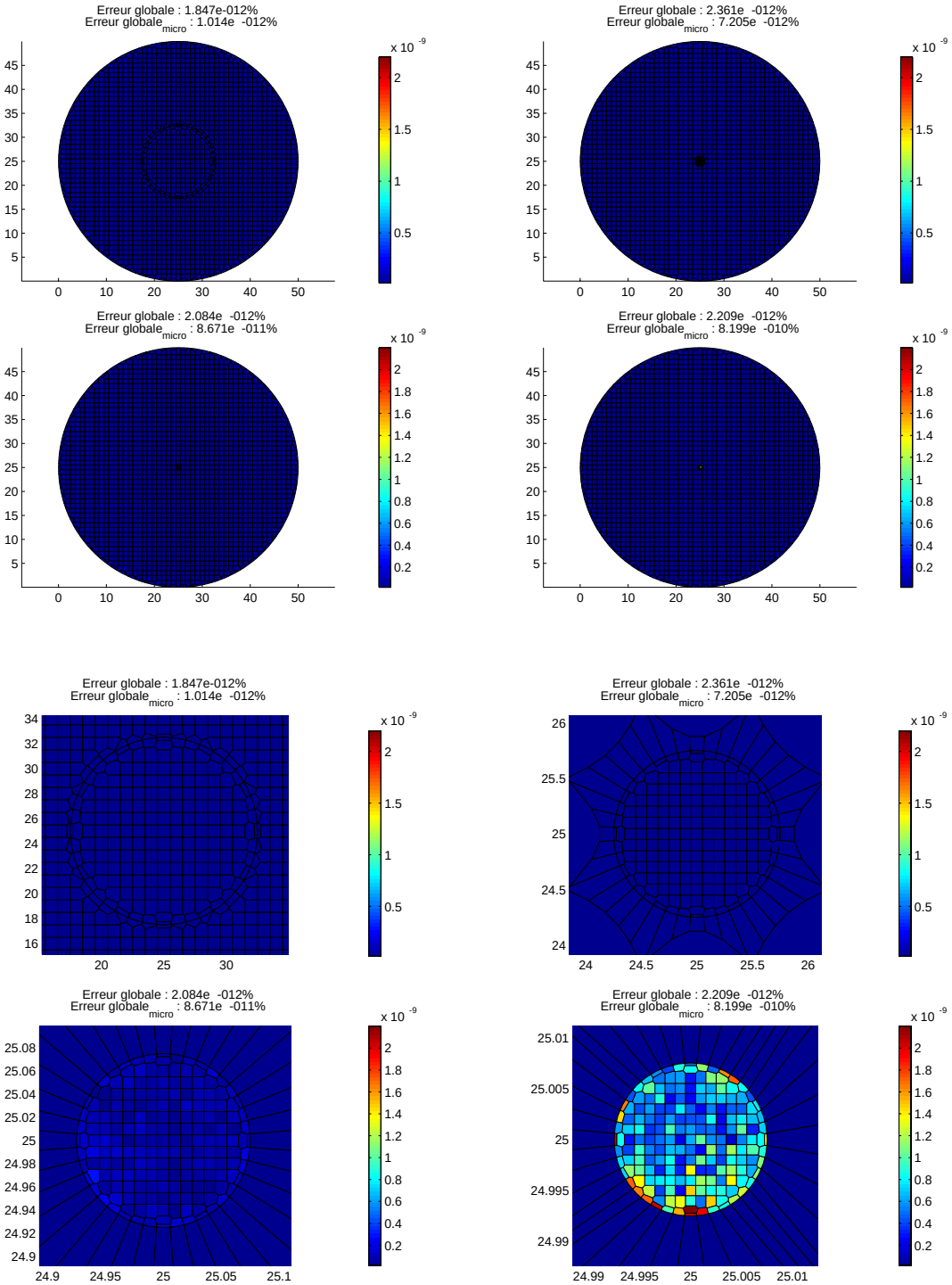


FIG. 4.7 – Distribution de l'erreur relative $\eta_{cellule}$, problème linéaire avec interface.

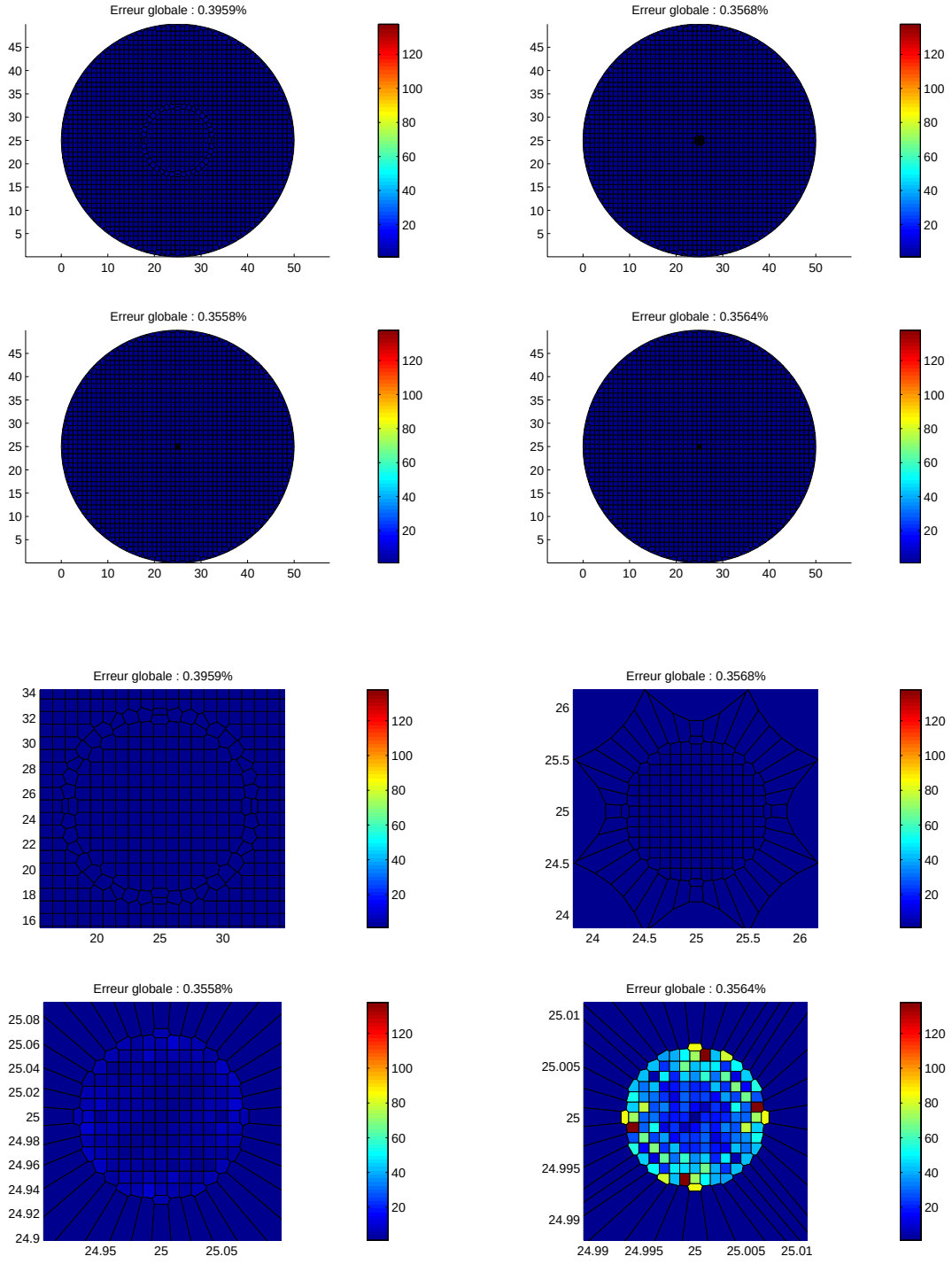


FIG. 4.8 – Distribution de l'erreur relative $\eta_{cellule}$, problème quadratique sans interface.

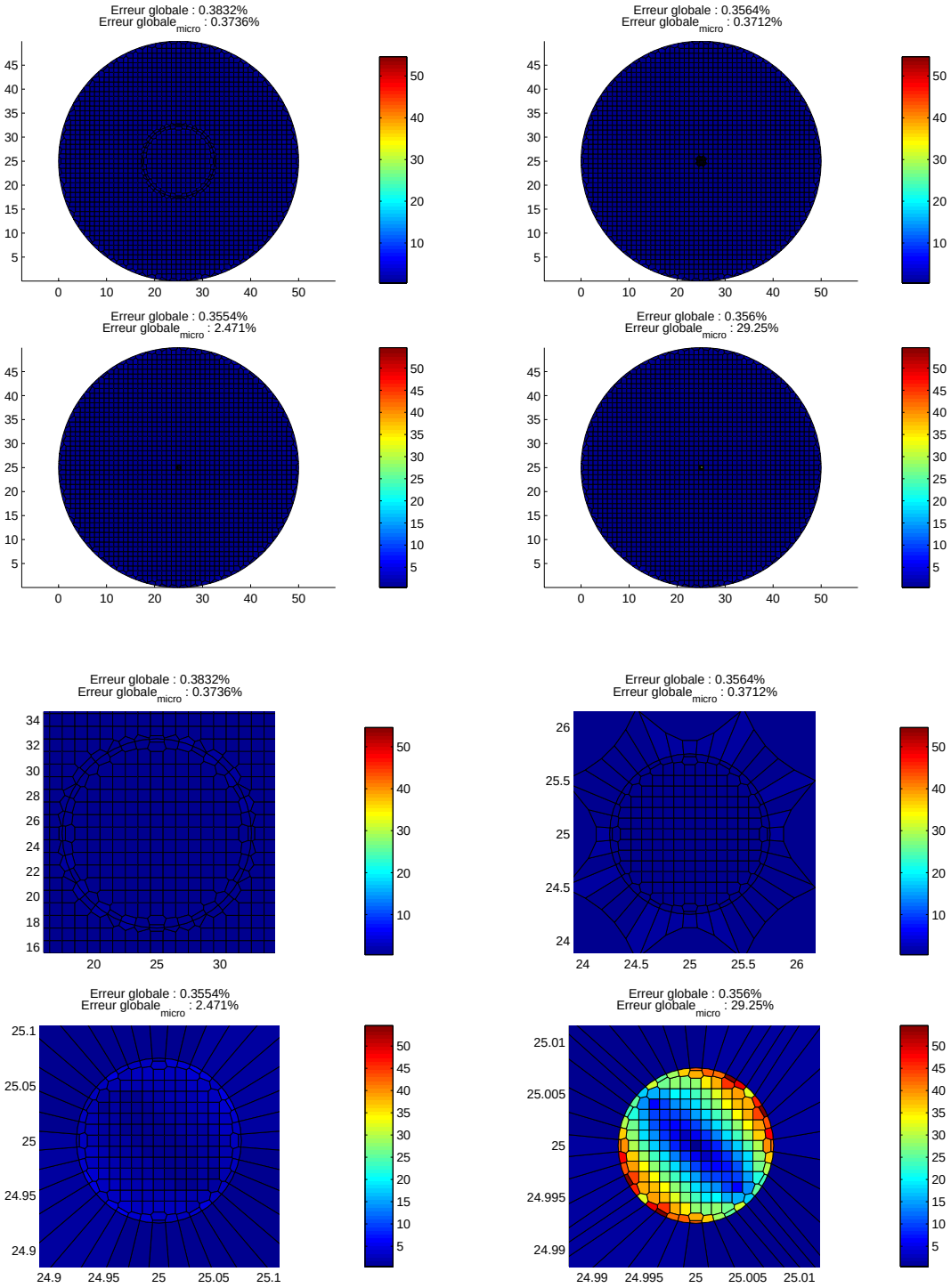


FIG. 4.9 – Distribution de l'erreur relative $\eta_{cellule}$, problème quadratique avec interface.

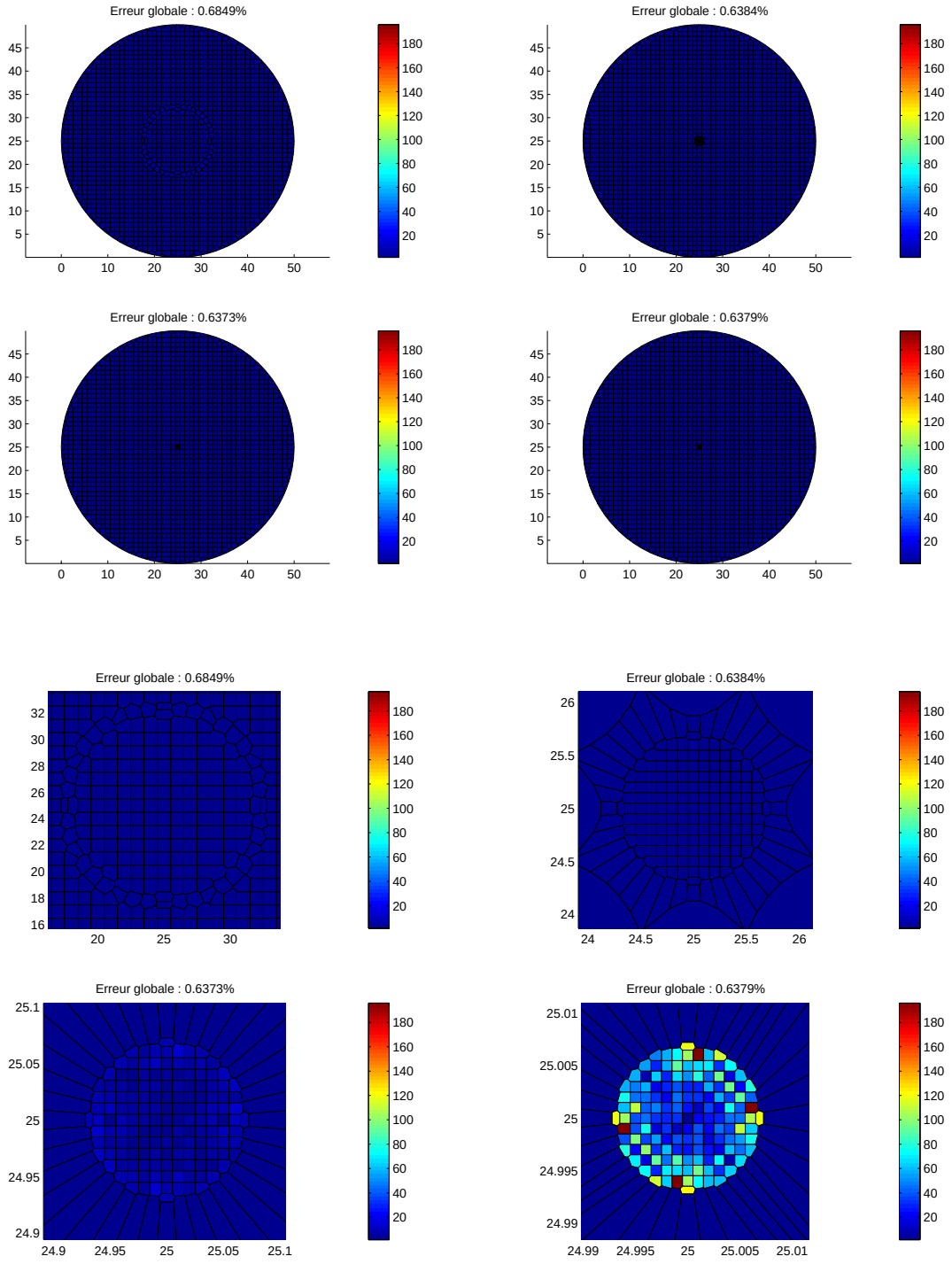


FIG. 4.10 – Distribution de l'erreur relative $\eta_{cellule}$, problème de degré 3 sans interface.

