



Contributions en homogénéisation numériques pour les composites non linéaires élastiques et élastoplastiques

Ba Anh Le

► To cite this version:

Ba Anh Le. Contributions en homogénéisation numériques pour les composites non linéaires élastiques et élastoplastiques. Autre. Université Paris-Est, 2014. Français. NNT : 2014PEST1027 . tel-01124221

HAL Id: tel-01124221

<https://theses.hal.science/tel-01124221>

Submitted on 6 Mar 2015

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.

UNIVERSITÉ PARIS-EST MARNE-LA-VALLÉE

THÈSE DE DOCTORAT

Discipline : Mécanique

Présentée par :

Ba Anh LE

Sujet :

Contributions en homogénéisation numérique
pour les composites non linéaires élastiques et
élastoplastiques

Soutenue le 24 janvier 2014,
devant le jury composé de messieurs :

H. ZAHROUNI	Professeur, Univ. Université de Lorraine - Metz	Rapporteur
D. NERON	Maître de Conférence HDR, ENS Cachan	Rapporteur
Z.-Q. FENG	Professeur des Universités, Université d'Evry-Val d'Essonne	Examineur
Q.-C. HE	Professeur, Univ. Paris-Est Marne-la-Vallée	Examineur
J. YVONNET	Professeur, Univ. Paris-Est Marne-la-Vallée	Directeur de thèse

Remerciements

Pour réaliser ce document et le travail qu'il présente, j'ai largement bénéficié de l'aide de nombreuses personnes. Je tiens à les remercier très sincèrement.

Je tiens à exprimer toute ma reconnaissance à mon Directeur de thèse Monsieur Julien YVONNET. Je la remercie de m'avoir encadré, aidé et conseillé.

Je tiens à remercier Monsieur Qui Chang HE de m'avoir encadré durant cette thèse et d'avoir toujours été disponible pour des discussions scientifiques très enrichissantes.

Je suis très reconnaissant envers Monsieur Zhi Qiang FENG d'avoir présidé mon jury de thèse. Je remercie très chaleureusement Messieurs Hamid ZAHROUNI et David NERON qui ont accepté la lourde tâche de rapporter cette thèse, et qui ont pris le temps d'examiner avec une grande attention mon travail en apportant des critiques profondes et constructives.

J'adresse mes sincères remerciements à tous les professeurs, intervenants et toutes les personnes qui par leurs paroles, leurs écrits, leurs conseils et leurs critiques ont guidé mes réflexions et ont accepté à me rencontrer et répondre à mes questions durant mes recherches.

Je remercie également très fortement pour leur soutien, les patience et leur amour tous mes proches : mon père, ma mère, ma petite soeur et tous mes amis.

Table des matières

Introduction générale	13
1 Etat de l'art : méthodes d'homogénéisation pour les problèmes non linéaires	17
1.1 Introduction	17
1.2 Méthodes d'approximation analytiques et semi-analytiques	18
1.2.1 Méthodes incrémentales	18
1.2.2 Méthode de second ordre	20
1.3 Méthodes d'homogénéisation numériques	21
1.3.1 Méthodes multi échelles couplant des calculs à deux échelles (méthodes de type "FE ² ")	22
1.3.2 Méthodes séquentielles	23
1.4 Conclusion	26
2 Homogénéisation des composites élastoplastiques : une méthode NTFA avec domaine élastique	29
2.1 Introduction	29
2.2 Le problème d'homogénéisation élastoplastique	29
2.2.1 Le problème de localisation	29
2.2.2 Relations macroscopiques	32
2.2.3 Sélection des modes plastiques par la POD	35
2.3 Un algorithme de type return-mapping pour le calcul des composites élastoplastiques	38
2.3.1 Algorithme général	38
2.3.2 Détails et expression des différents opérateurs	40
2.3.3 Calcul numérique des différents opérateurs	42
2.3.4 Evaluation numérique de $\bar{f}$ et de ses dérivées	45
2.4 Conclusion	48
3 Applications de la méthode NTFA en homogénéisation élastoplastique	49
3.1 Introduction	49
3.2 Composite stratifié élastoplastique	49
3.2.1 Solution analytique	49
3.2.2 Résultats numériques	53
3.3 Composites avec hétérogénéités périodiques	56
3.3.1 Composite avec inclusions rigides	56
3.3.2 Composite anisotrope	59
3.3.3 Milieu poreux à matrice élastoplastique	64

3.4	Conclusion	68
4	Homogénéisation des composites non linéaires élastiques en petites et grandes déformations dans des espaces paramétriques de grandes dimensions	71
4.1	Introduction	71
4.2	Homogénéisation des composites non linéaires élastiques	72
4.2.1	Homogénéisation des composites non linéaires élastiques en petites déformations	72
4.2.2	Homogénéisation des composites non linéaires élastiques en grandes déformations	73
4.3	Méthode de potentiels numériques	77
4.3.1	Idées de base	77
4.3.2	Construction de potentiels avec échantillonnage dans des grilles régulières	78
4.4	Homogénéisation non linéaire pour des espaces paramétriques de grandes dimensions	83
4.4.1	Approximation de fonctions multidimensionnelles par réseaux de neurones artificiels	83
4.4.2	Tests numériques : fonctions analytiques en grandes dimensions	86
4.4.3	Homogénéisation d'un composite non linéaire compressible en petites déformations paramétré par des coefficients microscopiques	103
4.4.4	Calcul de structure hétérogène non linéaire	105
4.4.5	Exemples en grandes déformations	111
4.5	Conclusion	112
	Conclusion générale	115
4.5.1	Conclusion	115
4.5.2	Perspectives	116
A	Résolution par éléments finis des problèmes locaux non linéaires	119
A.1	Elasticité en petites déformations non linéaire, loi puissance	119
A.1.1	Comportement compressible	119
A.1.2	Comportement incompressible	123
A.1.3	Discrétisation Eléments Finis	125
A.2	Problèmes élastoplastiques	125
B	Solution analytique : fibre cylindrique revêtue avec un matériau élastoplastique	129
B.1	Formulation du problème	129
B.2	Phase élastique	131
B.3	Premier régime plastique	132
B.4	Deuxième régime plastique	133
B.5	Troisième régime plastique	134
B.6	Calculs numériques	135
C	Interpolation de type spline cubique	137

Résumé	147
Résumé	149

Table des figures

1.1	Approche d'homogénéisation non linéaire incrémentale.	19
1.2	Représentation schématique de la méthode (FE ²).	22
2.1	Matériau périodique et Volume Elementaire Représentatif (VER).	30
2.2	Interprétation géométrique de la construction du domaine élastique macroscopique $\bar{\kappa}$: (a) VER ; (b) domaines élastiques associés à trois points du VER et domaine macroscopique élastique associé à ces trois domaine. Le domaine $\bar{\kappa}$ est constitué de l'intersection de tous les domaines $\kappa(\mathbf{x})$ de tous les points $\mathbf{x}$ dans le VER (le domaine réel $\bar{\kappa}$ est l'intersection de l'infinité de domaines associés aux points $\mathbf{x} \in \Omega$)	34
2.3	Illustration du schéma de prédiction-correction.	40
2.4	Illustration de la construction de la fonction $\bar{f}$	46
3.1	Composite stratifié composé de phases élastoplastiques : géométrie.	50
3.2	Réponse du composite stratifié élastoplastique : les trois états A, B et C correspondent respectivement à un état où les deux phases sont élastiques, un état où l'une des phases est plastifiée, et un état où les deux phases sont plastifiées.	53
3.3	Etat de déformation dans le composite stratifié pour l'état correspondant au point A (les deux phases sont élastiques).	54
3.4	Etat de déformation dans le composite stratifié pour l'état correspondant au point B (l'une des phases est plastifiée).	54
3.5	Etat de déformation dans le composite stratifié pour l'état correspondant au point C (les deux phases sont plastifiées).	55
3.6	Comparaison NTFA/solution de référence.	55
3.7	Volume élémentaire, microstructure périodique avec inclusions rigides.	57
3.8	Chargement de déformations macroscopiques imposées au cours du calcul.	57
3.9	Champs de déformations plastiques représentatifs extraits par POD pour le composite avec inclusions rigides.	58
3.10	Valeurs propres associées aux modes de déformations plastiques pour le composite 1.	59
3.11	Réponse (contrainte effective) du composite pour un chargement cyclique, comparaison entre un calcul direct (référence) et la réponse donnée par l'algorithme de return-mapping proposé, pour une évaluation directe de $\bar{f}$ (paragraphe 2.3.4.1). On constate une divergence de la solution avec le nombre de modes.	60