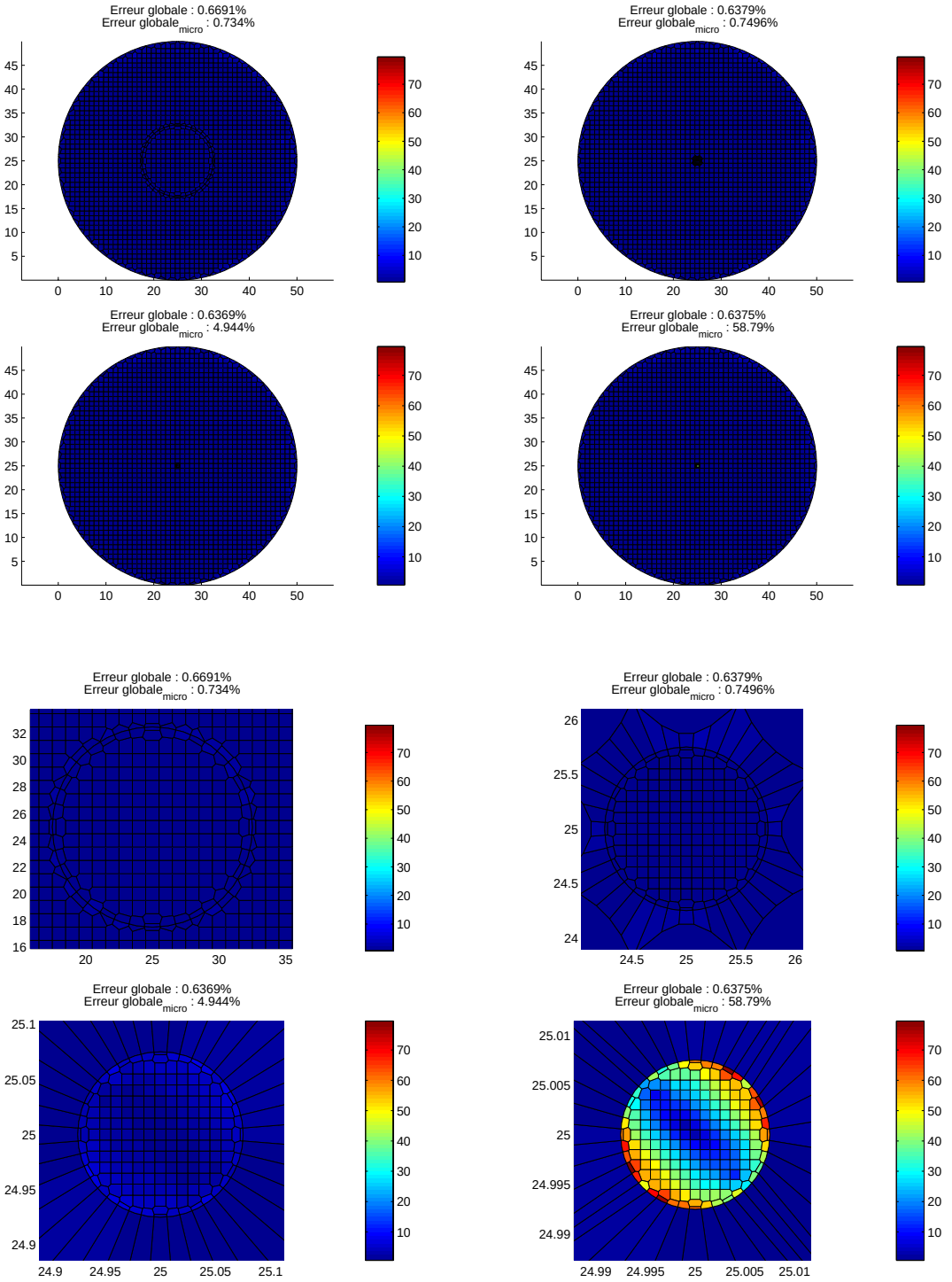


FIG. 4.11 – Distribution de l'erreur relative $\eta_{cellule}$, problème de degré 3 sans interface.

entre deux points de la frontière ce qui ne dégrade aucunement le problème.

Afin de constater les effets de la transition d'échelle, on passe au second cas où le champ de déplacement est quadratique sur Ω (donc des champs de déformation et de contrainte linéaires sur le domaine Ω). Effectivement sur la figure Fig.4.8 dans le cas le plus défavorable (3 ordres de grandeurs entre le pas de discrétisation du domaine microscopique et celui du domaine complémentaire) on note jusqu'à 120% d'erreur relative sur les cellules de Voronoi. Cette erreur n'est pas répercutée sur l'erreur globale du fait de la taille infinitésimale de la cellule de voronoi microscopique par rapport à celle du domaine Ω. Dans le cadre de notre modélisation, une erreur de cet ordre est intolérable du fait que la contrainte sur le domaine microscopique est la base pour l'extension du comportement au domaine complémentaire (pour cette simulation, le domaine complémentaire a son comportement propre qui est le même que celui du domaine microscopique). Ce taux d'erreur se traduirait par un comportement erroné du domaine macroscopique. Si on s'intéresse maintenant à l'effet de la frontière, on constate sur la figure Fig.4.9 que dans le cas le plus défavorable on n'a " que " 50% d'erreur relative sur les cellules de Voronoi. Certes, ce taux d'erreur est très élevé mais reste moindre que dans le premier cas. Pour tenter d'expliquer ce phénomène on rappelle que l'introduction d'une frontière dans la méthode des éléments naturels contraints se base sur un " critère de visibilité ". Les noeuds de part et d'autre de la frontière ne sont plus considérés comme voisin naturels, ce qui a pour effet d'annuler les influences mutuelles entres ces noeuds. Le lien entre noeuds du domaine microscopique et noeuds du domaine complémentaire se fait au travers de la matrice de rigidité et de l'équilibre. En d'autre termes tout se passe comme si l'on posait deux problèmes distincts reliés entre eux par les conditions aux limites d'action/réaction. Ceci a pour effet de " minimiser " l'erreur, qui en plus se concentre plus vers les bords du domaine microscopique (si on considère un domaine microscopique assez grand, la taille de la zone périphérique affectée par l'erreur est petite devant celle du domaine et donc l'erreur globale sur le domaine microscopique Eq.4.10 diminue)

Les même effets sont constatés sur le troisième cas où le champ de déplacement est cubique sur Ω (donc des champs de déformation et de contrainte quadratiques sur le domaine Ω). On note même une aggravation de l'erreur que l'on peut attribuer à une limitation de l'interpolation C-NEM, en effet les fonctions de forme rationnelles utilisées ne

permettent pas de reproduire des champs d'ordre élevé dans le domaine complémentaire.

L'interconnexion directe des domaines microscopiques et du milieu complémentaire introduit une erreur. cette erreur est dûe à la différence de richesse de représentation des champs sur les discrétisations microscopique et macroscopique. Plus l'ordre du champ à représenter est élevé, plus l'erreur générée est grande.

Amélioration et optimisation du modèle : Dans l'état actuel, la modélisation proposée ne nous permet pas d'aborder les problèmes avec une véritable transition d'échelle (au moins 3 ordres de grandeurs), on se doit d'essayer d'améliorer le modèle. Pour cela on dispose de trois constatations importantes :

- La méthode des éléments naturels contraints est insensible à l'hétérogénéité de densité nodale pour les représentations de champs d'ordre peu élevé (linéaire).
- Un très fort gradient de densité nodale (de l'ordre de 3 ordres de grandeurs) entre le domaine microscopique et le domaine complémentaire dégrade fortement la solution dans le cas de représentation de champs d'ordre élevé.
- L'introduction d'une frontière entre le domaine microscopique et le domaine complémentaire contribue à la réduction de l'erreur.

Pour illustrer cela, on reprend le cas le plus défavorable (champ de déplacement cubique sur Ω et rapport de taille de 3 ordres de grandeurs entre le domaine microscopique et complémentaire). On agit sur le premier facteur d'erreur en introduisant des noeuds supplémentaires dans le domaine complémentaire autour du domaine microscopique comme illustré sur la figure Fig.4.12. Plusieurs configurations sont testées, pour chercher la configuration optimale de la transition entre l'échelle microscopique et l'échelle macroscopique :

- un anneau de noeuds du domaine complémentaire qui vient directement entourer le domaine microscopique.
- un anneau de noeuds du domaine complémentaire moins dense tout autour du domaine microscopique qui assure une transition douce entre les domaines.
- la conjugaison des deux premières solutions.

On note que chacune de ces solutions apporte une amélioration, mais la plus notable est celle apportée par la troisième configuration où on note une diminution de l'erreur

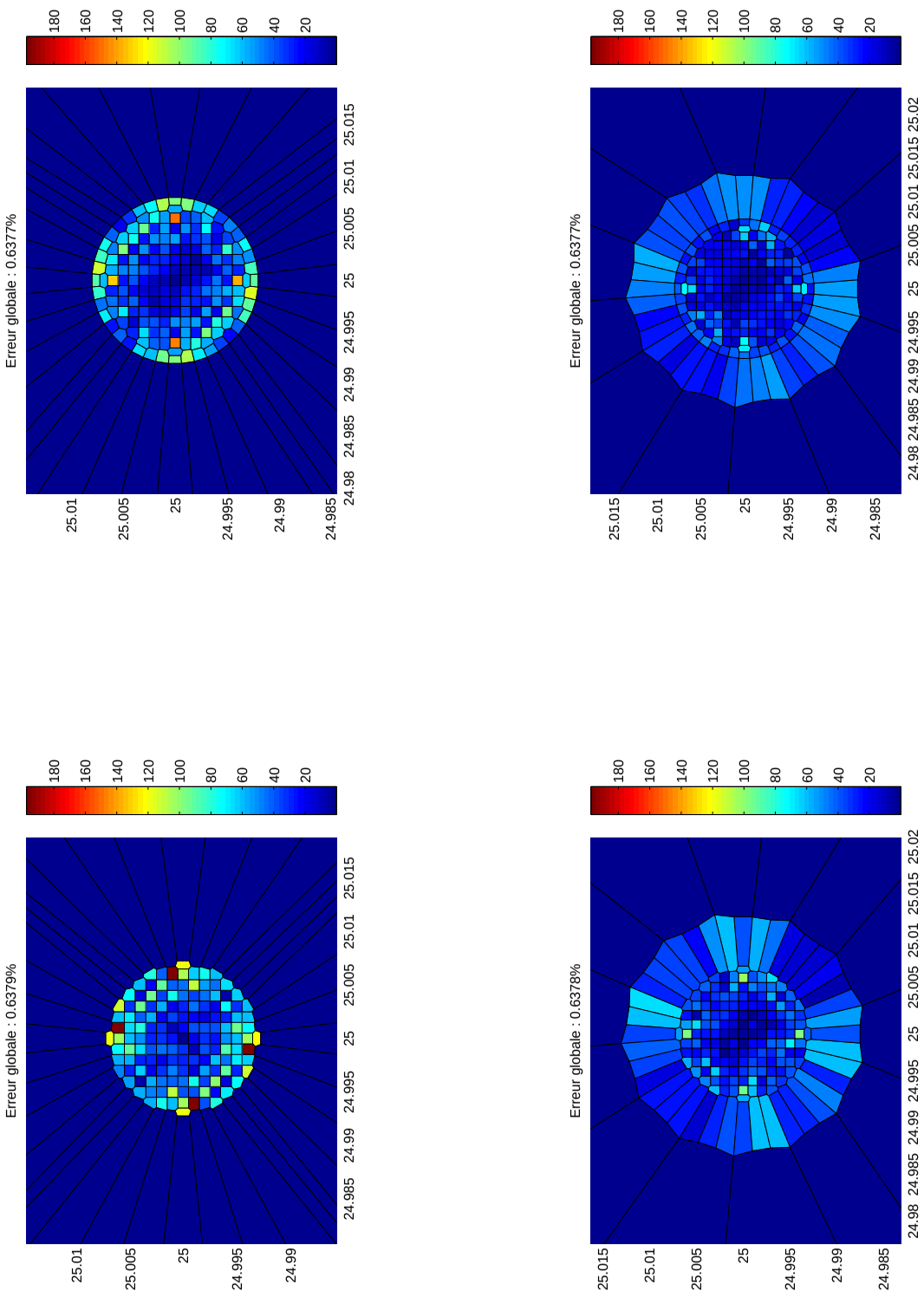


FIG. 4.12 – Distribution de l'erreur relative $\eta_{cellule}$ pour les différentes solutions, sans interface.

maximale décrite dans Eq.4.11 de 180% à 80%.

Ceci reste insuffisant et on introduit donc la frontière entre le domaine microscopique et le domaine complémentaire avec les mêmes configurations nodales testées précédemment comme illustré sur la figure Fig.4.13. On note ici une nette amélioration des résultats, une erreur relative maximale par cellule ne dépassant pas les 20 % dans le cas le plus défavorable et une diminution de la mesure d'erreur globale décrite dans Eq.4.10 de 58.97% à 11.02%.

Remarque : Ces résultats peuvent ne pas paraître à première vue très satisfaisants. Cependant, en tenant compte du fait que l'erreur est très localisée sur une étroite bande périphérique du domaine microscopique, on constate qu'il suffit (selon la complexité du problème à traiter en terme de variation des champs solution) de prendre un pas de discrétisation assez fin sur le domaine microscopique (et donc réduire la taille de la zone périphérique affectée par l'erreur) pour quasiment annuler l'effet global de cette erreur.

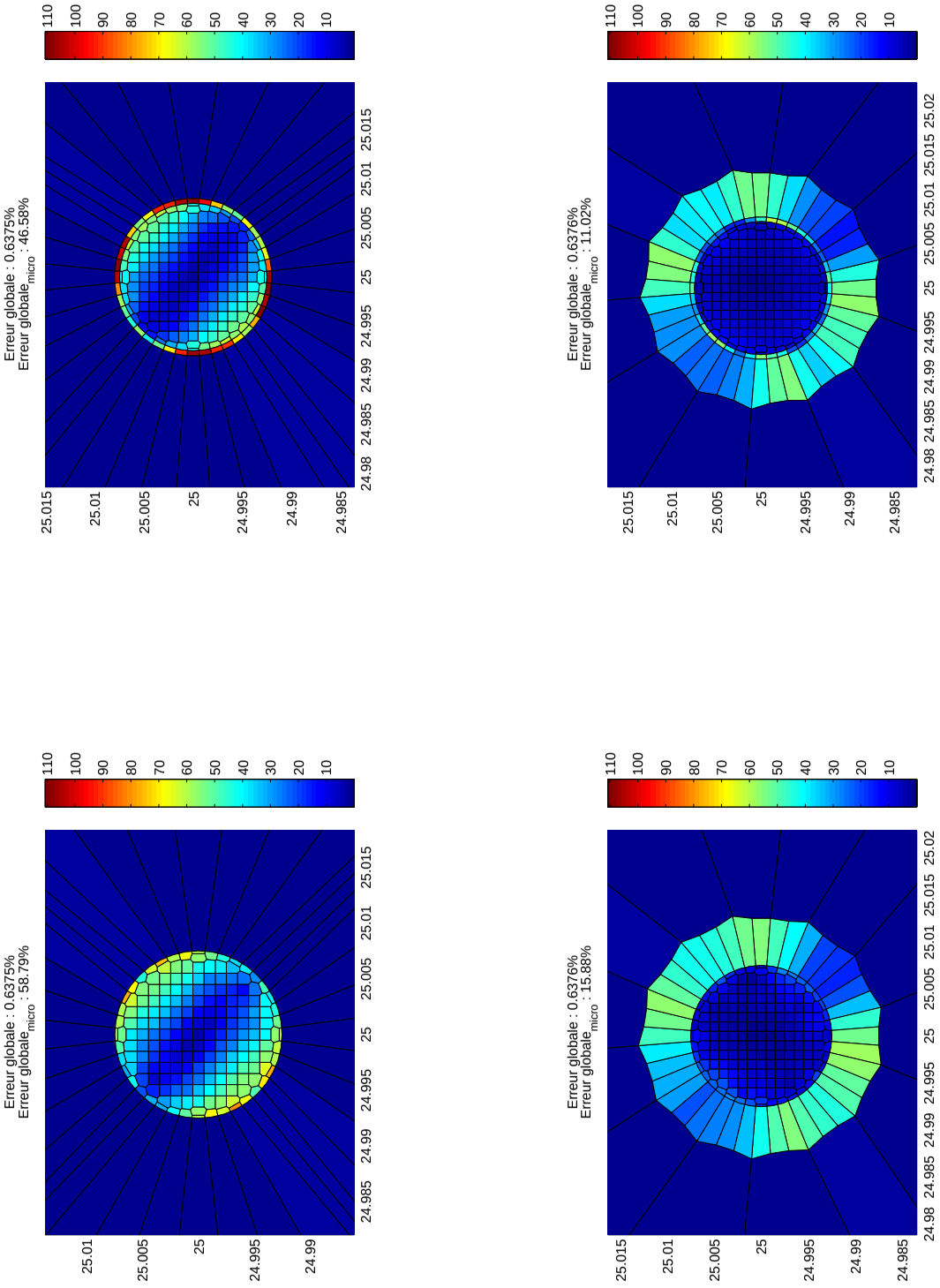


FIG. 4.13 – Distribution de l'erreur relative $\eta_{cellule}$ pour les différentes solutions, avec interface.

4.2 Validation, critiques et limitations du modèle d'extension du comportement proposé

4.2.1 Validation du modèle d'extension du comportement

Comme première validation de la technique d'extension de comportement proposée, nous allons vérifier que les contributions non locales s'annulent pour une bonne estimation du comportement homogénéisé. Pour cela, considérons le problème exposé dans la section 4.1.1 (Fig. 4.1).

Le domaine Ω est cette fois partitionné en domaines microscopiques $(\Omega_i)_{i=1...m}$ où on définit un comportement correspondant à un matériau homogène isotrope, et un domaine complémentaire Ξ sans comportement propre (le comportement sera déduit par la technique d'extension proposée).

Nous avons donc pour tout domaine microscopique Ω_i : $\widehat{C} = C$. La formulation variationnelle du problème décrite dans Eq.3.17 se réduit donc au problème classique :

Trouver un champ de déplacements régulier sur Ω *vérifiant les conditions aux limites essentielles :* $U = U_c$ *sur* $\partial_U\Omega$ *avec* $\partial\Omega = \partial_U\Omega \cup \partial_F\Omega$

ainsi que les équations d'équilibre

$$\int_\Omega Tr\left[\varepsilon_{|M}(U^*)\ C\ \varepsilon_{|M}(U)\right] dM = \int_\Omega U^* f_c dM + \int_{\partial_F\Omega} U^* F_c d\Gamma \qquad (4.12)$$

$$\forall U^* \ \textit{tel que}\ U^* = 0 \ \textit{sur}\ \partial_U\Omega$$

Les différentes discrétisations du problème sont montrées dans la figure Fig. 4.14, où nous représentons seulement les centres de chaque domaine microscopique. Chaque domaine microscopique est décrit en utilisant 600 noeuds, ce qui donne un modèle fin avec plus de 200000 noeuds.

Les résultats de simulation sont portés sur la figure Fig.4.15, où nous présentons l'erreur relative globale décrite dans Eq.4.3 ainsi que la moyenne de l'erreur relative globale sur les domaines microscopiques décrite dans Eq.4.10. On note un taux de convergence des domaines microscopiques supérieur à celui du problème global. Ceci s'explique par deux facteurs :

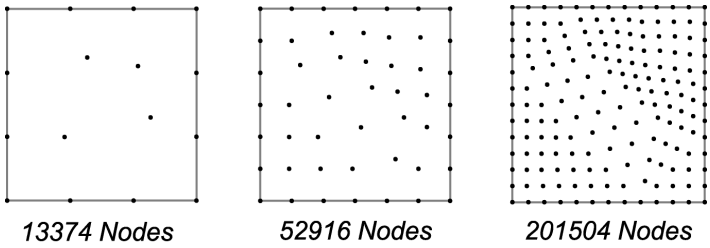


FIG. 4.14 – Discrétisations : distributions des domaines microscopiques.

- Les conditions aux limites des problèmes microscopiques sont données par le milieu complémentaire, une grande erreur sur la solution dans ce domaine entraîne l'imposition de mauvaises conditions aux limites et donc la résolution de problèmes différents des problèmes initiaux.
- La forme de la solution du problème décrite dans l'Eq.4.2, est telle que sur le bord $(x = L)$ la contrainte est très proche de 0 (pour toutes les composantes du tenseur de contrainte). On est donc confronté à un problème numérique (du type $\frac{\varepsilon \to 0}{\varepsilon \to 0}$) lors de l'évaluation de l'erreur relative sur les domaines microscopiques proches de ce bord, et on obtient une erreur relative " artificiellement " élevée.

Le raffinement de la discrétisation améliore donc la solution globale de manière évidente, et surtout la solution microscopique en permettant l'imposition des bonnes conditions aux limites sur les bords des domaines microscopiques.

On note que pour une erreur relative d'environ 4% sur la solution globale, on obtient une erreur comparable sur la solution microscopique, ceci nous assure que pour une discrétisation globale du problème satisfaisante (au sens traditionnel du raffinement du maillage que l'on retrouve dans les méthodes FEM) on obtiendra une solution microscopique tout aussi satisfaisante.

4.2.2 Analyse des limites du modèle d'extension du comportement, longueur de variation des propriétés du materiau

Nous allons à présent analyser un facteur important dans l'approche d'extension de comportement proposée : Quel est le nombre de domaines microscopiques nécessaire pour une bonne représentation du comportement global ? Quelle est la disposition optimale de

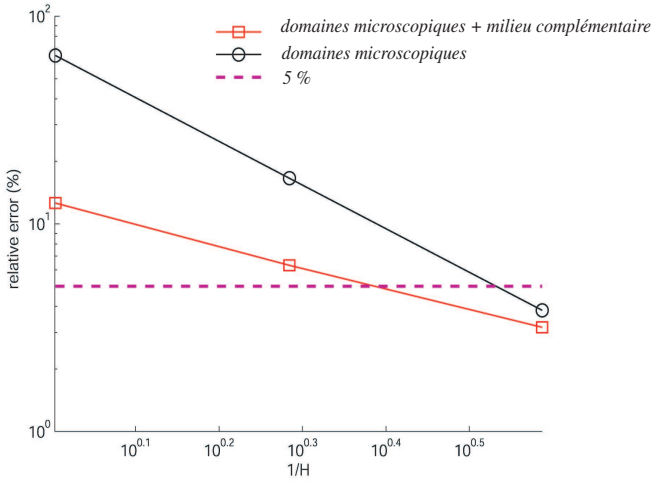


FIG. 4.15 – Analyse de la convergence : erreur relative globale et microscopique.

ces derniers ?

On rappelle que dans la section 3.2, nous avons émis une hypothèse fondatrice de l'approche proposée : on suppose que les variations spatiales des champs de contrainte et de déformation sont assez lisses dans le domaine complémentaire. C'est cette régularité des champs qui conditionne le nombre et la localisation des domaines microscopiques. Une disposition optimale est obtenue lorsqu'on minimise les fluctuations du gradient spatial du comportement avec le minimum de domaines microscopiques.

Afin de caractériser ce gradient spatial du comportement, nous introduisons la notion de " longueur caractéristique de variation " qui représente une période de l'évolution spatiale du comportement (ou " pseudo période " dans le cas d'une évolution non périodique). Nous allons illustrer cela sur le cas d'un problème de traction uni axiale décrit dans la figure Fig.4.16. On discrétise ce problème en utilisant une grille régulière de $X \times Y \longrightarrow 3 \times 22$. Le comportement est supposé élastique isotrope et la solution du problème pour un chargement en déplacement imposé $U_d(\mathbf{x} \in \partial_U \Omega) = U_0$ est de la forme :

$$\begin{cases} U_x = \frac{U_0}{L_x}\, x \\ \\ U_y = -\nu\, \frac{U_0}{L_x}\, y \end{cases} \tag{4.13}$$

On peut distinguer trois cas de figure :

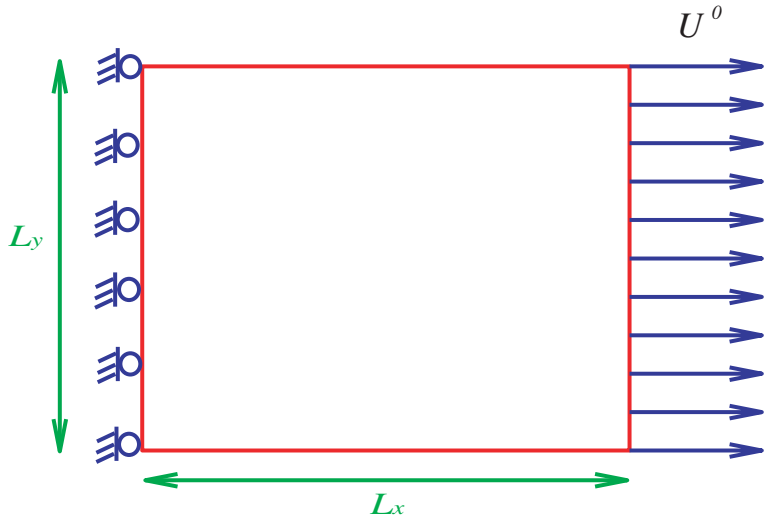


FIG. 4.16 – Définition du problème test.

- Cas des longueurs de variations des caractéristiques du matériau de l'ordre de la taille des domaines microscopiques.
- Cas des longueurs de variations des caractéristiques du matériau de l'ordre de la taille du problème globale.
- Cas des longueurs de variations des caractéristiques du matériau comprisent entre la taille des domaines microscopiques et celle du problème globale.

Cas des grandes longueurs de variation : On définit sur le problème de la figure Fig.4.16 un comportement élastique avec un module d'Young $E = E_0 + E^{fluct.}$. La partie fluctuante du comportement $E^{fluct.} = E_0^{fluct.} \frac{y}{L_y}$ a une longueur caractéristique de variation L_y de l'ordre de la taille du problème global. On localise les domaines microscopiques de manière à pouvoir représenter cette variation, comme le montre la figure Fig.4.17.

On représente sur la figure Fig.4.18 le champ de contrainte résultat du calcul utilisant la stratégie d'extension du comportement ainsi que celui obtenu de manière analytique. Le résultat obtenu est très bon, un nombre minimal de domaines microscopiques (ici on utilise 3 domaines sur l'axe y mais en réalité seulement deux domaines localisés au $y = 0$ et $y = L_y$ suffisent) garantit une erreur relative globale pratiquement nulle (de l'ordre de $0,1\%$). La figure Fig.4.19 montre le détail de la distribution de cette erreur. On note

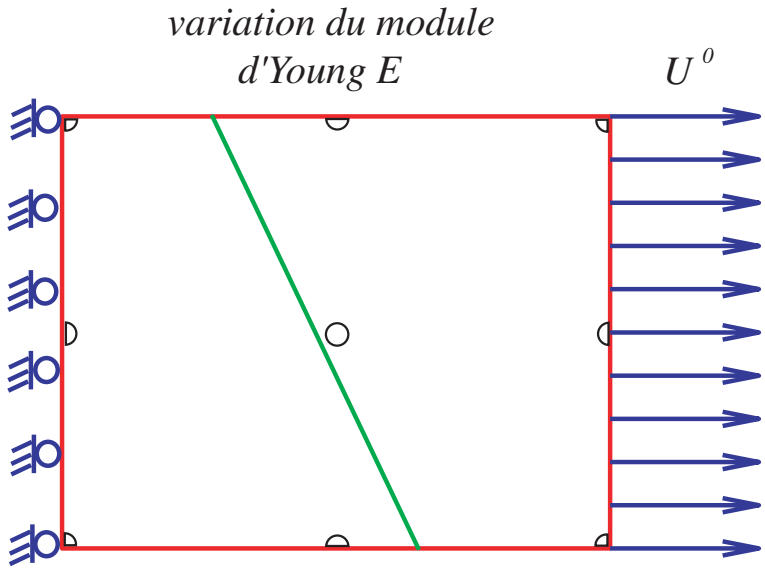


FIG. 4.17 – Définition du problème test : comportement macroscopique linéaire, disposition des domaines microscopiques.

une qualité homogène de la solution autant sur les domaines microscopiques que sur le domaine complémentaire.

Considérons maintenant un cas un peut plus élaboré où le module d'Young $E = E_0 + E^{fluct.}$ a une partie fluctuante du comportement $E^{fluct.} = E_0^{fluct.} Cos\left(2\frac{2\pi}{L_y}y\right)$. La longueur caractéristique de variation $\frac{L_y}{2}$ reste du même ordre que celui de la taille du problème global, mais avec un gradient de variation non interpolable par les fonctions de forme éléments naturels associées aux domaines microscopiques.

Pour le premier calcul on garde la disposition des domaines microscopiques définie pour le cas de variation linéaire de E. Les résultats du calcul sont reportés sur la figure Fig.4.20 qui décrit le champ contrainte résultat du calcul utilisant notre stratégie d'extension du comportement ainsi que celui obtenu de manière analytique. On observe ici que l'hypothèse de régularité n'a pas été respectée, la disposition des domaines microscopiques utilisée agit comme un filtre qui gomme toutes les fluctuations non interpolables, ce qui entraîne la définition d'un comportement lissé " moyen " pour le domaine complémentaire. L'erreur globale est assez grande (34%), et on peut noter sur la figure Fig.4.21 qu'elle se répartit sous la même forme que la variation spatiale du comportement.

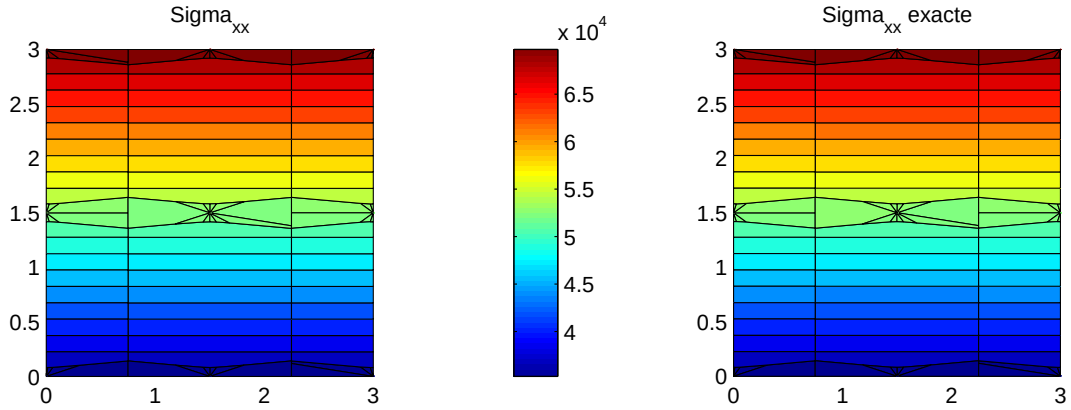


FIG. 4.18 – Évolution linéaire du module d'Young, champ de contrainte solution exacte et calculée.

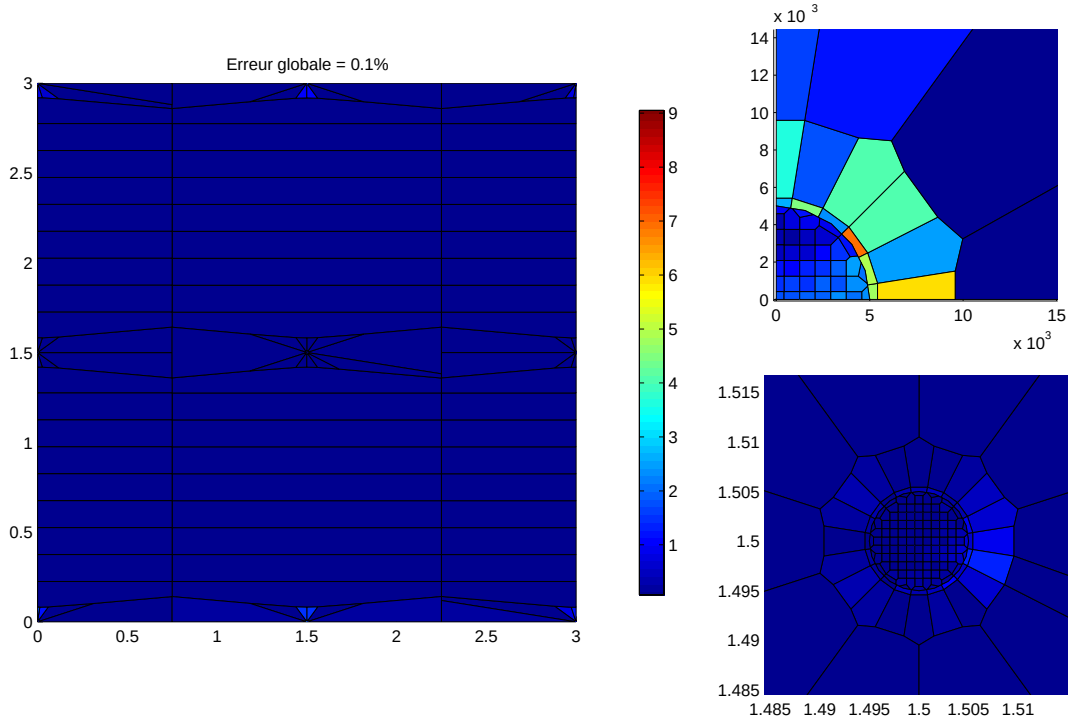


FIG. 4.19 – Évolution linéaire du module d'Young, erreur relative $\eta_{cellule}$.