3.12	Réponse (contrainte effective) du composite pour un chargement cyclique, comparaison entre un calcul direct (référence) et la réponse donnée par l'algorithme de return-mapping proposé, pour une évaluation de $\bar{f}$ en variables séparées.	60
3.13	Evolution du domaine élastique macroscopique $\bar{\kappa}$ au cours du chargement pour le composite à inclusions rigides.	61
3.14	Volume élémentaire représentatif associé au composite anisotrope : (a) géométrie ; (b) maillage.	61
3.15	Champs de déformations plastiques représentatifs extraits par POD pour le composite anisotrope.	62
3.16	Convergence des valeurs propres pour les champs de déformation plastiques POD pour le composite anisotrope.	63
3.17	Réponse (contrainte effective) du composite anisotrope pour un chargement cyclique, comparaison entre un calcul direct (référence) et la réponse donnée par l'algorithme de return-mapping proposé, pour une évaluation de $\bar{f}$ en variables séparées.	63
3.18	Volume élémentaire représentatif associé au milieu poreux : (a) géométrie ; (b) maillage.	64
3.19	Champs de déformations plastiques représentatifs extraits par POD pour le matériau poreux.	65
3.20	Convergence des valeurs propres pour les champs de déformation plastiques POD pour le matériau poreux.	66
3.21	Réponse (contrainte effective) du composite pour un chargement cyclique, comparaison entre un calcul direct (référence) et la réponse donnée par l'algorithme de return-mapping proposé, pour une évaluation de $\bar{f}$ en variables séparées pour le milieu poreux.	66
3.22	Evolution du domaine élastique macroscopique $\bar{\kappa}$ pour le milieu poreux.	67
3.23	Déformations macroscopiques imposées, trajet de chargement cyclique complexe.	67
3.24	Réponse (contrainte effective) du composite pour un chargement cyclique complexe (figure 3.23), comparaison entre un calcul direct (référence) et la réponse donnée par l'algorithme de return-mapping proposé pour le milieu poreux.	68
4.1	Réseau de neurones à une couche cachée.	85
4.2	Fonction $f^{(A)} = \sum_{i=1}^d x_i^2$, $D = 6$. Le paramètre $N = 4$ est fixé, L varie, le nombre de points d'échantillonnage est de $M = 10^5$; (a) Approximation pour $x_1 = x_2 \dots = x_D$; (b) Convergence de l'erreur par rapport au nombre de points échantillonnés.	87
4.3	Fonction $f^{(A)} = \sum_{i=1}^d x_i^2$, $D = 8$. Le paramètre $N = 2$ est fixé, L varie, le nombre de points d'échantillonnage est de $M = 10^5$; (a) Approximation pour $x_1 = x_2 \dots = x_D$; (b) Convergence de l'erreur par rapport au nombre de points échantillonnés.	88
4.4	Fonction $f^{(A)} = \sum_{i=1}^d x_i^2$, $D = 10$. Le paramètre $N = 4$ est fixé, L varie, le nombre de points d'échantillonnage est de $M = 10^5$; (a) Approximation pour $x_1 = x_2 \dots = x_D$; (b) Convergence de l'erreur par rapport au nombre de points échantillonnés.	89

4.5	Fonction $f^{(A)} = \sum_{i=1}^d x_i^2$, $D = 6$. Le paramètre $L = 4$ est fixé, N varie, le nombre de points d'échantillonnage est de $M = 10^5$; (a) Approximation pour $x_1 = x_2 \dots = x_D$; (b) Convergence de l'erreur par rapport au nombre de points échantillonnés.	89
4.6	Fonction $f^{(A)} = \sum_{i=1}^d x_i^2$, $D = 8$. Le paramètre $L = 4$ est fixé, N varie, le nombre de points d'échantillonnage est de $M = 10^5$; (a) Approximation pour $x_1 = x_2 \dots = x_D$; (b) Convergence de l'erreur par rapport au nombre de points échantillonnés.	90
4.7	Fonction $f^{(A)} = \sum_{i=1}^d x_i^2$, $D = 10$. Le paramètre $L = 4$ est fixé, N varie, le nombre de points d'échantillonnage est de $M = 10^5$; (a) Approximation pour $x_1 = x_2 \dots = x_D$; (b) Convergence de l'erreur par rapport au nombre de points échantillonnés.	90
4.8	Fonction $f^{(B)} = e^{-\sum_{i=1}^D x_i}$, $D = 6$. Le paramètre $N = 4$ est fixé, L varie, le nombre de points d'échantillonnage est de $M = 10^5$; (a) Approximation pour $x_1 = x_2 \dots = x_D$; (b) Convergence de l'erreur par rapport au nombre de points échantillonnés.	91
4.9	Fonction $f^{(B)} = e^{-\sum_{i=1}^D x_i}$, $D = 8$. Le paramètre $N = 4$ est fixé, L varie, le nombre de points d'échantillonnage est de $M = 10^5$; (a) Approximation pour $x_1 = x_2 \dots = x_D$; (b) Convergence de l'erreur par rapport au nombre de points échantillonnés.	92
4.10	Fonction $f^{(B)} = e^{-\sum_{i=1}^D x_i}$, $D = 10$. Le paramètre $N = 4$ est fixé, L varie, le nombre de points d'échantillonnage est de $M = 10^5$; (a) Approximation pour $x_1 = x_2 \dots = x_D$; (b) Convergence de l'erreur par rapport au nombre de points échantillonnés.	93
4.11	Fonction $f^{(B)} = e^{-\sum_{i=1}^D x_i}$, $D = 6$. Le paramètre $L = 4$ est fixé, N varie, le nombre de points d'échantillonnage est de $M = 10^5$; (a) Approximation pour $x_1 = x_2 \dots = x_D$; (b) Convergence de l'erreur par rapport au nombre de points échantillonnés.	94
4.12	Fonction $f^{(B)} = e^{-\sum_{i=1}^D x_i}$, $D = 8$. Le paramètre $L = 4$ est fixé, N varie, le nombre de points d'échantillonnage est de $M = 10^5$; (a) Approximation pour $x_1 = x_2 \dots = x_D$; (b) Convergence de l'erreur par rapport au nombre de points échantillonnés.	95
4.13	Fonction $f^{(B)} = e^{-\sum_{i=1}^D x_i}$, $D = 10$. Le paramètre $L = 4$ est fixé, N varie, le nombre de points d'échantillonnage est de $M = 10^5$; (a) Approximation pour $x_1 = x_2 \dots = x_D$; (b) Convergence de l'erreur par rapport au nombre de points échantillonnés.	96
4.14	Fonction $f^{(C)} = \sqrt{\sum_{i=1}^d x_i^2}$, $D = 6$. Le paramètre $N = 2$ est fixé, L varie, le nombre de points d'échantillonnage est de $M = 10^5$; (a) Approximation pour $x_1 = x_2 \dots = x_D$; (b) Convergence de l'erreur par rapport au nombre de points échantillonnés.	97
4.15	Fonction $f^{(C)} = \sqrt{\sum_{i=1}^d x_i^2}$, $D = 8$. Le paramètre $N = 2$ est fixé, L varie, le nombre de points d'échantillonnage est de $M = 10^5$; (a) Approximation pour $x_1 = x_2 \dots = x_D$; (b) Convergence de l'erreur par rapport au nombre de points échantillonnés.	98

4.16	Fonction $f^{(C)} = \sqrt{\sum_{i=1}^d x_i^2}$, $D = 10$. Le paramètre $N = 2$ est fixé, L varie, le nombre de points d'échantillonnage est de $M = 10^5$; (a) Approximation pour $x_1 = x_2 \dots = x_D$; (b) Convergence de l'erreur par rapport au nombre de points échantillonnés.	99
4.17	Fonction $f^{(C)} = \sqrt{\sum_{i=1}^d x_i^2}$, $D = 6$. Le paramètre $L = 2$ est fixé, N varie, le nombre de points d'échantillonnage est de $M = 10^5$; (a) Approximation pour $x_1 = x_2 \dots = x_D$; (b) Convergence de l'erreur par rapport au nombre de points échantillonnés.	100
4.18	Fonction $f^{(C)} = \sqrt{\sum_{i=1}^d x_i^2}$, $D = 8$. Le paramètre $L = 2$ est fixé, N varie, le nombre de points d'échantillonnage est de $M = 10^5$; (a) Approximation pour $x_1 = x_2 \dots = x_D$; (b) Convergence de l'erreur par rapport au nombre de points échantillonnés.	101
4.19	Fonction $f^{(C)} = \sqrt{\sum_{i=1}^d x_i^2}$, $D = 10$. Le paramètre $L = 2$ est fixé, N varie, le nombre de points d'échantillonnage est de $M = 10^5$; (a) Approximation pour $x_1 = x_2 \dots = x_D$; (b) Convergence de l'erreur par rapport au nombre de points échantillonnés.	102
4.20	Microstructure and VER du matériaux composites périodique . .	103
4.21	Contraintes et composantes du tenseur élastique effectifs pour un étirement uniaxial ($\bar{\varepsilon}_{11}$ varie, $\sigma_0^2/\sigma_0^1 = 10$; $m = 0.3$, $f = 0.035$). . .	106
4.22	Contraintes et composantes du tenseur élastique effectifs pour un chargement complexe ($\bar{\varepsilon}_{11} = \bar{\varepsilon}_{12}$ varie, $\sigma_0^2/\sigma_0^1 = 10$; $m = 0.3$, $f = 0.035$).	107
4.23	Contraintes et composantes du tenseur élastique effectifs pour $\bar{\varepsilon}_{11} = \bar{\varepsilon}_{12} = 10^{-3}$, $\sigma_0^2/\sigma_0^1 = 10$, $f = 0.035$, pour une évolution de m	108
4.24	Contraintes et composantes du tenseur élastique effectifs pour $\bar{\varepsilon}_{11} = \bar{\varepsilon}_{12} = 10^{-3}$, $m = 0.55$, $f = 0.035$, et σ_0^2 varie.	109
4.25	Calcul de structure utilisant le modèle homogénéisé construit par potentiel numérique : géométrie, conditions aux limites et maillage.	110
4.26	Calcul de structure utilisant le modèle homogénéisé construit par potentiel numérique : déformée de la structure et champ de déformations.	111
4.27	Potentiel macroscopique et contraintes effectives pour le problème en grandes transformations, cas d'étirement uniaxial.	113
4.28	Potentiel macroscopique en grande déformation	114
A.1	Vue schématique de l'algorithme de prédiction-correction (return-mapping) avec projection normale sur le domaine élastique.	128
B.1	Fibre revêtue par une couche élastoplastique.	129
B.2	Critère de Tresca.	131
B.3	Réponse de la fibre revêtue. Les points A , B , C et D indiquent la fin du régime élastique, des premier, deuxième et troisième régime plastique.	135
B.4	Modes POD associés au modèle fibre.	136
C.1	Base de $\mathcal{S}_3(\Delta)$. Fonctions de base $u_1, u_2, \dots, u_{n+3}$ de l'espace des fonctions splines $\mathcal{S}_3(\Delta)$ sur l'intervalle $[a, b]$ pour des nœuds équidistants.	138

Introduction générale

Les méthodes d'homogénéisation ont pour objectif de déterminer le comportement macroscopique de matériaux dont la microstructure est hétérogène à une échelle inférieure, souvent associée à une échelle microscopique. A cette échelle, des informations sont supposées connues sur la morphologie et le comportement des différents constituants. L'homogénéisation est d'un intérêt fondamental en ingénierie et science des matériaux, car elle permet ainsi de prévoir le comportement de matériaux complexes associés aux composites, au béton ou aux matériaux cimentaires pour le génie civil, ou aux tissus biologiques. Par rapport à des caractérisations expérimentales entièrement macroscopiques, les approches micromécaniques, reliant les propriétés des constituants de ces matériaux et leur arrangement avec les propriétés macroscopiques permet d'améliorer la compréhension des mécanismes conférant les propriétés à ces matériaux, en vue d'en concevoir de nouveaux avec des performances améliorées.