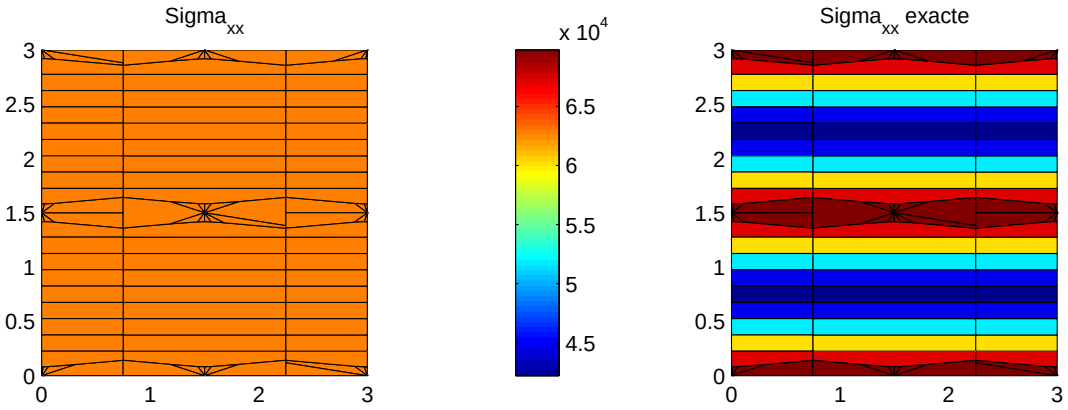


FIG. 4.20 – Évolution sinusoïdale du module d'Young, champ de contrainte solution exacte et calculée.

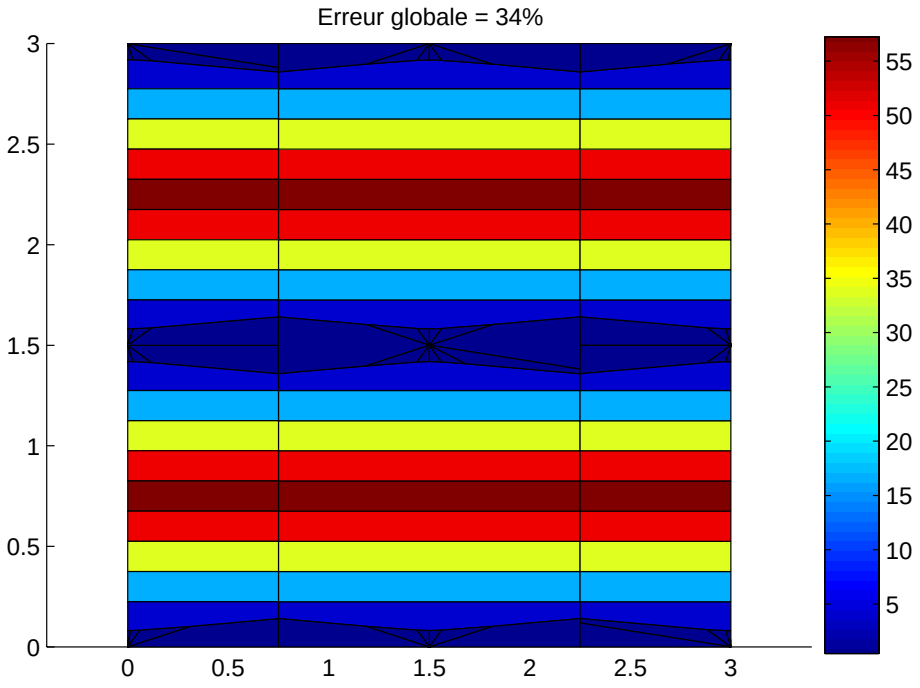


FIG. 4.21 – Évolution sinusoïdale du module d'Young, erreur relative $\eta_{cellule}$.

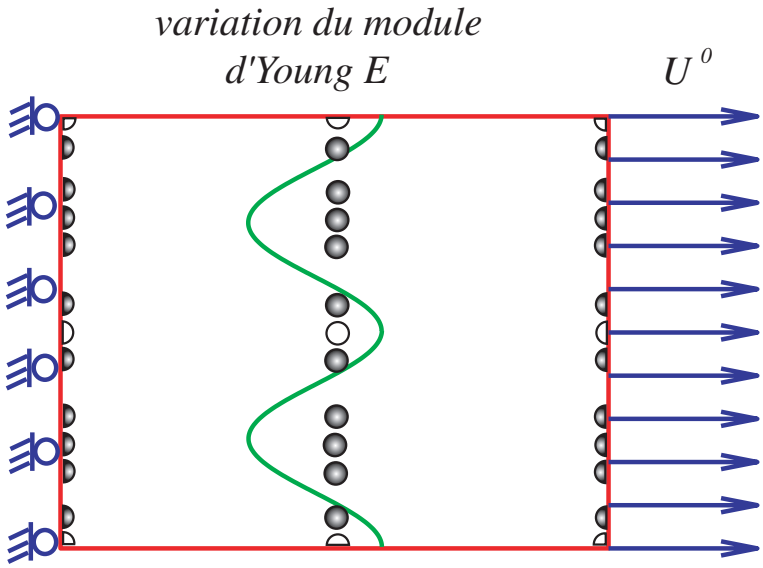


FIG. 4.22 – Définition du problème test : comportement macroscopique sinusoïdal.

Pour pouvoir traiter ce cas il faut définir une distribution de domaines microscopiques compatible comme celle illustrée dans la figure Fig.4.22. Les domaines additionnels sont représentés par des cercles pleins, et leur distribution respecte l'hypothèse de régularité précédemment énoncée. Les résultats du calcul sont reportés sur la figure Fig.4.23 qui décrit le champ contrainte résultat du calcul utilisant notre stratégie d'extension du comportement ainsi que celui obtenu de manière analytique. On note à présent une nette amélioration des résultats, on retrouve la forme quasi exacte (à la définition du maillage global prés) du champs de contrainte. L'erreur relative globale retombe à 1% et le détail de répartition illustré dans la figure Fig.4.24 est très satisfaisant.

Cas des petites longueurs de variation : Traitons maintenant le cas où la longueur caractéristique de variation du comportement est du même ordre que celle de la taille des domaines microscopiques L_{Ω_i}.

On reprend le problème initial et on redéfinit dessus un comportement élastique isotrope avec un module d'Young $E = E_0 + E_0^{fluct} \cdot Cos\left(2\frac{2\pi}{L_{\Omega_i}}y\right)$. La partie fluctuante du comportement a une longueur caractéristique de variation de l'ordre de la moitié de la taille des domaines microscopiques.

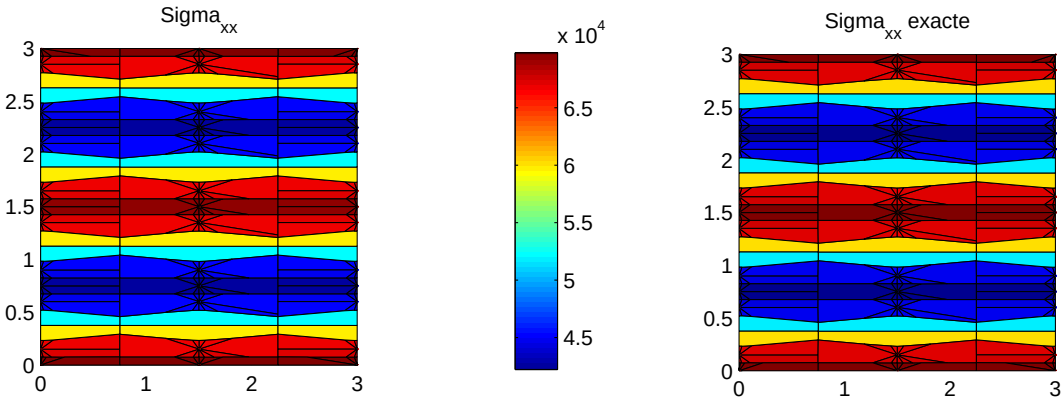


FIG. 4.23 – Évolution sinusoïdale du module d'Young, champ de contrainte solution exacte et calculée.

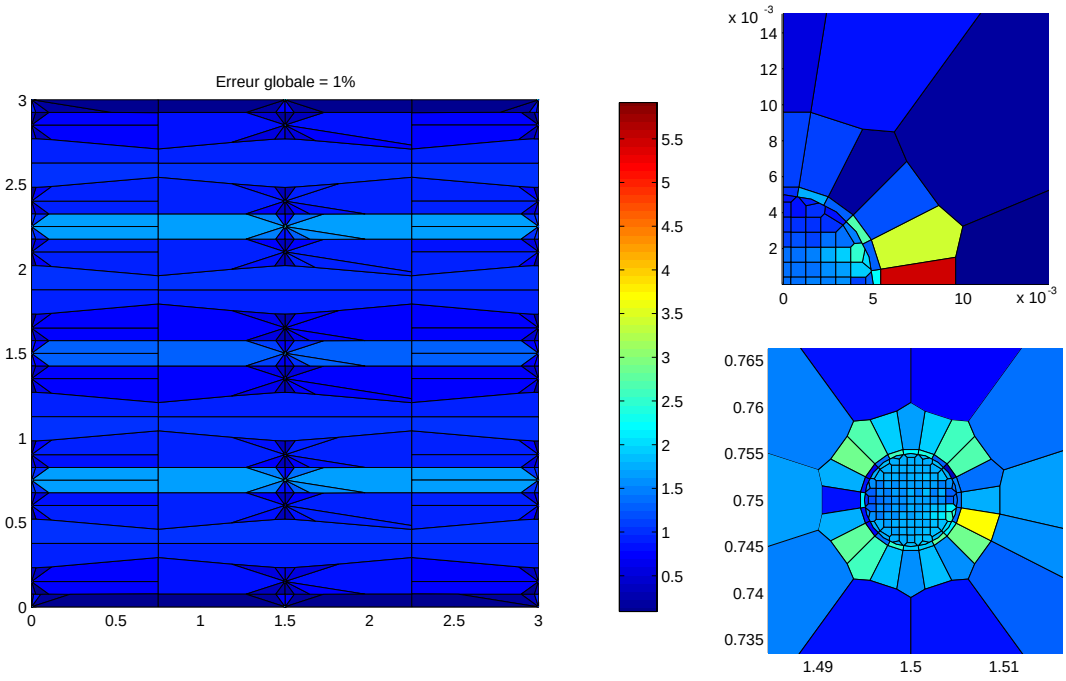


FIG. 4.24 – Évolution sinusoïdale du module d'Young, Erreur relative $\eta_{cellule}$.

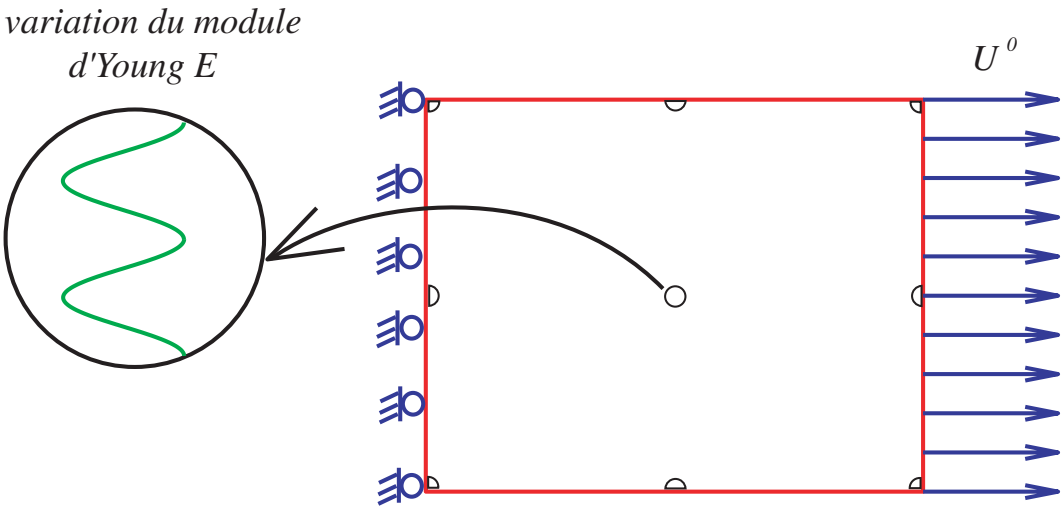


FIG. 4.25 – Définition du problème test : longueur caractéristique du matériau compatible avec la taille du domaine microscopique.

Comme l'évolution du comportement est purement microscopique on reprend la distribution de domaines microscopiques qui a servi à la résolution du cas d'évolution macroscopique linéaire du comportement (on notera toutefois que pour ce cas il n'y a pas d'évolution macroscopique et un domaine microscopique est suffisant pour définir le comportement de tout le domaine complémentaire). Ce problème est illustré dans la figure Fig.4.25.

Les résultats du calcul sont reportés sur la figure Fig.4.26 qui décrit le champ contrainte résultat du calcul utilisant la stratégie d'extension du comportement ainsi que celui obtenu de manière analytique. Le résultat global est bon comme le montre l'erreur relative globale de 2% et le détail de sa répartition illustré dans la figure Fig.4.27. Si on exclut la zone périphérique, on peut modéliser et voir l'effet de contraintes macroscopiques sur la microstructure avec précision même si cette dernière se retrouve directement sur le bord.

Cas des longueurs de variation intermédiaires : On reprend le problème précédent avec la même distribution de domaines microscopiques et une longueur caractéristique de variation du comportement plus grande que la taille des domaines microscopiques. Ce problème est illustré dans la figure Fig.4.28.

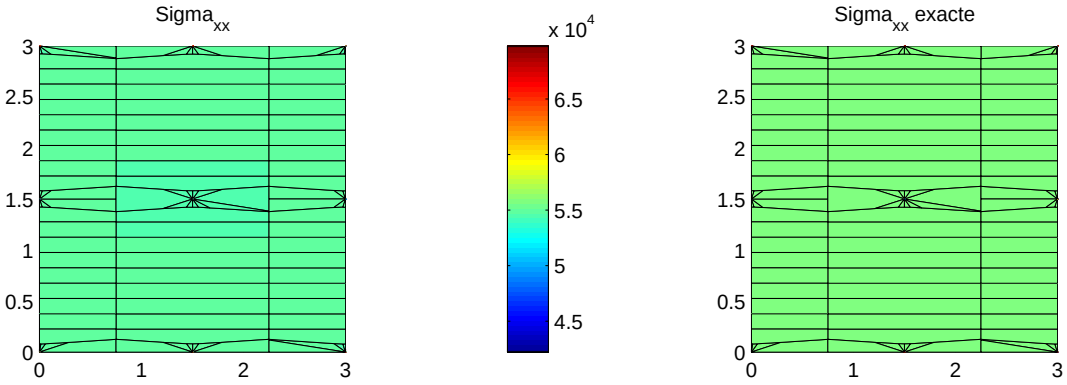


FIG. 4.26 – Champ de contrainte solution exacte et calculée.

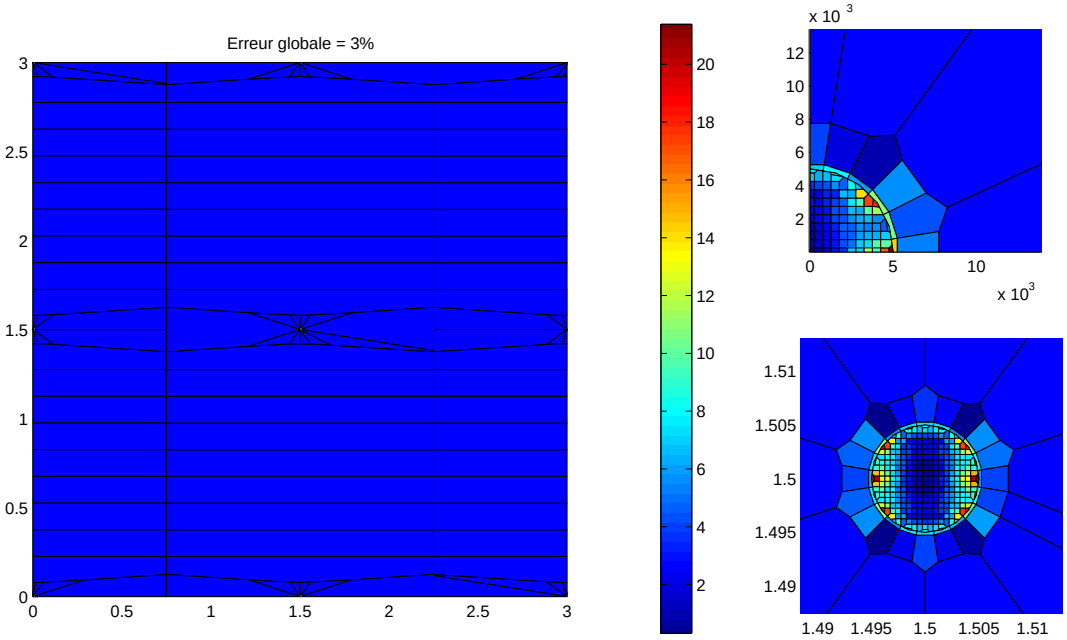


FIG. 4.27 – Erreur relative $\eta_{cellule}$.

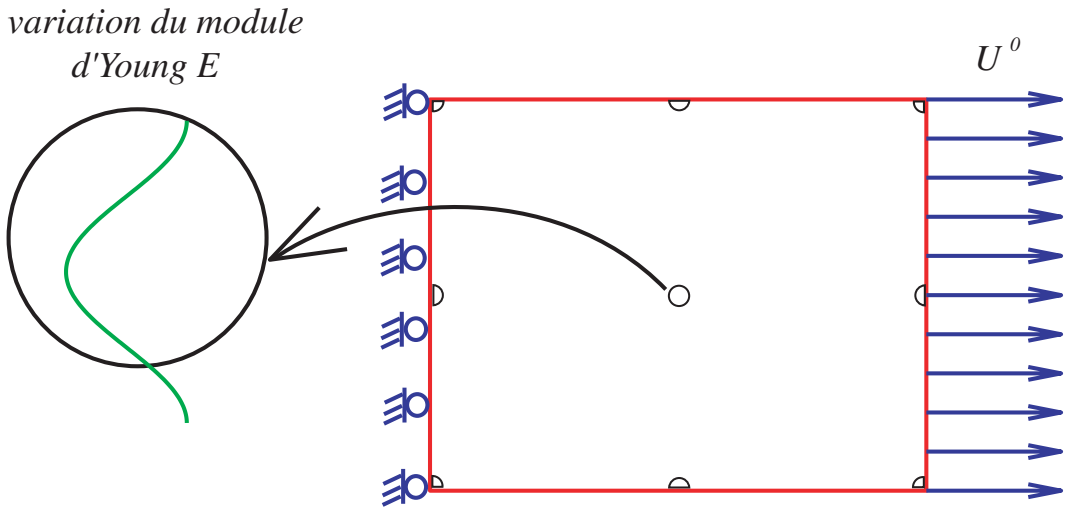


FIG. 4.28 – Définition du problème test : longueur de caractéristique du matériau non compatible avec la taille du domaine microscopique.

Les résultats du calcul sont reportés sur la figure Fig.4.29 qui décrit le champ contrainte résultat du calcul utilisant la stratégie d'extension du comportement ainsi que celui obtenu de manière analytique. L'erreur relative globale est de 13%, elle est homogène sur tout le domaine comme le montre la figure Fig.4.30.

le résultat obtenu est prévisible, dans la mesure où le comportement homogénéisé affecté au domaine complémentaire est erroné car ne considérant pas toutes les variations du comportement à l'échelle microscopique. Une manière simple d'y remédier est d'augmenter la taille des domaines microscopiques afin de tenir compte de ces variations.

Cette solution a cependant une limite évidente, qui est la dégénérescence vers des domaines microscopiques de taille très importante et donc une modélisation microscopique totale du problème.

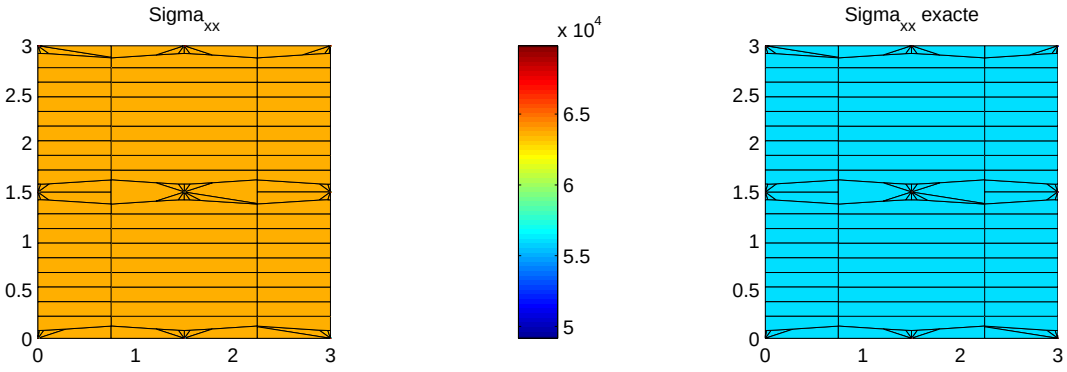


FIG. 4.29 – Champ de contrainte solution exacte et calculée.

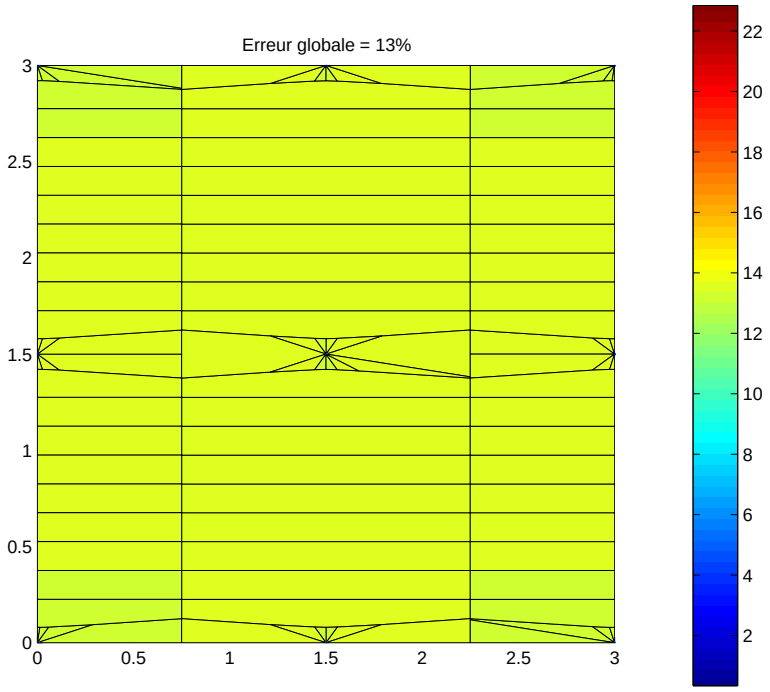


FIG. 4.30 – Erreur relative $\eta_{cellule}$.

Conclusion : A partir des exemples traités on peut conclure que :

- Dans le cas de longueurs de variations des caractéristiques du matériau de l'ordre de la taille des domaines microscopiques ou inférieurs, on obtient de bons résultats qui nous permettent d'envisager d'utiliser notre approche dans l'étude des problèmes avec une microstructure sous-jacente.
- Dans le cas de longueurs de variations des caractéristiques du matériau de l'ordre de la taille du problème global, on obtient de bons résultats à condition de respecter l'hypothèse de régularité. La densification des noeuds dans les motifs microscopiques est superflue.
- Dans le cas de longueurs de variations des caractéristiques du matériau comprisent entre la taille des domaines microscopiques et celle du problème global, l'approche proposée dégénère vers une modélisation microscopique totale du problème. On a le choix entre multiplier les domaines microscopiques ou augmenter leurs tailles afin de rendre compte des variations du comportement. Ceci conduit à la résolution de problèmes de très grande taille que même la stratégie de résolution proposée ne peut réduire de manière satisfaisante.

On réservera donc notre approche pour les problèmes où la longueur de variation du comportement est petite.

4.3 Exemples numériques

Pour tester le potentiel de notre stratégie de modélisation multi-échelles, nous l'appliquons au problème représenté dans la figure Fig. 4.31. Un carré découpé dans un stratifié cylindrique, le stratifié est constitué d'un empilement de 3000 couches fines d'épaisseur constante.

Pour obtenir un problème à solution exacte connue, nous considérons que le stratifié cylindrique est soumis à une pression uniforme sur son bord, le comportement des couches est élastique linéaire avec des propriétés du matériau différentes pour les couches paires et impaires. Une couche L_i est repérée par son rayon r_i, elle est caractérisée par un module d'Young E_1 et un coefficient de Poisson ν_1 pour i paire et par E_2,ν_2 pour i impaire. La solution analytique s'obtient aisément en considérant l'axisymétrie du problème :

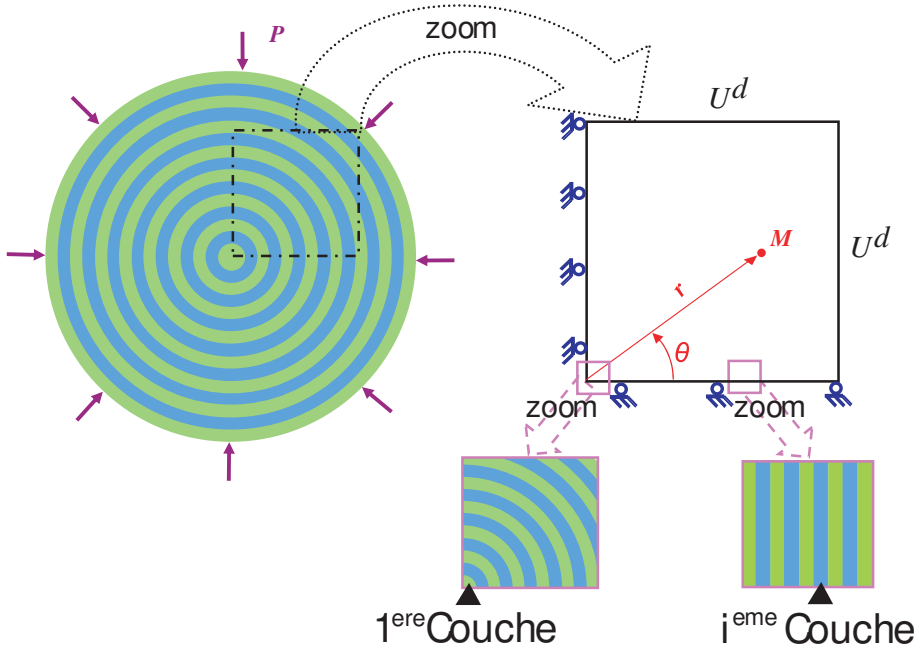


FIG. 4.31 – Problème hétérogène introduisant deux matériaux de propriétés différentes.

$$U = U_r(r)\ e_r$$

Avec :

$$U_r(r) = A_i\, r + \frac{B_i}{r} \qquad pour\ r\ dans\ L_i \tag{4.14}$$

Où : e_r est le vecteur unitaire de la direction radiale. A_i, B_i sont des constantes calculées en tenant compte de la condition de transmission d'effort, de la continuité des déplacements entre deux couches successives et des conditions aux limites.

De ce problème (Eq.4.14)on extrait les conditions aux limites en déplacement U^d appliquées à la frontière du carré isolé $\partial_U\Omega$, complété de conditions de symétrie sur les bords $x = 0$ et $y = 0$.

La figure Fig.4.32 décrit l'évolution spatiale microscopique et macroscopique du matériau, ainsi que la disposition des domaines microscopiques. Les longueurs de variation microscopiques et macroscopiques du comportement sont compatibles avec l'hypothèse de régularité et l'ensemble de domaines microscopiques utilisé.

La solution calculée en utilisant le modèle multi-échelles proposé est illustrée sur la

figure Fig.4.33. On y présente le champ de contrainte équivalent de Von Mises aux deux échelles microscopique et macroscopique. On peut clairement voir la différence entre les couches successives et l'effet de microstructure.

L'erreur relative globale est de 5%, sa répartition est illustrée dans la figure Fig.4.34. On constate que l'erreur à l'échelle microscopique est concentrée dans la zone périphérique à l'interface des domaines microscopiques avec le milieu complémentaire, l'état de contraintes à l'intérieur des domaines et même sur le bord du problème est d'une qualité tout à fait satisfaisante.

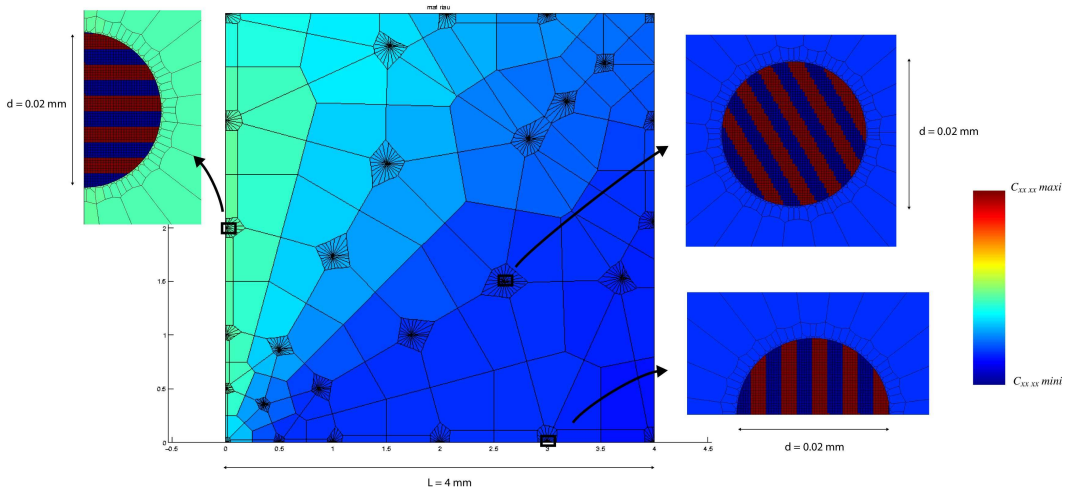


FIG. 4.32 – Distribution de la composante C_{11} du tenseur d'élasticité.

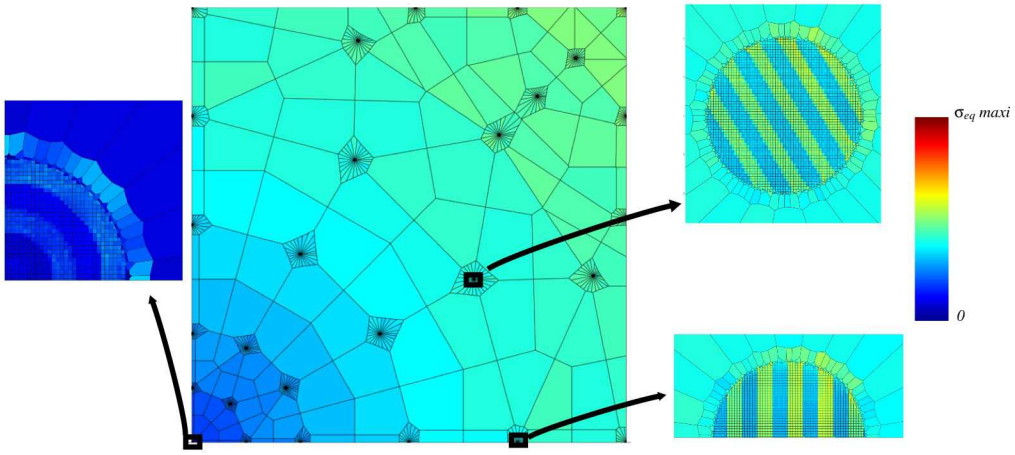


FIG. 4.33 – Champ de contrainte équivalente de Von Mises.

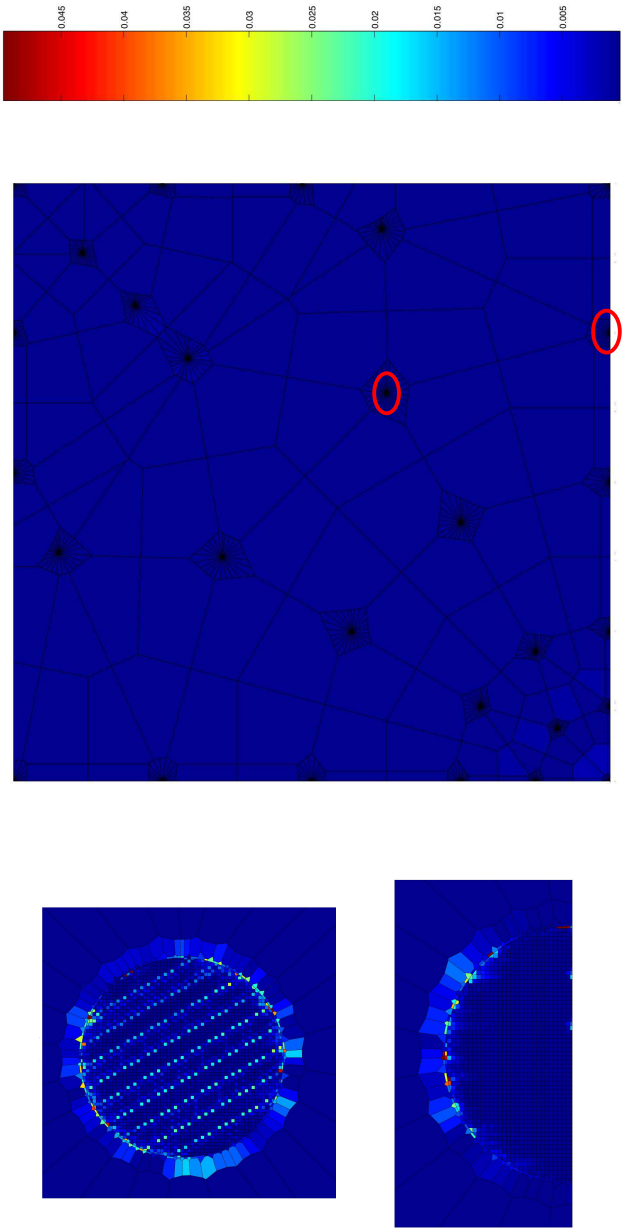


FIG. 4.34 – Distribution de l'erreur $\eta_{cellule}$

Chapitre 5

Stratégie de résolution

Comme nous l'avons présenté dans la section 3.1, la modélisation proposée suppose une discrétisation unique et couplée du problème à traiter. Ajouter à cela le nombre de domaines microscopiques nécessaires pour satisfaire l'hypothèse de régularité énoncée dans la section 3.2, base de notre modèle d'extension du comportement, on obtient rapidement un problème de très grande taille difficilement abordable par les techniques de résolution classiques. De plus les moyens de calcul traditionnels semblent avoir atteint un seuil en terme de puissance de calcul, et on assiste actuellement à une évolution de l'architecture des machines vers des machines équipées de plusieurs processeurs destinés à travailler en parallèle sur la même application. Bien évidemment, il est nécessaire d'adapter les algorithmes de résolution numérique à ce type de calculateur.