Les méthodes d'homogénéisation analytiques ont permis d'établir des bornes et des estimations pour un très grands nombres de cas, en particulier pour les cas où le comportement est linéaire (voir par exemple [72, 97, 66, 79]). Dans le cas non linéaire, les difficultés inhérentes à la non validité du principe de superposition, à la dépendance à des variables internes et à la difficulté de résoudre analytiquement les problèmes locaux non linéaires limitent les approches proposées à des cas restreints sur le comportement et les morphologies de microstructures. En vue de pouvoir prédire le comportement de matériaux hétérogènes non linéaires plus complexes, et dont la microstructure est décrite plus finement, des approches numériques ont été développées récemment. Ces approches se classent en deux grandes catégories : a) les approches concourantes, ou couplant des calculs à deux échelles simultanément (voir par exemple [22]), qui permettent de prendre en compte des comportements arbitraires au niveau microscopiques, y compris des changements de microstructure, mais au prix de coûts de calculs prohibitifs ; b) les approches séquentielles, dans lesquelles des quantités sont évaluées par le biais de calculs préliminaires sur la microstructure, et permettant ensuite, sans retour à cette échelle de construire le comportement pour l'échelle macroscopique. Ces techniques permettent ainsi des gains de calculs importants lors du calcul de structure à l'échelle macroscopique, mais sont restreintes à des cas spécifiques. Cependant de nombreuses avancées ont été proposées récemment et permettent aujourd'hui de traiter une large gamme de comportements locaux, tels que la viscoplasticité, la viscoélasticité, et l'élasticité non linéaire. Dans ce mémoire de thèse, nous proposons une contribution à cette seconde famille de méthode d'homogénéisation numérique. Le plan du mémoire est le suivant.

Nous présentons dans un premier chapitre un état de l'art des méthodes d'homogénéisation pour les problèmes non linéaires. Les méthodes analytiques et semi-

analytiques sont rappelées. Ensuite, plusieurs méthodes sont présentées, telles que la méthode des Éléments Finis multi niveaux (méthode "FE²"), la méthode NTFA (Non Uniform Transformation Field Analysis) et une méthode récente baptisée méthode de potentiels numériques. Les différentes difficultés et verrous actuels de ces techniques sont mis en évidence.

Dans le second chapitre, nous proposons une méthode d'homogénéisation numérique originale étendant la méthode NTFA au cas des matériaux élastoplastiques. L'approche introduite est basée sur un algorithme de type prédiction-correction ("return-mapping") permettant l'actualisation des variables internes macroscopiques. Dans le cadre de la NTFA, le champ élastoplastique local est décomposé en une somme finie de modes plastiques, calculés sur un Volume Élémentaire Représentatif (VER) par des calculs Éléments Finis. En utilisant le principe du maximum de dissipation plastique, nous développons un algorithme associé permettant de construire la loi de comportement homogénéisé pour un état de déformation macroscopique donné et un ensemble de variables internes associées aux modes plastiques. Une technique de représentation de la fonction d'écoulement en variables séparées permet d'éviter d'avoir recours à des calculs de post-traitement sur le VER lors du calcul de structure.

Dans le troisième chapitre, nous appliquons la méthode développée dans le chapitre précédent à des exemples de composites élastoplastiques. Nous appliquons tout d'abord la méthode pour un composite stratifié unidirectionnel dont la solution analytique est disponible dans la littérature. Nous appliquons ensuite la méthode pour des composites périodiques en chargements cycliques, dont la solution de référence est donnée par un calcul élément finis pour des microstructures plus complexes et anisotropes.

Dans le quatrième chapitre, nous proposons une deuxième méthode, se basant sur la méthode des potentiels numériques, pour l'homogénéisation des composites non linéaires élastiques en petites et grandes déformations. La méthode initialement proposée dans [101, 103] était jusqu'à présent limitée pour des problèmes en deux dimensions en raison du très grand nombre de calculs préliminaires à effectuer pour construire le potentiel effectif du composite. Pour lever ce verrou, nous introduisons une approximation de type "réseaux de neurones" permettant à partir d'un échantillonnage de valeurs discrètes dans l'espace paramétrique de reconstruire le potentiel à partir d'un nombre plus faible de points que par les techniques d'interpolation classiques. Après avoir rappelé les principes de la méthode des potentiels numériques, nous testons la qualité de l'approximation par réseaux de neurones et l'appliquons sur plusieurs exemples numériques, incluant des calculs d'homogénéisation de VERs tridimensionnels, et dont le comportement et la microstructure peuvent être paramétrés, impliquant des espaces paramétriques de dimensions de l'ordre de 10.

Nous présentons enfin des conclusions et traçons quelques perspectives pour ce travail.

Notations

a	Scalaire
$\dot{a}$	Dérivée temporelle de a , $\dot{a} = da/dt$
$\mathbf{A}, \mathbf{a}$	Tenseurs du second ordre, matrices et vecteurs
$\mathbb{A}$	Tenseur du quatrième ordre
$\mathbf{A}^T$	Transposé de $\mathbf{A}$
$\langle . \rangle$	Moyenne spatiale sur un domaine Ω associé au VER
$\langle . \rangle_\omega$	Moyenne spatiale sur un domaine ω
$\nabla(.)$	Opérateur gradient
$\nabla \cdot (.)$	Opérateur divergence
$\otimes$	Produit tensoriel $(\mathbf{a} \otimes \mathbf{b})_{ij} = a_i b_j$
$\underline{\otimes}$	$(\mathbf{A} \underline{\otimes} \mathbf{B})_{ijkl} = \frac{1}{2} (A_{ik} B_{jl} + A_{il} B_{jk})$
$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$	Produits scalaire $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = a_i b_i$
$\mathbf{A} : \mathbf{B}$	Produit doublement contracté $\mathbf{A} : \mathbf{B} = A_{ij} B_{ij}$
$D_{\mathbf{v}}(.)$	Dérivée de Gâteaux dans la direction $\mathbf{v}$
$Tr(.)$	Opérateur trace d'un tenseur du second ordre : $Tr(\mathbf{A}) = A_{ii}$
$\chi^{(r)}(\mathbf{x})$	Fonction caractéristique associée à la phase r telle que $\chi^{(r)}(\mathbf{x}) = 1$ dans la phase r et zéro ailleurs
$\mathbf{1}$	Tenseur identité du second ordre
$\mathbb{I}$	Tenseur identité du quatrième ordre
$\boldsymbol{\sigma}$	Tenseur des contraintes de Cauchy microscopiques
$\bar{\boldsymbol{\sigma}}$	Tenseur des contraintes de Cauchy macroscopiques
$\boldsymbol{\varepsilon}$	Tenseur des déformations microscopiques
$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$	Tenseur des déformations macroscopiques
$\mathbb{C}$	Tenseur des propriétés élastiques locales
$\bar{\mathbb{C}}$	Tenseur des propriétés élastiques homogénéisées
$\boldsymbol{\varepsilon}^p$	Tenseur des déformations plastiques microscopiques
$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^p$	Tenseur des déformations plastiques macroscopiques

Chapitre 1

Etat de l'art : méthodes d'homogénéisation pour les problèmes non linéaires

Dans ce chapitre introductif, nous présentons plusieurs méthodes dont l'objectif est de déterminer la réponse effective de matériaux hétérogènes dont les phases sont décrites par un comportement non linéaire. Dans un premier temps, nous établissons un bref rappel des techniques analytiques et semi-analytiques. Nous présentons ensuite des méthodes d'homogénéisation numériques, qui permettent de dépasser les limitations des méthodes analytiques.

1.1 Introduction

Les tissus biologiques, les polymères renforcés ou les matériaux cimentaires sont des exemples de matériaux hétérogènes dont les phases sont décrites par un comportement non linéaire. L'homogénéisation de leur comportement est d'un intérêt considérable pour les applications en ingénierie et pour la conception de nouveaux matériaux, mais représente un défi sur le plan scientifique pour les raisons suivantes : (i) dans le cas non linéaire, il n'est pas possible, connaissant le comportement de chaque phase, de définir *a priori* la forme de la loi de comportement effective ; (ii) le principe de superposition ne s'appliquant plus, les théories et approches proposées dans le cas linéaire ne sont plus applicables ; (iii) dans le cas de comportements dissipatifs, la loi constitutive macroscopique dépend des champs anélastiques locaux dans la microstructure, et cette loi est associée théoriquement à l'histoire d'une infinité de variables internes. Le problème d'homogénéisation non linéaire a entraîné un nombre d'étude considérables aux cours des dernières décennies, avec des progrès récents importants rendus possibles notamment par les méthodes basées sur les simulations numériques.