5.1 Présentation des concepts fondamentaux de l'approche

Partant de ces constats, le développement d'une stratégie de résolution adaptée s'impose et doit apporter rapidité, robustesse et facilité d'implémentation. L'obtention d'une stratégie de résolution adéquate passe par l'intégration de certains concepts :

5.1.1 Les méthodes de base réduite :

Les méthodes des éléments en base réduite [39], [42], [64], sont particulièrement attractives par la diminution du nombre de degrés de liberté qu'elles entraînent pour l'ap-

proximation d'un système d'équations aux dérivées partielles. L'idée principale sur laquelle repose cette approche est la définition de fonctions de base contenant une grande part de l'information sur le système considéré. L'idée fondatrice pour la définition de ces fonctions de base est de calculer précisément des approximations de la solution pour un certain nombre de cas prédéfinis. Pour un cas générique une approximation de la solution est alors recherchée dans l'espace engendré par ces solutions particulières.

Cependant une question importante se pose, que faire si l'espace des solutions particulières n'est pas assez riche pour représenter la solution d'un cas générique ?

La solution que l'on choisit est de se baser sur le résidu à l'équilibre pour enrichir l'espace des solutions particulières (qu'on appelle aussi base réduite). Soit à résoudre le système :

$$Ax = b \tag{5.1}$$

Le résidu R_0 associé à la solution approchée x_0 s'écrit

$$R_0 = b - Ax_0 \tag{5.2}$$

On génère ainsi un sous espace de Krylov d'ordre p :

$$K_p = Vect\left\{R_0, AR_0, A^2R_0, ..., A^{p-1}R_0\right\}$$

On peut démontrer que la solution du système linéaire Eq.5.1 appartient à l'espace affine $\left\{x_0 + K_{pmax}\right\}$.

Ainsi on a définit une nouvelle base réduite qui s'ajoute orthogonalement à l'espace des solutions particulières pour l'enrichir et garantir la convergence du système.

5.1.2 La décomposition de domaine :

Une façon de tirer avantage des possibilités des machines multiprocesseurs est la décomposition du domaine Ω où est définie l'équation aux dérivées partielles en une union de sous domaines Ω_i , de telle sorte que $\Omega = \cup\, \Omega_i$. [51]

Plusieurs possibilités de décomposition sont envisageables ; nous allons considérer :

$$\Omega_i \cap \Omega_j = \emptyset, \quad si \quad i \neq j$$

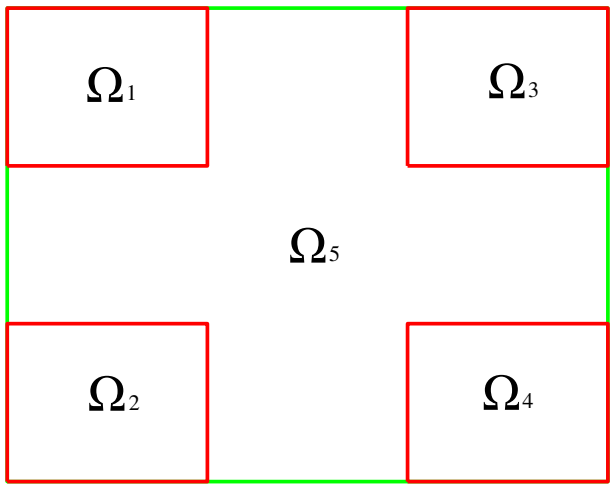


FIG. 5.1 – Décomposition du domaine Ω sans recouvrement.

Où $\emptyset$ est l'ensemble vide.

Dans ce cas, on parle de méthode de sous domaines sans recouvrement, la plus connue étant la méthode du " complément de Schur " qui est une méthode semi directe correspondant à une méthode d'élimination de Gauss par blocs.

Le domaine Ω étant partitionné, par exemple, en quatre sous domaines $\Omega_i,\ i = 1,...,4$ disjoints couplés à une interface Ω_5 comme illustré dans la figure Fig.5.1.

La matrice de discrétisation correspondante au problème Eq.5.1 ainsi que le vecteur des variables recherchées et le second membre ont alors l'allure ci-dessous :

$$A = \begin{bmatrix} A_{11} & 0 & 0 & 0 & A_{15} \\ 0 & A_{22} & 0 & 0 & A_{25} \\ 0 & 0 & A_{33} & 0 & A_{35} \\ 0 & 0 & 0 & A_{44} & A_{45} \\ A_{51} & A_{52} & A_{53} & A_{54} & A_{55} \end{bmatrix} \ ;\ x = \begin{Bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \end{Bmatrix} \ ;\ b = \begin{Bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \\ b_5 \end{Bmatrix}$$

Les matrices A_{ii} correspondent à la discrétisation sur les sous domaines $\Omega_i,\ i = 1,2,3,4$ et les matrices $A_{i5},\ A_{5i},\ i = 1,2,3,4$, correspondent au couplage entre ces derniers et l'interface Ω_5. On vérifie qu'après élimination de Gauss par blocs on obtient une matrice du

type :

$$A = \begin{bmatrix} A_{11} & 0 & 0 & 0 & A_{15} \\ 0 & A_{22} & 0 & 0 & A_{25} \\ 0 & 0 & A_{33} & 0 & A_{35} \\ 0 & 0 & 0 & A_{44} & A_{45} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & S \end{bmatrix} \quad avec\ :\ S = A_{55} - \sum_{i=1}^{4} A_{5i} A_{ii}^{-1} A_{i5}$$

Où S est la matrice de complément de Schur.

Donc, une fois la procédure d'élimination de Gauss par blocs effectuée, on résout en premier lieu le problème sur l'interface Ω_5,

$$S x_5 = b_5 - \sum_{i=1}^{4} A_{5i} A_{ii}^{-1} b_i$$

Puis on détermine en parallèle les valeurs sur les sous domaines $\Omega_i, i = 1,2,3,4$, dans la mesure où les systèmes correspondants sont indépendants.

$$A_{ii} x_i = b_i - A_{i5} x_5, \quad i = 1,2,3,4$$

On montre que si la matrice A est inversible et si les matrices $A_i,\ i = 1,2,3,4$ sont inversibles, alors la matrice du complément de Schur est aussi inversible ; De plus, si la matrice A est symétrique définie positive, la matrice de complément de Schur est également symétrique définie positive.

5.2 Présentation de la stratégie de résolution

Reformulation du problème : Avant de présenter notre stratégie de résolution, rappelons le modèle de comportement associé au domaine complémentaire macroscopique Ξ :

$$\sigma_{|M} = \widetilde{\sigma}_{|M} + \widetilde{C}_{|M} \left(\varepsilon_{|M} - \widetilde{\varepsilon}_{|M} \right) \qquad \forall M \in \Xi$$

que l'on peut aussi écrire en séparant les contributions locales et non locales :

$$\sigma_{|M} = \left(\widetilde{\sigma}_{|M} - \widetilde{C}_{|M} \widetilde{\varepsilon}_{|M} \right) + \widetilde{C}_{|M} \varepsilon_{|M} \qquad \forall M \in \Xi$$

Ainsi que la forme du problème mécanique en élasticité linéaire (HPP) à traiter :
Trouver un champ de déplacement régulier sur Ω *vérifiant les conditions aux limites essentielles :* $U = U_c$ *sur* $\partial_U\Omega$ *avec* $\partial\Omega = \partial_U\Omega \cup \partial_F\Omega$

ainsi que les équations d'équilibre

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^{i=m}\int_{\Omega_i} Tr\left[\varepsilon_{|P}(U^*)\,C(P)\,\varepsilon_{|P}(U)\right]dP + \int_{\Xi} Tr\left[\varepsilon_{|M}(U^*)\,\widetilde{C}_{|M}\varepsilon_{|M}(U)\right]dM \\ + \sum_{i=1}^{i=m}\tfrac{1}{|\Omega_i|}\int_{\Xi}\int_{\Omega_i}\widetilde{\phi}_i(M)\,Tr\left[\varepsilon_{|M}(U^*)\left(C(P)-\widetilde{C}_{|M}\right)\varepsilon_{|P}(U)\right]dP\,dM \\ = \int_{\Omega} U^* f dM + \int_{\partial_F\Omega} U^* F_c d\Gamma \\ \forall U^* \ \textit{tel que}\ U^* = 0 \ \textit{sur}\ \partial_U\Omega\end{aligned}$$

Si on examine cette formulation, on constate qu'il y a deux contributions à la matrice de rigidité du domaine complémentaire :

- une contribution locale (correspondante à $\widetilde{C}_{|M}\varepsilon_{|M}$) qui découle de :

$$Tr\left[\varepsilon_{|M}(U^*)\,\widetilde{C}_{|M}\varepsilon_{|M}(U)\right]$$

- une contribution non locale (correspondante à $\widetilde{\sigma}_{|M} - \widetilde{C}_{|M}\widetilde{\varepsilon}_{|M}$) qui découle de :

$$\sum_{i=1}^{i=m}\frac{1}{|\Omega_i|}\int_{\Omega_i}\widetilde{\phi}_i(M)\,Tr\left[\varepsilon_{|M}(U^*)\left(C(P)-\widetilde{C}_{|M}\right)\varepsilon_{|P}(U)\right]dP$$

A priori, le problème étant linéaire, on devrait pouvoir le résoudre directement sous cette forme. Cependant la contribution non locale induit un fort couplage entre les DDL du domaine complémentaire Ξ et tous les DDL des domaines microscopiques Ω_i qui donne une matrice de rigidité du problème pleine et surtout non symétrique.

Afin de retrouver un problème plus classique sur lequel on pourra appliquer efficacement les notions de réduction et de décomposition précitées, on adopte une approche itérative. Le calcul des contributions non locales dans ce cas suppose une connaissance "à priori" des champs solution sur les domaines microscopiques Ω_i et on peut reécrire les équations d'équilibre du problème mécanique en élasticité linéaire comme suit :

$$\sum_{i=1}^{i=m}\int_{\Omega_i} Tr\left[\varepsilon_{|P}(U^*)C(P)\varepsilon_{|P}\left(U^{(k+1)}\right)\right]dP+\int_{\Xi} Tr\left[\varepsilon_{|M}(U^*)\widetilde{C}_{|M}\varepsilon_{|M}\left(U^{(k+1)}\right)\right]dM$$
$$=\int_{\Omega} U^* f dM+\int_{\partial_F\Omega} U^* F_c d\Gamma$$
$$-\sum_{i=1}^{i=m}\frac{1}{|\Omega_i|}\int_{\Xi}\int_{\Omega_i}\widetilde{\phi}_i(M)\,Tr\left[\varepsilon_{|M}(U^*)\left(C(P)-\widetilde{C}_{|M}\right)\varepsilon_{|P}\left(U^{(k)}\right)\right]dP\,dM$$
$$\forall U^*\ \ tel\ que\ \ U^*=0\ \ sur\ \partial_U\Omega$$

Dans cette formulation on fait passer les contributions non locales au second membre de manière à les traiter comme un effort généralisé, ceci a pour effet de nous donner une matrice de rigidité du problème global constante malgré le fait que le comportement macroscopique ne soit pas directement défini.

On obtient finalement un problème itératif de la forme :

$$\mathbf{K}\,\mathbf{q}^{(\mathbf{k+1})}=\mathbf{f}_{ext}+\mathbf{f}\left(\mathbf{q}^{(\mathbf{k})}\right)_{\textbf{contributions non locales}} \tag{5.3}$$

Cette formulation a pour principal avantage que seul le second membre change au cours des itérations, de ce fait le calcul est largement accéléré. Le critère d'arrêt utilisé est $\varepsilon_{convergence}\longrightarrow 0$ avec :

$$\varepsilon_{convergence}=\frac{\left\|\mathbf{f}\left(\mathbf{q}^{(\mathbf{k+1})}\right)_{\textbf{contrib. non locales}}-\mathbf{f}\left(\mathbf{q}^{(\mathbf{k})}\right)_{\textbf{contrib. non locales}}\right\|}{\|\mathbf{f}_{ext}\|} \tag{5.4}$$

Introduction de la décomposition et des bases réduites : Considérons le cas d'une itération k : nous omettrons volontairement l'indice k pour ne pas surcharger la notation, et noterons le second membre : $F=\mathbf{f}_{ext}+\mathbf{f}\left(\mathbf{q}^{(\mathbf{k})}\right)_{\textbf{contrib. non locales}}$.

Afin de rendre la puissance de calcul offerte sur les plateformes à architecture parallèle exploitable dans notre modélisation, nous proposons un algorithme de décomposition de domaine dans l'esprit de la méthode du " complément de Schur " qui convient particulièrement bien à notre cas, car les sous domaines sont naturellement définis.

Pour cela, nous dissocions les degrés de liberté des noeuds internes aux domaines microscopiques (notés $\underline{q}_{\mu i}$ pour un domaine microscopique Ω_i) de ceux appartenant au domaine complémentaire (notés $\underline{q}_M$). Dans cette dernière catégorie, nous inclurons exclusivement les degrés de liberté des noeuds des frontières entre les domaines microscopiques et le domaine complémentaire, ceux-ci constitueront une zone de "recouvrement"

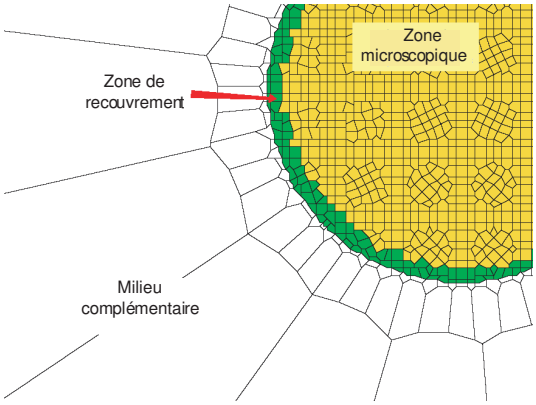


FIG. 5.2 – Cellules de Voronoi dans le voisinage d'un motif microscopique. sous-domaines et zone de recouvrement.

entre les deux sous domaines du fait que les fonctions de forme de ces noeuds ont un support en intersection avec celui des fonctions de forme des noeuds voisins appartenant au sous domaines microscopiques. Ceci est montré dans Fig. 5.2.

Le système linéaire discret représentant le problème s'écrit alors :

$$\begin{bmatrix} \underline{\underline{K}}_{MM} & \underline{\underline{K}}_{M\mu 1} & \cdots & \underline{\underline{K}}_{M\mu i} & \cdots \\ \underline{\underline{K}}^T_{M\mu 1} & \underline{\underline{K}}_{\mu 1\mu 1} & \cdots & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \underline{\underline{K}}^T_{M\mu i} & 0 & \cdots & \underline{\underline{K}}_{\mu i\mu i} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \underline{q}_M \\ \underline{q}_{\mu 1} \\ \vdots \\ \underline{q}_{\mu i} \\ \vdots \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \underline{F}_M \\ \underline{F}_{\mu 1} \\ \vdots \\ \underline{F}_{\mu i} \\ \vdots \end{Bmatrix} \tag{5.5}$$

Remarque : la notion de recouvrement qu'on évoque ici, n'est pas au même sens que celle couramment utilisée dans la décomposition de domaine, les sous domaines ainsi définis sont disjoints et forment une partition parfaite du domaine entier du problème.