1.2 Méthodes d'approximation analytiques et semi-analytiques

Les approches analytiques qui ont été proposées depuis les travaux pionniers de Hill [36] ont pour objectif d'estimer ou de borner le comportement des matériaux hétérogènes non linéaires. Dans le cas des matériaux non linéaires en petites déformations, des extensions au cas non linéaire de certaines techniques classiques dans le cadre linéaire ont été proposées (voir par exemple Nemat-Nasser & Hori [72] ; Torquato [97] ; Milton [67]), les travaux de Willis [100], Dvorak [20], Qiu and Weng [78], Ponte Castañeda [75], Hu [41], Milton et Serkov [67]. Dans le cas des grandes déformations, plusieurs auteurs ont également étendu certaines approches d'homogénéisation analytiques issues du cadre linéaire pour des cas spécifiques. Dans une série de travaux, (voir par exemple [18, 1, 32] entre autres), des estimations et des solutions exactes pour certaines classes de composites hyperélastiques ont été dérivées. Ponte-Castañeda [77] a proposé une méthode d'homogénéisation du second ordre pour déterminer la loi de comportement effective de matériaux composites non linéaires poreux et renforcés, suivi par plusieurs autres auteurs (voir par exemple [50, 48, 7]).

1.2.1 Méthodes incrémentales

Les méthodes d'homogénéisation incrémentales sont des extensions de la formulation proposée par Hill [36] dans lesquelles les contraintes et les déformations sont reliées par une loi sous la forme :

$$\dot{\bar{\sigma}}(t) = \bar{\mathbb{C}}(t) : \dot{\bar{\epsilon}}(t) \quad (1.1)$$

où $\dot{\bar{\sigma}}$ est le taux de contraintes macroscopiques, $\dot{\bar{\epsilon}}(t)$ le taux de déformations et $\bar{\mathbb{C}}(t)$ est un opérateur tangent dépendant de l'état de déformation et de l'histoire du chargement. Pour le problème linéarisé, il est possible d'appliquer le principe de superposition et de calculer le module tangent $\bar{\mathbb{C}}(t)$ à chaque itération, connaissant la loi de comportement non linéaire dans chaque phase et la déformation à l'itération précédente.

Pour un schéma d'homogénéisation donné (Mori-Tanaka, modèle auto-cohérent, etc.), connaissant l'incrément de déformation $\Delta\bar{\epsilon}$ appliqué sur le VER à un instant t^n , il est possible d'évaluer les modules tangents associés aux modèles non linéaires dans chaque phase (voir [42], [3], [85]) qui sont utilisés pour calculer le module effectif à l'instant t^{n+1} . Un schéma, proposé par Doghri et al. [42], consiste à chercher, pour un instant t^{n+1} , la déformation moyenne dans les inclusions. Un algorithme itératif est nécessaire pour calculer cette déformation moyenne. Soit $\langle\Delta\epsilon\rangle_{\Omega} = \Delta\bar{\epsilon}$ l'incrément de déformation, noté à l'instant t^n , $\langle\Delta\epsilon_n\rangle_{\Omega} = \Delta\bar{\epsilon}_n$. On définit la matrice comme étant associée à l'indice 0 et les inclusions à l'indice 1. On note $\langle\Delta\epsilon\rangle_{\Omega_0}$ et $\langle\Delta\epsilon\rangle_{\Omega_1}$ les déformations moyennes dans la matrice et dans les inclusions, respectivement. Pour une prédiction de $\langle\Delta\epsilon_n\rangle_{\Omega_1}$, on peut évaluer la moyenne dans la matrice $\langle\Delta\epsilon\rangle_{\Omega_0}$ grâce à la relation :

$$\Delta\bar{\epsilon} = \langle\Delta\epsilon\rangle_{\Omega_0} (1 - f_1) + f_1 \langle\Delta\epsilon\rangle_{\Omega_1}, \quad (1.2)$$

avec f_1 la fraction volumique d'inclusions. A partir des modules tangents calculés dans chacune des phases, le tenseur d'Eshelby $\mathcal{E}$ peut être évalué (voir par exemple

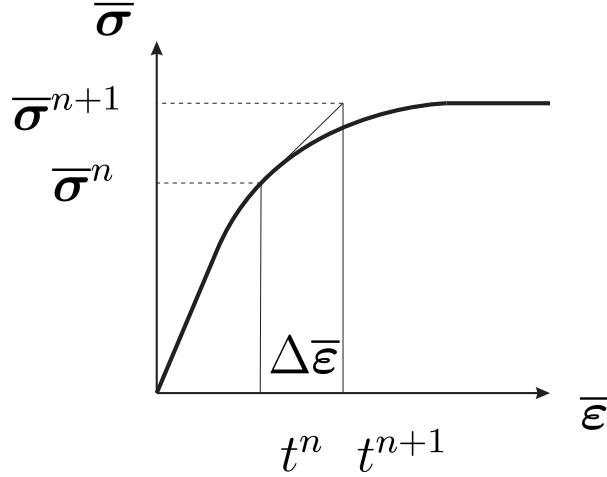


FIGURE 1.1 – Approche d’homogénéisation non linéaire incrémentale.

[19]). On peut alors calculer le tenseur de concentration $\mathbb{B}^\epsilon$ permettant de relier la déformation moyenne dans chacune des phases à la déformation macroscopique par :

$$\langle \Delta \epsilon \rangle_{\Omega_0} = [f_1 \mathbb{B}^\epsilon + (1 - f_1) \mathbb{I}]^{-1} : \bar{\epsilon}, \quad (1.3)$$

$$\langle \Delta \epsilon \rangle_{\Omega_1} = \mathbb{B}^\epsilon : [f_1 \mathbb{B}^\epsilon + (1 - f_1) \mathbb{I}]^{-1} : \bar{\epsilon}, \quad (1.4)$$

où $\mathbb{B}^\epsilon$ est exprimé par

$$\mathbb{B}^\epsilon = \{ \mathbb{I} + \mathcal{E} : [\mathbb{C}_0^{-1} : \mathbb{C}_1 - \mathbb{I}] \}^{-1}, \quad (1.5)$$

avec $\mathbb{C}_0$ et $\mathbb{C}_1$ les modules tangents associés au problème non linéaire dans chaque phase, et enfin le module effectif (tangent), donné par :

$$\bar{\mathbb{C}} = [f_1 \mathbb{C}_1 : \mathbb{B}^\epsilon + (1 - f_1) \mathbb{C}_0] : [f_1 \mathbb{B}^\epsilon + (1 - f_1) \mathbb{I}]^{-1}. \quad (1.6)$$

Pour un schéma de Mori-Tanaka, un algorithme, proposé par Doghri *et al.* [42], est décrit ci-dessous. Soit un intervalle de temps $[t_n, t_{n+1}]$. Connaissant $\bar{\epsilon}_n$ et $\Delta \bar{\epsilon}_n$ et les variables d’histoire dans les phases au temps t_n , le problème consiste à déterminer la contrainte $\bar{\sigma}_{n+1}$ et le module tangent $\bar{\mathbb{C}}_{n+\alpha}$, où $n + \alpha$ désigne le temps $t^{n+\alpha} = t^n + \alpha \Delta t$. Les étapes de l’algorithme sont les suivantes :

- Initialisation $\langle \bar{\epsilon} \rangle_{\Omega_1} = \Delta \bar{\epsilon}_n$.
- Tant que $\|\mathbf{R}\| > TOL$, où TOL est une tolérance numérique
 - 1. Connaissant $\langle \epsilon_n \rangle_{\Omega_1}$ et $\langle \Delta \epsilon \rangle_{\Omega_1}$, calculer à partir du modèle non linéaire de l’inclusion le module tangent $\mathbb{C}_1$.
 - 2. Calculer la déformation moyenne dans la matrice grâce à (1.2) :

$$\langle \Delta \epsilon \rangle_{\Omega_0} = \frac{\Delta \bar{\epsilon}_n - f_1 \langle \Delta \epsilon \rangle_{\Omega_1}}{1 - f_1}. \quad (1.7)$$

- 3. Connaissant $\langle \epsilon_n \rangle_{\Omega_0}$ et $\langle \Delta \epsilon \rangle_{\Omega_0}$, calculer à partir du modèle non linéaire de la matrice le module tangent $\mathbb{C}_0$.

4. Extraire la partie isotrope $\mathbb{C}_0^{iso}$ de $\mathbb{C}_0$ (voir justification et détails dans [42]).
5. Calculer le tenseur d'Eshelby pour le module $\mathbb{C}_0^{iso}$
6. Calculer les valeurs à $t_{n+\alpha}$ des modules $\mathbb{C}_0$ et $\mathbb{C}_1$:

$$\mathbb{C}_{i(n+\alpha)} = (1 - \alpha)\mathbb{C}_{i(n+1)} + \alpha\mathbb{C}_{i(n)} \quad i = 0, 1, \quad \alpha \in]0, 1]. \quad (1.8)$$

7. Calculer le tenseur de concentration $\mathbb{B}^\epsilon$ avec (1.5).
8. Vérifier la compatibilité de la déformation moyenne dans l'inclusion en calculant le résidu :

$$\mathbf{R} = \mathbb{B}^\epsilon : [f_1\mathbb{B}^\epsilon + (1 + f_1)\mathbb{I}]^{-1} : \Delta\bar{\epsilon} - \langle \Delta\epsilon \rangle_{\Omega_1}. \quad (1.9)$$

9. SI $\|\mathbf{R}\| \leq TOL$ ALORS FIN des itérations
10. SINON aller en (1) avec la nouvelle déformation moyenne dans l'inclusion

$$\langle \Delta\epsilon \rangle_{\Omega_1}^{k+1} = \langle \Delta\epsilon \rangle_{\Omega_1}^k + \xi \mathbf{R}, \quad \xi \in]0, 1] \quad (1.10)$$

- A convergence, calculer le module tangent $\bar{\mathbb{C}}_{n+\alpha}$ et la contrainte macroscopique par :

$$\bar{\mathbb{C}}_{n+\alpha} = [f_1\mathbb{C}_{1n+\alpha} : \mathbb{B}^\epsilon + (1 - f_1)\mathbb{C}_{0n+\alpha}] : [f_1\mathbb{B}^\epsilon + (1 - f_1)\mathbb{I}]^{-1}, \quad (1.11)$$

$$\Delta\bar{\sigma} = \bar{\mathbb{C}}_{n+\alpha} : \Delta\bar{\epsilon}, \quad (1.12)$$

$$\bar{\sigma}_{n+\alpha} = (1 - \alpha)\bar{\sigma}_n + \alpha\Delta\bar{\sigma}. \quad (1.13)$$

1.2.2 Méthode de second ordre

La méthode d'homogénéisation non linéaire du second-ordre, proposée par Ponte-Castañeda dans (voir par exemple [76]), est une approche dans laquelle la loi de comportement non-linéaire est de la forme

$$\bar{\epsilon} = \frac{\partial \bar{u}(\bar{\sigma})}{\partial \bar{\sigma}}, \quad (1.14)$$

où la fonction de densité d'énergie $\bar{u}$ du matériau est obtenue par le problème de minimisation :

$$\bar{u}(\bar{\sigma}) = \inf_{\sigma \in \mathcal{K}(\bar{\sigma})} \sum_{r=1}^N c^{(r)} \langle u^{(r)}(\sigma, \mathbf{x}) \rangle, \quad (1.15)$$

où $u^{(r)}$ est le potentiel convexe associé au comportement non-linéaire d'une phase (r) . Ce type de loi permet de décrire la plasticité dans le cadre de la théorie de la déformation (chargements monotones sans retour élastique), ou de la viscoplasticité. Dans ce cas, $\bar{\sigma}$ et $\bar{\epsilon}$ sont remplacés par leurs dérivées temporelles $\dot{\bar{\sigma}}$ et $\dot{\bar{\epsilon}}$, respectivement. La méthode du second ordre [76] consiste à approximer $\bar{u}(\bar{\sigma})$ sous la forme :

$$\bar{u}(\bar{\sigma}) = \underset{\mathbb{M}_0^{(s)}}{\operatorname{Argmin}} \left\{ \tilde{u}_T \left(\bar{\sigma}, \check{\sigma}^{(s)}, \mathbb{M}_0^{(s)} \right) - \sum_{r=1}^N c^{(r)} V^{(r)} \left(\check{\sigma}^{(r)}, \mathbb{M}_0^{(r)} \right) \right\}. \quad (1.16)$$

Dans (1.16), $\tilde{u}_T$ est le potentiel effectif d'un composite linéaire de comparaison avec la même microstructure que le composite non linéaire, et où $\mathbb{M}_0^{(r)}$ sont des tenseurs de souplesse d'ordre 4 constants dans chaque phase (inconnus), et où $V^{(r)}$ est une fonction d'erreur. Les tenseurs $\check{\sigma}^{(r)}$ sont des contraintes résiduelles uniformes par phase (à choisir). La fonction erreur est telle que :

$$V^{(r)} \left(\check{\sigma}^{(r)}, \mathbb{M}_0^{(r)} \right) = \underset{\hat{\sigma}^{(r)}}{\operatorname{Argmin}} \left\{ \tilde{u}_T \left(\hat{\sigma}, \check{\sigma}^{(s)}, \mathbb{M}_0^{(r)} \right) - u^{(r)} \left(\hat{\sigma}^{(r)} \right) \right\} \quad (1.17)$$

ou

$$\frac{\partial u^{(r)}}{\partial \sigma} \left(\hat{\sigma}^{(r)} \right) - \frac{\partial u^{(r)}}{\partial \sigma} \left(\check{\sigma}^{(r)} \right) = \mathbb{M}_0^{(r)} \left(\hat{\sigma}^{(r)} - \check{\sigma}^{(r)} \right). \quad (1.18)$$

L'Eq. (1.16) donne des relations supplémentaires reliant les variables $\hat{\sigma}^{(r)}$ aux variables $\check{\sigma}^{(r)}$ et $\mathbb{M}_0^{(r)}$ dans le composite linéaire de comparaison. La relation (1.16) peut être réécrite comme :

$$\tilde{u}(\bar{\sigma}) = \sum_{r=1}^N \left[u^{(r)} \left(\hat{\sigma}^{(r)} \right) - \frac{\partial u^{(r)}}{\partial \sigma} \left(\check{\sigma}^{(r)} \right) : \left(\hat{\sigma}^{(r)} - \bar{\sigma}^{(r)} \right) \right]. \quad (1.19)$$

Le choix de $\mathbb{M}_0^{(r)}$ est discuté, par exemple dans [43]. Les équations (1.18) et (1.16) permettent de déterminer les variables inconnues $\hat{\sigma}^{(r)}$ et $\mathbb{M}_0^{(r)}$ pour tout choix de tenseur de référence $\check{\sigma}^{(r)}$. Dans [76] il est suggéré de choisir $\check{\sigma}^{(r)} = \bar{\sigma}^{(r)}$, ou, pour éviter certaines difficultés évoquées dans le même article, $\check{\sigma}^{(r)} = \bar{\sigma}$. Cette méthode nécessite d'évaluer le tenseur de souplesse effectif du matériau linéaire de comparaison, avec une méthode d'homogénéisation linéaire analytique (Mori-Tanaka, modèle auto-cohérent, etc.).

1.3 Méthodes d'homogénéisation numériques

Dans le cas des matériaux non linéaires, les estimations de comportement et les bornes analytiques sont d'une grande importance théorique et pratique lorsque celles-ci sont applicables. Cependant, en raison des difficultés inhérentes à la résolution des problèmes locaux non linéaires, ces solutions sont en général obtenues pour des hypothèses assez restrictives sur la morphologie de la microstructure et sur les lois de comportement utilisées, et sont insuffisantes pour être utilisées dans des calculs de structures, pour des chargements complexes arbitraires. Les méthodes d'homogénéisation numériques, développées depuis quelques années, permettent de dépasser ces limitations. Nous présentons ci-dessous quelques méthodes représentatives de cette classe de techniques d'homogénéisation.

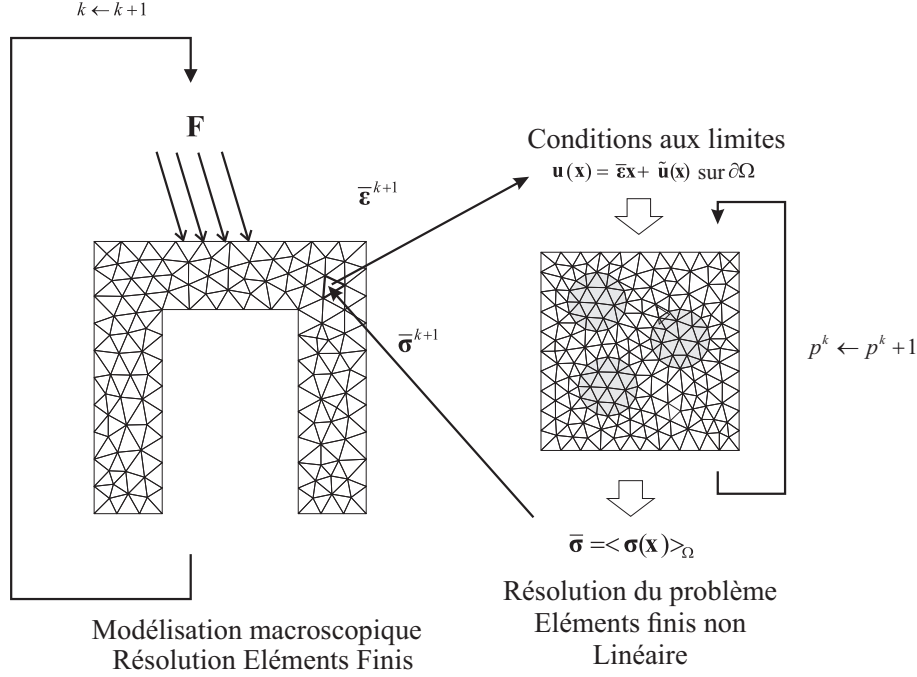


FIGURE 1.2 – Représentation schématique de la méthode (FE²).

1.3.1 Méthodes multi échelles couplant des calculs à deux échelles (méthodes de type "FE²")

La première classe de méthode est parfois désignée dans la littérature sous le nom de "Méthode d'Eléments Finis au carré" (FE² method) [22], ou "Eléments Finis multi-niveaux". L'idée de ce type de méthode est de coupler des problèmes mécaniques à deux échelles simultanément, les uns à l'échelle microscopique, l'autre à l'échelle macroscopique. Ce type de méthode suppose une séparation des échelles, ce qui signifie que les longueurs d'onde caractéristiques associées aux champs de déformations macroscopiques sont beaucoup plus grandes que la longueur caractéristique des hétérogénéités à l'échelle microscopique. Le calcul macroscopique (à l'échelle de la structure) fournit les champs de déformations aux différents points de Gauss du calcul Eléments finis, à une itération de Newton-Raphson, permettant de définir des conditions aux limites pour tous les VER (Volume Elémentaires Représentatifs) correspondants (voir figure 1.2). La résolution de tous les problèmes non linéaires en chaque point de Gauss fournit par moyenne des contraintes les contraintes macroscopiques et permet de définir implicitement une relation de comportement contraintes/déformations à l'échelle macroscopique, pour des comportements et des microstructures arbitraires. Il est également possible de prendre en compte des microstructures dont la morphologie évolue. La méthode, nommée FE² par F. Feyel dans [22], a été proposée de façon indépendante par un certain nombre d'autres auteurs (voir par exemple [81],[86],[96],[25]). Des extensions ont été proposées récemment pour les cas de l'homogénéisation du second ordre [46, 47] ou encore pour la réduction des calculs locaux en combinant cette méthode avec des techniques de réduction de modèle par POD [102, 68].