A ce stade l'application de la méthode du " complément de Schur " nous donne :

$$\begin{bmatrix} \underline{\underline{S}} & 0 & \cdots & 0 & \cdots \\ \underline{\underline{K}}^T_{M\mu 1} & \underline{\underline{K}}_{\mu 1\mu 1} & \cdots & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \underline{\underline{K}}^T_{M\mu i} & 0 & \cdots & \underline{\underline{K}}_{\mu i\mu i} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \underline{q}_M \\ \underline{q}_{\mu 1} \\ \vdots \\ \underline{q}_{\mu i} \\ \vdots \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \underline{\widetilde{F}}_M \\ \underline{F}_{\mu 1} \\ \vdots \\ \underline{F}_{\mu i} \\ \vdots \end{Bmatrix} \tag{5.6}$$

Avec :

$$\underline{\underline{S}} = \underline{\underline{K}}_{MM} - \sum_{i=1}^{m} \underline{\underline{K}}^T_{M\mu i} \; \underline{\underline{K}}^{-1}_{\mu i\mu i} \; \underline{\underline{K}}_{M\mu i} \tag{5.7}$$

$$\underline{\widetilde{F}}_M = \underline{F}_M - \sum_{i=1}^{m} \underline{\underline{K}}^T_{M\mu i} \; \underline{\underline{K}}^{-1}_{\mu i\mu i} \; \underline{F}_{\mu i} \tag{5.8}$$

La résolution du problème donné dans Eq.5.5 est équivalente à la résolution de :

$$\underline{\underline{S}} \; \underline{q}_M = \underline{\widetilde{F}}_M$$

Et de la suite de problèmes indépendants :

$$\underline{\underline{K}}_{\mu i\mu i} \; \underline{q}_{\mu i} = \underline{F}_{\mu i} - \underline{\underline{K}}^T_{M\mu i} \; \underline{q}_M, \quad i = 1, ..., m$$

Cependant, malgré le gain obtenu, on reste toujours limité par le calcul de la matrice du complément de Schur qui nécessite l'inversion des *m* matrices de rigidité $\underline{\underline{K}}_{\mu i\mu i}$ relatives aux domaines microscopiques.

Afin de contourner cette problématique nous introduisons les bases réduites $\underline{\underline{\phi}}^{(n)}_{\mu i}$ constituées des solutions pré calculées du problème d'homogénéisation classique avec condition de déformation homogène au contour sur le domaine microscopique Ω_i présenté dans la figure (Fig. 3.7). L'indice *n* indique ici la version des bases réduites qui vont être enrichies au cours des itérations. Le vecteur des degrés de liberté du problème s'écrit alors :

$$\underline{q}^{(n)}_{\mu i} = \underline{\underline{\phi}}^{(n)}_{\mu i} \; \underline{a}^{(n)}_{\mu i} \tag{5.9}$$

avec $\underline{a}_{\mu i}^{(n)}$ les coefficients de l'approximation en base réduite à l'iteration n.

En introduisant cette forme réduite du vecteur des degrés de liberté dans le système linéaire du problème Eq. 5.5 on obtient :

$$\underline{\underline{K}} \begin{Bmatrix} \underline{q}_M^{(n)} \\ \underline{a}_{\mu 1}^{(n)} \\ \vdots \\ \underline{a}_{\mu i}^{(n)} \\ \vdots \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \underline{F}_M \\ \underline{\underline{\phi}}_{\mu\ 1}^{(n)T}\ \underline{F}_{\mu 1} \\ \vdots \\ \underline{\underline{\phi}}_{\mu\ i}^{(n)T}\ \underline{F}_{\mu i} \\ \vdots \end{Bmatrix} \tag{5.10}$$

avec :

$$\underline{\underline{K}} = \begin{bmatrix} \underline{\underline{K}}_{MM} & \underline{\underline{K}}_{M\mu 1}\underline{\underline{\phi}}_{\mu 1}^{(n)} & \cdots & \underline{\underline{K}}_{M\mu i}\underline{\underline{\phi}}_{\mu i}^{(n)} & \cdots \\ \underline{\underline{\phi}}_{\mu 1}^{(n)T}\underline{\underline{K}}_{M\mu 1}^{T} & \underline{\underline{\phi}}_{\mu 1}^{(n)T}\underline{\underline{K}}_{\mu 1\mu 1}\underline{\underline{\phi}}_{\mu 1}^{(n)} & \cdots & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \underline{\underline{\phi}}_{\mu i}^{(n)T}\underline{\underline{K}}_{M\mu i}^{T} & 0 & \cdots & \underline{\underline{\phi}}_{\mu i}^{(n)T}\underline{\underline{K}}_{\mu i\mu i}\underline{\underline{\phi}}_{\mu i}^{(n)} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \tag{5.11}$$

Avec ce changement de variable l'application de la méthode du " complément de

Schur " nous donne :

$$\widetilde{\underline{\underline{K}}} \left\{ \begin{array}{c} \underline{q}_M^{(n)} \\ \underline{a}_{\mu 1}^{(n)} \\ \vdots \\ \underline{a}_{\mu i}^{(n)} \\ \vdots \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{c} \widetilde{\underline{F}}_M \\ \underline{\underline{\phi}}_{\mu\ 1}^{(n)T}\ \underline{F}_{\mu 1} \\ \vdots \\ \underline{\underline{\phi}}_{\mu\ i}^{(n)T}\ \underline{F}_{\mu i} \\ \vdots \end{array} \right\} \tag{5.12}$$

avec :

$$\widetilde{\underline{\underline{K}}} = \begin{bmatrix} \underline{\underline{S}} & 0 & \cdots & 0 & \cdots \\ \underline{\underline{\phi}}_{\mu 1}^{(n)T}\underline{\underline{K}}_{M\mu 1}^{T} & \underline{\underline{\phi}}_{\mu 1}^{(n)T}\underline{\underline{K}}_{\mu 1\mu 1}\underline{\underline{\phi}}_{\mu 1}^{(n)} & \cdots & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \underline{\underline{\phi}}_{\mu i}^{(n)T}\underline{\underline{K}}_{M\mu i}^{T} & 0 & \cdots & \underline{\underline{\phi}}_{\mu i}^{(n)T}\underline{\underline{K}}_{\mu i\mu i}\underline{\underline{\phi}}_{\mu i}^{(n)} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \tag{5.13}$$

$$\underline{\underline{S}} = \underline{\underline{K}}_{MM} - \sum_{i=1}^{m} \left(\underline{\underline{\phi}}_{\mu i}^{(n)T}\ \underline{\underline{K}}_{M\mu i}^{T} \right) \left(\underline{\underline{\phi}}_{\mu i}^{(n)T}\ \underline{\underline{K}}_{\mu i\mu i}\underline{\underline{\phi}}_{\mu i}^{(n)} \right)^{-1} \left(\underline{\underline{\phi}}_{\mu i}^{(n)}\ \underline{\underline{K}}_{M\mu i} \right) \tag{5.14}$$

$$\widetilde{\underline{F}}_M = \underline{F}_M - \sum_{i=1}^{m} \left(\underline{\underline{\phi}}_{\mu i}^{(n)T}\ \underline{\underline{K}}_{M\mu i}^{T} \right) \left(\underline{\underline{\phi}}_{\mu i}^{(n)T}\ \underline{\underline{K}}_{\mu i\mu i}\underline{\underline{\phi}}_{\mu i}^{(n)} \right)^{-1} \left(\underline{\underline{\phi}}_{\mu\ i}^{(n)T}\ \underline{F}_{\mu i} \right) \tag{5.15}$$

La résolution de ce problème est équivalente à la résolution de :

$$\underline{\underline{S}}\ \underline{q}_M = \widetilde{\underline{F}}_M \tag{5.16}$$

Et de la suite de problèmes indépendants :

$$\left(\underline{\underline{\phi}}_{\mu i}^{(n)T}\ \underline{\underline{K}}_{\mu i\mu i}\ \underline{\underline{\phi}}_{\mu i}^{(n)}\right)\ \underline{a}_{\mu i}^{(n)} = \left(\underline{\underline{\phi}}_{\mu\ i}^{(n)T}\ \underline{F}_{\mu i}\right) - \left(\underline{\underline{\phi}}_{\mu i}^{(n)T}\ \underline{\underline{K}}_{M\mu i}^{T}\right)\quad \underline{q}_M,\quad i=1,...,m \tag{5.17}$$

La construction de la matrice du complément de Schur nécessite cette fois l'inversion des m matrices de rigidité réduites $\left(\underline{\underline{\phi}}_{\mu i}^{(n)T}\ \underline{\underline{K}}_{\mu i\mu i}\ \underline{\underline{\phi}}_{\mu i}^{(n)}\right)$ relatives aux domaines microscopiques. Typiquement nous nous limiterons à une dizaine de fonctions de forme pour la construction de $\underline{\underline{\phi}}_{\mu i}^{(n)}$, nous aurons donc à inverser m matrices de très petite taille.

La convergence de cette formulation nécessite de s'assurer d'avoir des bases réduites $\underline{\underline{\phi}}_{\mu i}^{(n)}$ assez riches et représentatives des domaines microscopiques Ω_i. Pour cela en plus des solutions du problème d'homogénéisation, on introduit un sous espace de Krylov dans ces bases en se basant sur la résolution des systèmes Eq.5.17 :

- Premièrement, on contrôle la qualité de la base réduite $\underline{\underline{\phi}}_{\mu i}^{(n)}$ par le calcul du résidu :

$$\underline{R}_{\mu i}^{(n)} = \underline{F}_{\mu i} - \underline{\underline{K}}_{\mu i\mu i}\ \underline{\underline{\phi}}_{\mu i}^{(n)}\ \underline{a}_{\mu i}^{(n)} - \underline{\underline{K}}_{M\mu i}^{T}\ \underline{q}_M \tag{5.18}$$

- Si nécessaire, la base réduite $\underline{\underline{\phi}}_{\mu i}^{(n)}$ est enrichie par la partie orthogonale du sous espace de Krylov engendré par $\underline{R}_{\mu i}^{(n)}$:

$$\left[\underline{R}_{\mu i}^{(n)}, \underline{\underline{K}}_{\mu i\mu i}\ \underline{R}_{\mu i}^{(n)}, \underline{\underline{K}}_{\mu i\mu i}^{2}\ \underline{R}_{\mu i}^{(n)}, ...\right]$$

  Ce qui définit une nouvelle base $\underline{\underline{\phi}}_{\mu i}^{(n+1)}$.
- On itère ce processus jusqu'à minimisation du résidu $\underline{R}_{\mu i}$

5.2.1 Analyses et discussion sur la stratégie de résolution

- On a mis au point une stratégie de résolution qui peut être qualifiée de " doublement itérative ". On itère globalement (indice k) pour résoudre le problème d'extension du comportement, et en même temps pour chaque itération globale, on itère localement (indice n) pour enrichir les bases de fonctions d'approximations. En réalité le processus itératif local porte sur de très petits problèmes en plus de son caractère parallèle, ce qui ne sanctionne nullement l'efficacité de l'approche proposée, de plus au bout des premières itérations globales les bases d'approximations sont assez riches. Le processus itératif local se résume alors à un contrôle du résidu.

- Tous processus itératif nécessite un point de départ, le bon choix de ce point nous permet de réduire de manière significative le nombre d'itérations pour arriver à la convergence. Dans notre cas on prend comme point de départ $\mathbf{q}^{(\mathbf{0})}$ solution du problème :

$$\mathbf{K}\,\mathbf{q}^{(\mathbf{0})} = \mathbf{f}_{ext} \tag{5.19}$$

  Ce choix constitue un bon point de départ, car même si le comportement à l'échelle macroscopique du milieu complémentaire est mal évalué, la solution $\mathbf{q}^{(\mathbf{0})}$ se rapproche de la forme de la solution finale
- L'efficacité de l'utilisation du sous espace de Krylov comme base de fonctions d'approximations est prouvée, mais qu'en est-il de celle des solutions du problème d'homogénéisation sur le domaine Ω_i ?

  Afin d'évaluer l'apport de ces fonctions, on considère le problème décrit dans la figure Fig. 5.3, les conditions aux limites sont les mêmes que celles décrites dans Eq. (4.1) :

$$\begin{cases} F_x(x=0) = \frac{2y}{L} - 1 \\ \\ F_y(x=0) = -\frac{y}{L}\left(1-\frac{y}{L}\right) \\ \\ F_y(x=L) = \frac{y}{L}\left(1-\frac{y}{L}\right) \end{cases}$$

  Le matériau utilisé est illustré dans la figure Fig. 5.4. le matériau représentant la "matrice" est caractérisée par un module d'Young E_1 et un coefficient de Poisson ν_1, celui représentant les "inclusions" par E_2,ν_2.

  La résolution est effectuée avec et sans l'utilisation de ces solutions particulières. Les résultats reportés dans la figure Fig. 5.5, représentant la convergence du calcul $\varepsilon_{convergence}$ Eq. (5.4), montrent clairement que le taux de convergence est largement amélioré et on peut estimer à un facteur deux l'accélération apportée par ces fonctions.

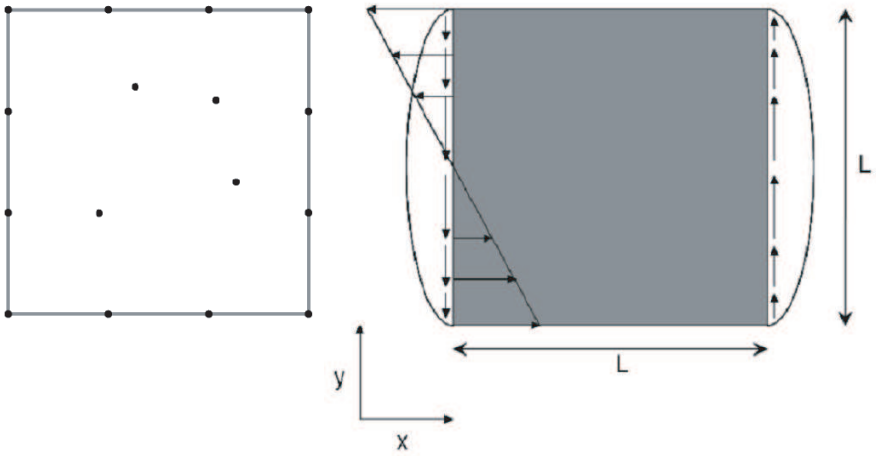


FIG. 5.3 – Problème test et discrétisation associée.

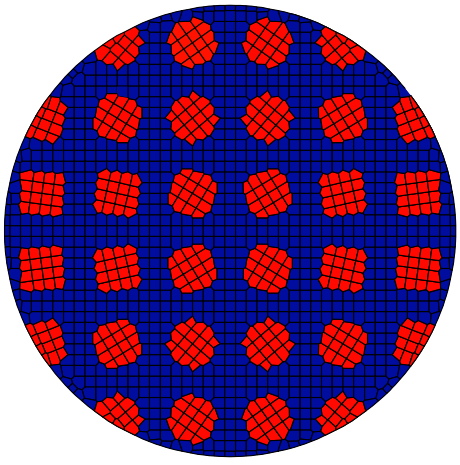


FIG. 5.4 – détaille du matériau utilisé.