Cette procédure ne nécessite pas de spécifier la loi de comportement macroscopique qui est déduite des non-linéarités dans le comportement de la micro-structure associée. Les ingrédients de la méthode sont résumés ci-dessous :

1. Une modélisation du VER à l'échelle microscopique
2. Des conditions aux limites imposées sur le VER en fonction des déformations macro en chaque point d'intégration
3. Une résolution complète du problème non linéaire sur le VER en chaque point d'intégration, pour calculer par moyenne la contrainte macroscopique.
4. une résolution de type Newton-Raphson au niveau macro.

La résolution du problème macroscopique non linéaire nécessite d'évaluer l'opérateur tangent en chaque point d'intégration. Une façon d'évaluer ce tenseur est d'utiliser une méthode de perturbation (différences finies) à partir des calculs de contraintes moyennes sur le VER [22] :

$$\overline{C}_{ijkl} \simeq \frac{\overline{\sigma}_{ij}(\overline{\varepsilon} + \delta\overline{\varepsilon}^{(kl)}) - \overline{\sigma}_{ij}(\overline{\varepsilon})}{\Delta\varepsilon^{(kl)}} \quad (1.20)$$

où $\delta\overline{\varepsilon}^{(kl)}$ désigne une perturbation sur la composante (kl) et $\Delta\varepsilon^{(kl)}$ l'amplitude de la perturbation. Ce point est une difficulté de la méthode car cette évaluation induit une augmentation importante du nombre de calculs locaux non linéaires à effectuer.

Les méthodes de type FE² offrent l'avantage de fournir un cadre général pour tout type de comportement ou de morphologie, sans restriction. La méthode est très largement répandue, et a été récemment introduite dans des codes éléments finis généraux tels qu'Abaqus [92]. L'inconvénient majeur reste cependant la complexité des calculs numériques. En effets, le nombre de calculs non linéaires à effectuer dépend du nombre de points d'intégration de Gauss, et donc de la taille du maillage macroscopique. Pour cette raison, les calculs 3D sont prohibitifs à l'heure actuelle, et les problèmes mettant en jeu plus de deux échelles ne sont pas aujourd'hui envisageables. Pour ces raisons d'autres approches, dites séquentielles, ont été proposées. Bien que beaucoup plus spécifiques à certaines classes de comportements, celles-ci nécessitent des calculs préliminaires sur un VER, puis le comportement macroscopique est construit a posteriori à partir d'informations extraites de ces calculs. Des exemples de ce type de méthodes sont présentées par la suite.

1.3.2 Méthodes séquentielles

1.3.2.1 Méthode NTFA (Non Uniform Transformation Field Analysis)

Dans cette approche, les constituants sont supposés être des matériaux standards généralisés (voir [28] ou [24]). En tout point de chaque matériau, le comportement est décrit par l'état de déformation infinitésimal ε et un ensemble de variables internes α décrivant les phénomènes irréversibles tels que la plasticité ou l'endommagement. Les contraintes et forces thermodynamiques sont données par les relations

$$\sigma = \frac{\partial w}{\partial \varepsilon}(\varepsilon, \alpha), \quad \Xi = -\frac{\partial w}{\partial \alpha}(\varepsilon, \alpha). \quad (1.21)$$

L'évolution des variables internes est donnée par

$$\dot{\boldsymbol{\alpha}} = \frac{\psi}{\partial \Xi}(\Xi), \quad \text{ou} \quad \Xi = \frac{\partial \varphi}{\partial \boldsymbol{\alpha}}(\dot{\boldsymbol{\alpha}}), \quad (1.22)$$

où φ et ψ sont des potentiels duaux convexes. Nous décrivons dans un premier temps brièvement la méthode TFA (Transformation Field Analysis), proposée initialement par Dvorak [20]. On considère les équations suivantes associées au problème local défini sur le VER défini dans un domaine ouvert Ω contenant des interfaces désignées collectivement par Γ :

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = 0 \quad \text{dans } \Omega \setminus \Gamma, \quad (1.23)$$

$$\langle \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) \rangle = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} \quad (1.24)$$

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \mathbb{C}(\mathbf{x}) : (\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) - \boldsymbol{\varepsilon}^{an}(\mathbf{x})) \quad (1.25)$$

où (1.24) est associée à des conditions aux limites sur le bord du VER, pour une déformation macroscopique donnée $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$ (voir Eqs. (2.10)-(2.11) dans le chapitre 2) et où $\mathbb{C}(\mathbf{x})$ est le tenseur élastique, et $\boldsymbol{\varepsilon}^{an}(\mathbf{x})$ un champ de déformations anélastiques, dues aux phénomènes dissipatif (plasticité, endommagement, etc.). En introduisant (1.25) dans (1.23) et en considérant (1.24), la solution en déformation du problème linéaire (1.23), (1.24), (1.25) peut être exprimée, grâce au principe de superposition, comme :

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) = \mathbb{A}(\mathbf{x}) : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} + \int_{\Omega} \mathbb{D}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) : \boldsymbol{\varepsilon}^{an}(\mathbf{y}) d\mathbf{y}. \quad (1.26)$$

Dans (1.26), $\mathbb{D}$ est un opérateur de Green du quatrième ordre défini sur Ω et $d\mathbf{y}$ désigne une intégration par rapport à la variable $\mathbf{y}$. Sous cette forme, en utilisant (1.25) et en exprimant la moyenne des contraintes $\bar{\boldsymbol{\sigma}} = \langle \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) \rangle$, on aboutit à une expression dépendante du champ local anélastique complet $\boldsymbol{\varepsilon}^{an}(\mathbf{x})$ au niveau microscopique, correspondant à un nombre infini de variables internes pour la loi de comportement à l'échelle macroscopique. L'idée de la méthode TFA est de réduire ce nombre de variables internes en décomposant $\boldsymbol{\varepsilon}^{an}(\mathbf{x})$ sous la forme

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{an}(\mathbf{x}) = \sum_{r=1}^N \boldsymbol{\varepsilon}_r^{an} \chi^{(r)}(\mathbf{x}) \quad (1.27)$$

où $\chi^{(r)}(\mathbf{x})$ est une fonction caractéristique telle que $\chi^{(r)}(\mathbf{x}) = 1$ dans la phase r et 0 dans le reste du domaine, et $\boldsymbol{\varepsilon}_r^{an}$ un champ de déformations libres uniforme dans chaque phase.

En introduisant (1.27) dans le problème (1.23), (1.24), (1.25), $\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x})$ peut être décomposé comme :

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) = \mathbb{A}(\mathbf{x}) : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} + \sum_{r=1}^N \mathbb{D}_r(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\varepsilon}_r^{an} \quad (1.28)$$

où $\mathbb{D}_r(\mathbf{x})$ sont des tenseurs du quatrième obtenus en résolvant le problème (1.23), (1.24), (1.25) pour $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}} = 0$ et pour des composantes unitaires de $\boldsymbol{\varepsilon}_r^{an}$ (voir plus de

détails dans le chapitre 2.4). En utilisant (1.25) et en prenant la moyenne spatiale sur Ω , on obtient la loi de comportement macroscopique suivante :

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}} = \bar{\mathbb{C}} : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} + \sum_{r=1}^N \bar{\mathbb{D}}_r : \boldsymbol{\varepsilon}_r^{an} \quad (1.29)$$

avec

$$\bar{\mathbb{C}} = \langle \mathbb{C}(\mathbf{x}) : \mathbb{A}(\mathbf{x}) \rangle \quad (1.30)$$

et

$$\bar{\mathbb{D}}_r = \langle \mathbb{C}(\mathbf{x}) : \{ \mathbb{D}_r(\mathbf{x}) - \mathbb{I}\chi^{(r)}(\mathbf{x}) \} \rangle \quad (1.31)$$

avec $\mathbb{I}$ le tenseur identité du quatrième ordre. La loi de comportement dépend à présent d'un nombre fini N de variables internes, dont l'évolution est donnée par (voir [65]) :

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_r^{an} = \frac{\partial \psi}{\partial \Xi^{an}} (\Xi_r^{an}, \Xi^\beta), \quad \dot{\boldsymbol{\beta}}_r = \frac{\partial \psi^{(r)}}{\partial \Xi^\beta} (\Xi_r^{an}, \Xi^\beta), \quad (1.32)$$

où

$$\Xi_r^{an} = \bar{\boldsymbol{\sigma}}_r - \mathbf{X}_r, \quad \mathbf{X}_r = \frac{\partial (w^{an})^{(r)}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}^{an}} (\boldsymbol{\varepsilon}_r^{an}), \quad (1.33)$$

$$\Xi_r^\beta = -\frac{\partial (w^\beta)^{(r)}}{\partial \boldsymbol{\beta}} (\boldsymbol{\beta}_r), \quad \bar{\boldsymbol{\sigma}}_r = \langle \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) \rangle_{\Omega^{(r)}}. \quad (1.34)$$

Il a été montré que la méthode TFA donnait des résultats peu précis en pratique [89]. Une solution pour améliorer la qualité de l'approximation est de subdiviser les sous-domaines associés aux champs de déformations anélastiques uniformes, mais au prix d'un accroissement important du nombre de variables internes.

La méthode NTFA (Non Uniform Transformation Field Analysis) proposée par Michel et Suquet [65] remplace la décomposition (1.27) par une décomposition où les champs de déformations libres anélastiques sont non uniformes :

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{an}(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^M \boldsymbol{\varepsilon}_k^{an}(\mathbf{x}) \alpha_k. \quad (1.35)$$

Cette décomposition est complétée par plusieurs hypothèses sur les modes anélastiques, comme l'incompressibilité des modes plastiques ($tr(\boldsymbol{\varepsilon}_r^{an}(\mathbf{x})) = 0$), l'orthogonalité des modes ($\langle \boldsymbol{\varepsilon}_s^{an}(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\varepsilon}_r^{an}(\mathbf{x}) \rangle = 0$, $s \neq r$) et la normalité de ceux-ci ($\langle (\boldsymbol{\varepsilon}_r^{an})_{eq} \rangle = 1$), avec $(\cdot)_{eq}$ désignant la partie déviatorique d'un tenseur du second ordre. Plus de détails sont fournis dans le chapitre 2.4.

Un modèle a été proposé dans [65] pour décrire l'évolution des variables internes. Les modes anélastiques $\boldsymbol{\varepsilon}_k^{an}(\mathbf{x})$ peuvent être déterminées par simulations numériques en appliquant des chargements représentatifs sur le VER. Une méthode efficace pour la sélection des modes est la méthode POD (Proper Orthogonal Decomposition) [39], qui permet de sélectionner les modes orthogonaux les plus représentatifs à partir d'une collection de modes échantillonnés [82]. L'évolution des variables internes est un point clé et délicat. Dans le cas élastoplastique parfait avec retour élastique, la méthode NTFA n'a à notre connaissance pas été

développée, en particulier avec une méthodologie permettant de décrire l'évolution des variables internes macroscopiques pouvant décrire l'évolution d'un domaine élastique macroscopique. Ce point fera l'objet du chapitre 2.4 de cette thèse.

1.3.2.2 Méthodes d'interpolation de bases de données

D'autres approches ont été proposées, dans l'objectif de construire des méthodes multi échelles numériques séquentielles ne nécessitant pas de retour à l'échelle microscopique lors des calculs macroscopiques de structures hétérogènes. Plusieurs auteurs ont notamment introduit des méthodes séquentielles où des bases de données pré-calculées sur un VER sont utilisées pour déduire la loi de comportement à l'échelle macroscopique [95, 91, 93, 94, 101, 98, 15].

Dans [101, 103], une méthode a été proposée, baptisée méthode de potentiels numériques, dont l'idée est de représenter numériquement le potentiel effectif associé à la loi de comportement homogénéisée du matériau hétérogène non linéaire. Nous développons plus en détails cette méthode dans le chapitre 4.5 et en proposons des extensions pour les problèmes d'homogénéisation non linéaires élastiques dont les paramètres de la microstructure (fraction volumique, paramètres du comportement des phases) peuvent évoluer.

1.4 Conclusion

Nous avons présenté dans ce chapitre plusieurs méthodes, analytiques et numériques, pour réaliser l'homogénéisation des matériaux hétérogènes non linéaires. Bien que ces méthodes soient de plus en plus développées, un certain nombre de points restent bloquants pour des applications en calcul des structures :

1. Les méthodes analytiques et semi-analytiques restent limitées à des cas simples de comportement et de morphologies de microstructures.
2. Les méthodes numériques de type FE^2 sont extrêmement coûteuses en temps de calcul et ne permettent que de traiter des problèmes de petite taille et pour deux échelles au plus.
3. Les méthodes numériques séquentielles permettent de lever la difficulté des coûts numériques en séparant les calculs micro (préliminaires) des calculs macroscopiques de structures. Cependant celles-ci sont généralement spécialisées pour un type de comportement donné et entraînent un nombre de calculs numériques locaux très important lorsque les espaces des paramètres décrivant le comportement, défini par les déformation macroscopiques et à d'autres coefficients associés aux phases, est grand.
4. Dans le cadre de la méthode NTFA, il n'a pas été proposé, à notre connaissance, de méthode permettant l'actualisation des variables internes pour des composites élastoplastiques permettant de décrire un domaine élastique macroscopique avec de possibles cycles de charge et décharge.

Motivés par ces constats, nous proposons dans le cadre de cette thèse des extensions à deux méthodes séquentielles numériques. Premièrement, nous étendrons la méthode NTFA au cadre élastoplastique parfait. En effet dans la littérature la méthode n'a été développé jusqu'à présent que pour les cas viscoplastiques [82] ou viscoélastiques [23] et ne prend pas en compte un domaine élastique macroscopique. Deuxièmement, nous proposerons une extension à la méthode des

potentiels numériques [101, 103] permettant de traiter les problèmes 3D, aujourd'hui limités par le nombre de calculs préliminaires, associés à un domaine défini dans un espace de dimension 6 et pour des paramètres microstructuraux pouvant évoluer.

Chapitre 2

Homogénéisation des composites élastoplastiques : une méthode NTFA avec domaine élastique

2.1 Introduction

Les méthodes incrémentales, telles que celles présentées dans le chapitre 1.4, restent basées sur des schémas analytiques limités à des morphologies de microstructures simples, avec des hypothèses restrictives, entraînant une qualité parfois faible vis-à-vis de solutions de références calculées par éléments finis sur des VER. D'un autre côté, la méthode NTFA sous sa forme actuelle a été largement développée dans le cas viscoplastique [65] et plus récemment dans le cas viscoélastique [23]. Dans les différents cas, l'actualisation des variables internes associées aux champs anélastiques microscopiques est une étape délicate. Nous développons dans ce chapitre une nouvelle méthodologie pour l'actualisation des variables internes, permettant de traiter le cas de l'élastoplasticité parfaite avec retour élastique. Contrairement aux approches précédemment proposées, nous développons un algorithme de type prédiction-correction ("return-mapping") basé sur le principe de dissipation plastique maximum, dans le cadre de la NTFA. Nous présentons dans un premier temps les détails de la méthode NTFA. Nous introduisons ensuite l'algorithme d'actualisation des variables internes macroscopiques et le calcul pratique des différents opérateurs. De plus, nous proposons une représentation réduite de la fonction d'écoulement macroscopique, évitant le retour sur la microstructure pour évaluer celle-ci.

2.2 Le problème d'homogénéisation élastoplastique

2.2.1 Le problème de localisation

On considère un matériau hétérogène dont la microstructure est caractérisée par un volume élémentaire représentatif (VER), défini dans un domaine fermé $\bar{\Omega} \subset \mathbb{R}^d$, d étant la dimension de l'espace. Pour simplifier, on supposera par la suite que la microstructure est périodique (voir figure 2.1).

Les interfaces entre les phases sont supposées parfaites et désignées collectivement par Γ . Le domaine ouvert associé à $\bar{\Omega}$ est désigné par Ω et son bord par $\partial\Omega$.

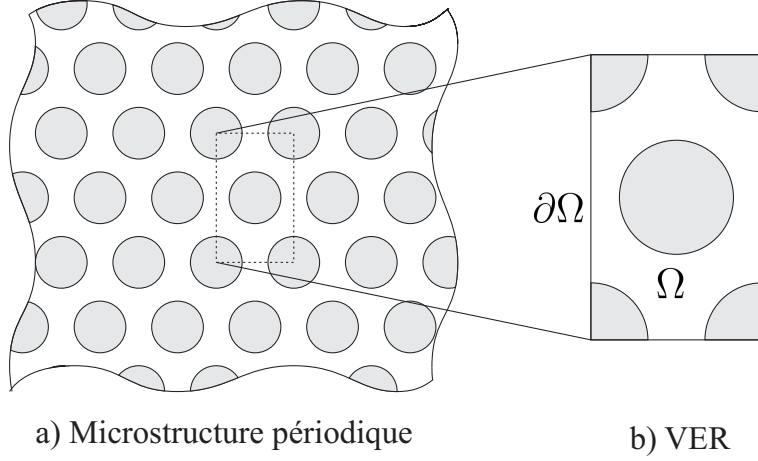


FIGURE 2.1 – Matériau périodique et Volume Elementaire Représentatif (VER).

On considère ici que le comportement des différentes phases est élastoplastique parfait. On définit les différentes quantités macroscopiques par :

$$\bar{\varepsilon} = \langle \varepsilon(\mathbf{x}) \rangle \quad (2.1)$$

$$\bar{\sigma} = \langle \sigma(\mathbf{x}) \rangle \quad (2.2)$$

avec $\langle . \rangle = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} (.) d\Omega$ l'opérateur de moyenne sur le volume du VER. Le problème d'homogénéisation consiste, connaissant $\bar{\varepsilon}$ et une déformation plastique $\varepsilon^p(\mathbf{x}) \forall \mathbf{x} \in \Omega$, à déterminer le champ de déformations locales $\varepsilon(\mathbf{x})$, pour pouvoir construire la loi de comportement macroscopique reliant $\bar{\sigma}$, $\bar{\varepsilon}$ et $\varepsilon^p(\mathbf{x})$. Les équations du problème local en déformations, appelé ici problème P^ε , sont données par :

$$\nabla \cdot \sigma(\mathbf{x}) = 0 \text{ sur } \Omega \setminus \Gamma, \quad (2.3)$$

$$\sigma(\mathbf{x}) = \mathbb{C}(\mathbf{x}) : (\varepsilon(\mathbf{x}) - \varepsilon^p(\mathbf{x})), \quad (2.4)$$

et

$$\langle \varepsilon(\mathbf{x}) \rangle = \bar{\varepsilon}, \quad (2.5)$$

$$[[\sigma(\mathbf{x})]] \mathbf{n}(\mathbf{x}) = 0, \quad [[\mathbf{u}(\mathbf{x})]] = 0 \text{ sur } \Gamma. \quad (2.6)$$

Considérant que $\varepsilon^p(\mathbf{x})$ est une déformation libre, le problème (P^ε) possède une solution unique si la solution est définie dans un espace fonctionnel approprié et si les hypothèses classiques sont faites sur la symétrie, la coercivité et le caractère borné de $\mathbb{C}$ [90].