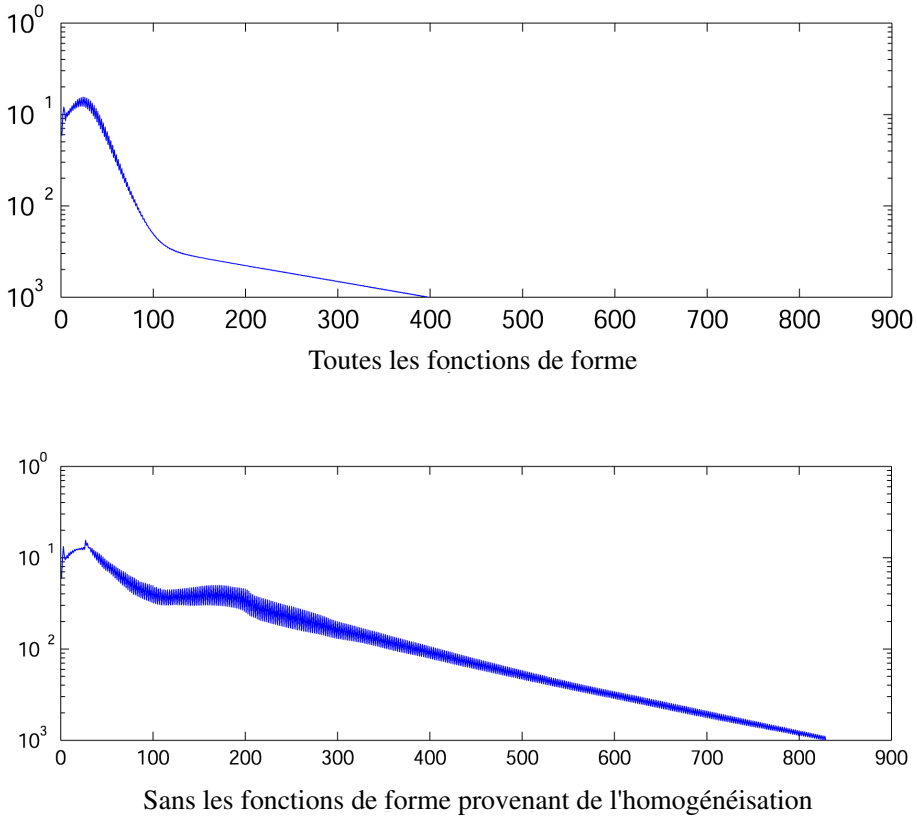


FIG. 5.5 – Analyse de l'influence des fonctions de formes solutions des problèmes d'homogénéisation.

Chapitre 6

Conclusions et perspectives

Dans ce travail, nous avons construit et présenté une approche pour aborder les problèmes multi-échelles en mécanique des structures. Cette approche se base sur certains éléments basiques comme l'homogénéisation classique et la décomposition de domaine, ainsi que sur d'autres éléments plus originaux comme l'extension du comportement, l'utilisation des méthodes sans maillage et l'introduction de bases réduites dans le processus de résolution.

Cette approche remplit une grande partie des objectifs de départ à savoir :

- Une modélisation multi-échelle permettant d'effectuer des simulations macroscopiques sans l'utilisation de relations de comportement macroscopiques, l'information nécessaire étant extraite à partir de modèles microscopiques sous-jacents.
- Une modélisation de l'interaction entre les conditions au bord à l'échelle microscopique et les transformations de la microstructure, tout en évitant une modélisation totalement microscopique du problème global.
- Une cinématique unique du problème, les problèmes microscopiques et macroscopiques sont intrinsèquement liés. Ceci afin d'éviter les questions de choix des conditions aux limites pour les problèmes d'homogénéisation.
- Une modélisation généraliste, qui ne suppose pas certaines conditions comme la périodicité sur la microstructure
- Une stratégie de résolution pouvant tirer profit de la puissance de calcul offerte sur les ordinateurs à architecture parallèle.

Nous avons ensuite analysé l'efficacité et les limites des composantes de notre approche, nous avons établi que :

- La méthode des éléments naturels contrainte est meilleure que la méthode des éléments finis dans le traitement des problèmes avec hétérogénéité de la distribution des noeuds du modèle numérique.
- Contrairement à ce que l'on pensait, la méthode des éléments naturels n'est pas insensible à l'hétérogénéité de la distribution et de la densité nodale. Pour pouvoir représenter la transition d'échelle (au moins 3 ordres de grandeurs entre la taille caractéristique macroscopique et la taille caractéristique microscopique) nous avons exploré plusieurs solutions et établi une stratégie qui minimise cette sensibilité.
- Le principe d'extension de comportement donne des résultats satisfaisants, à condition que l'on se conforme aux hypothèses fondatrices de régularité des champs solutions.
- Le respect du principe de régularité induit un cas dégénéré, c'est le cas des longueurs caractéristiques de variation du comportement comprises entre taille caractéristique macroscopique et taille caractéristique microscopique. Dans ce cas on obtient une modélisation proche de la discrétisation microscopique totale du problème.
- De part ces constatations, nous avons défini un domaine de validité de l'approche proposée. On se destine à traiter les cas de petites longueurs de variation. Les cas de longueur de variation moyennes des caractéristiques du matériau ne seront pas considérés. Dans le cas de grandes longueurs de variation, la discrétisation microscopique est superflue.
- Il est nécessaire d'avoir une discrétisation macroscopique satisfaisante pour obtenir une solution de bonne qualité sur les domaines microscopiques, ceci est dû au couplage intrinsèque entre ces deux échelles dans l'approche proposée. Cependant la sensibilité de l'approche vis a vis d'une erreur dans l'estimation des champs microscopiques n'est pas très grande car c'est le comportement moyen (obtenu avec la moyenne des champs solutions) qui sera étendu au domaine complémentaire.
- Notre stratégie de résolution devrait permettre de réduire les temps de calcul en le parallélisant de manière efficace, l'introduction de base réduite en augmente encore la performance.

- L'emploi des solutions du problème d'homogénéisation pré calculé augmente la performance des bases réduites.

Finalement nous avons fait la preuve de l'efficacité de notre approche sur des exemples plus ou moins complexes, avec une bonne estimation de la solution. La distribution de l'erreur étant homogène sur tout le domaine aux échelles microscopique et macroscopique même sur les bords, nous permet d'envisager l'utilisation de l'approche proposée pour la simulation de phénomènes localisés sur le bord et affectant la structure microscopique comme dans le cas de conditions de frottement.

Ce travail sous sa forme actuelle reste toujours ouvert et sujet à enrichissement, nous pouvons envisager de :

- enrichir et adapter le principe d'extension du comportement pour pouvoir traiter les cas de moyennes longueurs de variation.
- adapter l'approche pour traiter des cas de non linéarités ou de grandes transformations.
- étendre la stratégie au cas 3D au moins au niveau microscopique, et étudier le couplage 3D microscopique / 2D macroscopique.

Bibliographie

[1] Babuska I., Aziz A.K., On the angle condition in the finite element method *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 1976 ; **13** :214–226.

[2] Babuska I., Melenk J.M., The partition of unity finite element method : basic theory and applications. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 1996 ; **314** :139–314.

[3] Babuska I., Melenk J.M., The Partition of Unity Method. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 1997 ; **40** :727–758.

[4] Belytschko T., Lu Y.Y., Gu L., Element-free Galerkin methods. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 1994 ; **37** :229–256.

[5] Belytschko T., Krongauz Y., Organ D., Fleming M., Krysl P., Meshless methods : an overview and recent developments. *Computer methods in Applied Mechanics and Engineering*, 1996 ; **139** :3–47.

[6] Belytschko T., Moes N., Usui S., Parimi C., Arbitrary discontinuities in finite elements. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2001 ; **50** :993–1013.

[7] Ben Dhia H., Problèmes mécaniques multi-échelles : la méthode Arlequin. *Comptes Rendus à l'Académie des Sciences -Mécanique des Solides et des Structures*, 1998 ; **326** :899–904.

[8] Krysl P., Belytschko T., Element free Galerkin method : convergence of the continuous and discontinuous shape functions. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 1996 ; **148** :257–277.

[9] Ben Dhia H., Rateau G., Analyse mathématique de la méthode Arlequin mixte. *Comptes Rendus à l'Académie des Sciences - Analyse numérique*, 2001 ; **332** :649–654.

[10] Bornert M., Bretheau T., Gilorimini P. (*sous la direction de) Homogénéisation en mécanique des matériaux : 1. Matériaux aléatoires élastiques et milieux périodiques *Paris, Hermès Science Publications*, 2001

[11] Chen J.S., Wu C.T., Yoon Y., A stabilized conforming nodal integration for Galerkin mesh-free methods. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2001 ; **50** :435–466.

[12] Chen J.S., Yoon S., Wu C.T., Non-linear version of stabilized conforming nodal integration for Galerkin mesh-free methods. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2002 ; **53** :2587–2615

[13] Cluni F., Gusella V., Homogenization of non-periodic masonry structures. *International Journal of Solids and Structures*, 2004 ; **41** :1911–1923.

[14] Cueto E., Sukumar, N., Calvo B., Cegonino J., Doblaré M., Overview and recent advances in Natural Neighbour Galerkin Methods. *Archives of computational methods in engineering*, 2003 ; **10** :307–384.

[15] Dolbow J., Belytschko T., Numerical integration of the Galerkin weak forme in meshfree methods. *Computational Mechanics*, 1999 ; **23** :219–230.

[16] Dumontet H., Study of a boundary layer problem in elastic composite. *mathematical modelling and numerical analysis*, 1986 ; **20** :265–286.

[17] Farhat C., Roux F.X., A Method of finite element tearing and interconnecting and its parallel solution algorithm. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 1991 ; **32** :1205–1227.

[18] Feyel F., Multiscale FE2 elastoviscoplastic analysis of composite structures *Computational Materials Science*, 1999 ; **16** :344–354.

[19] Feyel F., A multilevel finite element method FE^2 to describe the response of highly non linear structures using generalized continua. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2003 ; **192** :3233–3244.

[20] Fish J., The s-version of the finite element method. *Computers & Structures*, 1992 ; **43** :539–547.

[21] Fish J., Belsky V., Multigrid method for periodic heterogeneous media. Part 1 : Convergence studies for one-dimensional case. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 1995 ; **126** :1–16.

[22] Fish J., Belsky V., Multigrid method for periodic heterogeneous media. Part 1 : Part 2 : Multiscale modeling and quality control in multidimensional case. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 1995 ; **126** :17–38.

[23] Forest S., Cailletaud G., Jeulinb D., Feyel F., Galliet I., Mounoury V., Quilici S. Introduction au calcul de microstructures - Elements of microstructural mechanics. *Mecanique & Industries*, 2002 ; **3** :439–456.

[24] Fries T.P., Matthies H.G. Classification and Overview of Meshfree Methods. *Technical report, Institute of Scientific Computing - Technical University Braunschweig - Germany* , 2003 ; **Informatikbericht Nr. 2003-03**

[25] Gonzalez D., Cueto E., Martinez M.A., Doblaré M., Numerical integration in Natural neighbor Galerkin methods. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2004 ; **60** :2077-2104

[26] Ghosh S., Lee K., Moorthy S., Multiple scale analysis of heterogeneous elastic structures using homogenization theory and voronoi cell finite element method. *International Journal of Solids and Structures*, 1995 ; **32** :27–62.

[27] Ghosh S., Moorthy S., Elastic-plastic analysis of arbitrary heterogeneous materials with the Voronoi Cell finite element method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 1995 ; **121** :373–409.

[28] Ghosh S., Nowak Z., Lee K., Tessellation-based computational methods for the characterization and analysis of heterogeneous microstructures *Composites Science and Technology*, 1997 ; **57** :1187–1210.

[29] Gosselet P., Méthodes de décomposition de domaine et méthodes d'accélération pour les problèmes multi champs en mécanique non linéaire. *Université Paris 6*, 2003 ;

[30] Kanit T. , Forest S., Galliet I., Mounoury V., Jeulin D., Determination of the size of the representative volume element for random composites : statistical and numerical approach. *International Journal of Solids and Structures*, 2003 ; **40** :3647–3679.

[31] Ladevèze P., Dureisseix D., Une nouvelle stratégie de calcul micro/macro en mécanique des structures. *Comptes Rendus à l'Académie des Sciences - Mécanique des Solides et des Structures*, 1999 ; **327** :1237–1244.

[32] Ladeveze P., Loiseau O., Dureisseix D., A micro-macro and parallel computational strategy for highly heterogeneous structures. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2001 ; **52** :121–138.

[33] Ladeveze P., Pelle J.P., La maitrise du calcul en mécanique linéaire et non linéaire. *Paris, Hermès Science Publications*, 2001

[34] Ladevèze P., Nouy A., On a multiscale computational strategy with time and space homogenization for structural mechanics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2003 ; **192** :3061–3087.

[35] Li S., Hao W., Liu W.K., Mesh-free simulations of shear banding in large deformation. *International Journal of solids and structures*, 2000 ; **37** :7183–7206.

[36] Liszka T., Orkisz J., The finite difference method at arbitrary irregular grids and its application in applied mechanics. *Computers and structures*, 1980 ; **11** :83–95.

[37] Liu W.K., Jun S., Zhang Y.F., Reproducing Kernel Particle Methods. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 1995 ; **20** :1081–1106.

[38] Lucy L.B., A numerical approach to the testing of fusion process. *The astronomic journal*, 1977 ; **88** :1013–1024.

[39] Maday Y., Rønquist E.M., A reduced-basis element method. *Comptes Rendus à l'Académie des Sciences -Analyse numérique*, 2002 ; **335** :195–200.

[40] Melenk J.M., BabuSka I., The partition of unity finite element method : Basic theory and applications. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 1996 ; **139** :289–314.

[41] Nayroles B., Touzot G., Villon P., Generalizing the finite element method : diffuse approximation and diffuse elements. *Computational mechanics*, 1992 ; **10** :307–318.

[42] Noor A.,K., Peters J.,M., Reduced basis technique for nonlinear analysis of structures. *AIAA Journal*, 1980 ; **18** :455–462.

[43] Nygards M., Number of grains necessary to homogenize elastic materials with cubic symmetry *Mechanics of Materials*, 2003 ; **35** :1049–1057.

[44] Rateau G., Méthode Arlequin pour les problèmes mécaniques multi-échelles : Applications à des problèmes de jonction et de fissuration de structures élancées. *École Centrale - Paris*, 2003 ;

[45] Raghavan P., Ghosh S., Concurrent multi-scale analysis of elastic composites by a multi-level computational model. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2004 ; **193** :497–538.

[46] Ryckelynck D., A priori hyperreduction method : an adaptive approach. *Journal of Computational Physics*, 2005 ; **202** :346–366.

[47] Sambridge M., Braun J., McQueen M., Geophysical parameterization and interpolation of irregular data using natural neighbors. *Geophysical Journal International*, 1995 ; **122** :837–857.

[48] Sanchez-Hubert J., Sanchez-Palencia E., introduction aux méthodes asymptotiques et a l'homogénéisation *Paris, Masson*, 1992

[49] Sibson R., A vector identity for the Dirichlet tesselations. *Mathematical Proceedings of Cambridge Philosophical Society*, 1980 ; **87** :151–155.

[50] Smit R.J.M., Brekelmans W.A.M., Meijer H.E.H., Prediction of the mechanical behavior of nonlinear heterogeneous systems by multi-level finite element modeling *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 1998 ; **155** :181–192.

[51] SPITERI P., Algorithmes numériques pour la résolution des grands systèmes. *Techniques de l'ingénieur* ; **AF 502**.

[52] Strouboulis T., Babuska I., Copps K. The Design and Analysis of the Generalized Finite Element Method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2000 ; **181** :43–69.

[53] Strouboulis T., Copps K., Babuska I., The generalized finite element method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2001 ; **190** :4081–4193.

[54] Sukumar N., Moran B., Belytschko T., The natural elements method in solid mechanics. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 1998 ; **43** :839–887.

[55] Sukumar N., Chopp D.L., Moes N., Belytschko T., Modeling Holes and Inclusions by Level Sets in the eXtended Finite Element Method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2000 ; **190** :6183–6200.

[56] Sukumar N., Moes N., Belytschko T., Moran B. Extended Finite Element Method for three-dimensional crack modelling. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2000 ; **48** :1549–1570.

[57] Suquet P., Plasticité et homogénéisation. *Université Paris 6*, 1982 ;

[58] Takano N., Okuno Y., Three-scale finite element analysis of heterogeneous media by asymptotic homogenization and mesh superposition methods. *International Journal of Solids and Structures*, 2004 ; **41** :4121–4135.

[59] Wei-nan E., Engquist B., Li X., Ren W., Vanden-Eijnden E., The Heterogeneous Multiscale Method : A Review. *Department of Mathematics, Princeton University*,

[60] Wei-nan E., Analysis of multiscale methods *Journal of Computational Mathematics*, 2004 ; **22** :210–219.

[61] Yoo J., Moran B., Chen J.S., Stabilized conforming nodal integration in the natural-element method. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2004 ; **60** :861–890.

[62] Yvonnet J., Ryckelynck D., Lorong P., Chinesta F., A new extension of the natural element method for non convex and discontinuous domains : the constrained natural element method (C-NEM). *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2004 ; **60** :1451–1474.

[63] Yvonnet J., Nouvelles approches sans maillage basées sur la méthode des éléments naturels pour la simulation numérique des procédés de mise en forme. *École Nationale Supérieure D'Arts et Métiers - Paris*, 2004 ;

[64] Veroy K., Reduced-Basis Methods Applied to Problems in Elasticity : Analysis and Applications. *Massachusetts Institute of Technology*, 2003 ;

[65] Yvonnet J., Chinesta F., Lorong P.,Rynckelynck D., The constrained natural element method (C-NEM) for treating thermal models involving moving interfaces. *International Journal of Thermal Sciences,* 2005 ; **44** :559–569.