Dans les équations ci-dessus, σ , $\mathbb{C}$, ε et ε^p représentent les contraintes de Cauchy, le tenseur élastique du quatrième ordre, les tenseurs du second ordre des déformations linéarisées et plastiques, respectivement.

Les déformations locales peuvent être décomposées comme :

$$\varepsilon(\mathbf{x}) = \bar{\varepsilon} + \tilde{\varepsilon}(\mathbf{x}) \quad (2.7)$$

où $\tilde{\varepsilon}$ est la partie fluctuante des déformations, dues aux hétérogénéités dans la microstructure. La condition (2.5) peut être traduite par des conditions aux limites sur le bord du VER $\partial\Omega$. Pour le montrer, en utilisant (2.7) et en prenant la moyenne sur Ω on obtient :

$$\langle \varepsilon(\mathbf{x}) \rangle = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \varepsilon(\mathbf{x}) d\Omega = \bar{\varepsilon} + \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \tilde{\varepsilon}(\mathbf{x}) d\Omega. \quad (2.8)$$

En utilisant le théorème de la divergence on a :

$$\langle \varepsilon(\mathbf{x}) \rangle = \bar{\varepsilon} + \frac{1}{2|\Omega|} \int_{\partial\Omega} \mathbf{n} \otimes \tilde{\mathbf{u}} + \tilde{\mathbf{u}} \otimes \mathbf{n} d\Gamma. \quad (2.9)$$

On vérifie donc l'égalité (2.5) si le terme $\int_{\partial\Omega} \mathbf{n} \otimes \tilde{\mathbf{u}} + \tilde{\mathbf{u}} \otimes \mathbf{n} d\Gamma$ est nul, satisfait pour les deux conditions suivantes :

$$\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}) = 0 \quad \text{sur } \partial\Omega, \quad (2.10)$$

ou

$$\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}) \text{ périodique sur } \Omega \setminus \Gamma. \quad (2.11)$$

Ces conditions correspondent, respectivement, aux conditions aux limites suivantes sur le bord du VER :

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \bar{\varepsilon} \mathbf{x} \quad \text{sur } \partial\Omega \quad (2.12)$$

ou

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \bar{\varepsilon} \mathbf{x} + \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}) \quad \text{sur } \partial\Omega, \quad \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}) \text{ périodique sur } \bar{\Omega}. \quad (2.13)$$

La densité d'énergie élastique est donnée par

$$w(\mathbf{x}, \varepsilon, \varepsilon^p) = \frac{1}{2} (\varepsilon - \varepsilon^p) : \mathbb{C}(\mathbf{x}) : (\varepsilon - \varepsilon^p). \quad (2.14)$$

En utilisant

$$\varepsilon = \varepsilon^e + \varepsilon^p \quad (2.15)$$

et (2.14) on peut écrire :

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{\partial w}{\partial \varepsilon}. \quad (2.16)$$

Soit $\kappa(\mathbf{x})$ l'ensemble de tous les tenseurs de contraintes tels qu'un point $\mathbf{x} \in \Omega \setminus \partial\Omega$ reste dans un état élastique. Le domaine élastique et la surface d'écoulement de ce point correspondent à l'intérieur et au bord de $\kappa(\mathbf{x})$, respectivement. Dans ce travail, on suppose $\kappa(\mathbf{x})$ convexe et caractérisé par une fonction d'écoulement $f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\sigma})$ telle que :

$$\kappa(\varepsilon^p) = \{f(\mathbf{x}, \varepsilon^p) \leq 0 \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega \setminus \Gamma\}. \quad (2.17)$$

Si l'on note par $\dot{\varepsilon}^p$ le taux de déformation et en adoptant une loi normale d'écoulement, on a :

$$\boldsymbol{\sigma} \in \kappa(\boldsymbol{\varepsilon}^p) \text{ et } [\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}'] : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p \geq 0 \quad \forall \boldsymbol{\sigma}' \in \kappa(\boldsymbol{\varepsilon}^p). \quad (2.18)$$

On définit alors la densité de dissipation plastique par

$$\Psi(x, \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p) = \sup_{\boldsymbol{\sigma} \in \kappa(x)} \{ \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p \}. \quad (2.19)$$

Dans le cas où $f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\sigma})$ est dérivable par rapport à $\boldsymbol{\sigma}$, (2.18) est équivalente à

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p = \lambda \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}, \quad \lambda \geq 0, \quad f \leq 0, \quad \lambda f = 0, \quad (2.20)$$

où λ est un multiplicateur de Lagrange défini sur $\Omega \setminus \Gamma$. Les phases sont supposées dans ce travail élastoplastiques parfaites (sans écrouissage) :

$$f^{(r)} = \sigma_{eq} - \sigma_y^{(r)} \leq 0 \quad (2.21)$$

où σ_{eq} est la contrainte équivalente de von Mises, $\sigma_{eq} = \sqrt{3/2 \boldsymbol{\sigma}_D : \boldsymbol{\sigma}_D}$, $\boldsymbol{\sigma}_D = \boldsymbol{\sigma} - 1/3 \text{Tr}(\boldsymbol{\sigma}) \mathbf{1}$. Chaque phase du domaine $\Omega^{(r)}$ est telle que $\Omega = \bigcup_r \Omega^{(r)}$ est associée à des propriétés élastiques et plastiques constantes par phase $\mathbb{C}^{(r)}$ et de limite élastique $\sigma_y^{(r)}$:

$$\mathbb{C}(\mathbf{x}) = \sum_r \chi^{(r)}(\mathbf{x}) \mathbb{C}^{(r)} \quad , \quad \sigma_y(\mathbf{x}) = \sum_r \chi^{(r)}(\mathbf{x}) \sigma_y^{(r)}, \quad (2.22)$$

où $\chi^{(r)}(\mathbf{x})$ est une fonction caractéristique associée à la phase $\Omega^{(r)}$, soit égale à 1 dans $\Omega^{(r)}$ et zéro ailleurs.

Le problème P^ε étant linéaire, la solution en déformation peut être exprimée comme

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) = \mathbb{A}(\mathbf{x}) : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} + \int_{\Omega} \mathbb{D}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) : \boldsymbol{\varepsilon}^p(\mathbf{y}) d\mathbf{y} = \mathbb{A}(\mathbf{x}) : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} + \boldsymbol{\varepsilon}^0(\mathbf{x}). \quad (2.23)$$

où $\mathbb{D}$ est la fonction de Green obtenue en résolvant le problème P^ε avec $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}} = 0$. Dans (2.23), $\boldsymbol{\varepsilon}^0(\mathbf{x})$ est le champ de déformation total induit par la déformation $\boldsymbol{\varepsilon}^p(\mathbf{x})$ et $\mathbb{A}(\mathbf{x})$ est le tenseur de localisation classique en homogénéisation (voir détails pour le calcul pratique dans la partie 2.3.3).

2.2.2 Relations macroscopiques

2.2.2.1 Formulation continue

En considérant (2.4) et (2.23), on a :

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \mathbb{C}(\mathbf{x}) : \mathbb{A}(\mathbf{x}) : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} + \mathbb{C}(\mathbf{x}) \left[\int_{\Omega} \mathbb{D}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) : \boldsymbol{\varepsilon}^p(\mathbf{y}) d\mathbf{y} - \boldsymbol{\varepsilon}^p(\mathbf{x}) \right] \quad (2.24)$$

ou

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \mathbb{C}(\mathbf{x}) : \mathbb{A}(\mathbf{x}) : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} + \boldsymbol{\sigma}^p(\boldsymbol{\varepsilon}^p(\mathbf{x})) \quad (2.25)$$

avec

$$\boldsymbol{\sigma}^p(\mathbf{x}) = \mathbb{C}(\mathbf{x}) \left[\int_{\Omega} \mathbb{D}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) : \boldsymbol{\varepsilon}^p(\mathbf{y}) d\mathbf{y} - \boldsymbol{\varepsilon}^p(\mathbf{x}) \right] \quad (2.26)$$

En prenant la moyenne de (2.25), on obtient la loi de comportement macroscopique suivante :

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{x}) = \langle \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) \rangle = \bar{\mathbb{C}} : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} + \bar{\boldsymbol{\sigma}}^p(\boldsymbol{\varepsilon}^p(\mathbf{x})) \quad (2.27)$$

avec

$$\bar{\mathbb{C}} = \langle \mathbb{C}(\mathbf{x}) : \mathbb{A}(\mathbf{x}) \rangle \quad (2.28)$$

et

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}}^p = \langle \boldsymbol{\sigma}^p(\mathbf{x}) \rangle. \quad (2.29)$$

On peut réécrire (2.27) comme :

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{x}) = \bar{\mathbb{C}} : (\bar{\boldsymbol{\varepsilon}} - \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^p) \quad (2.30)$$

où $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^p$ est identifiée comme :

$$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^p = -\bar{\mathbb{C}}^{-1} : \bar{\boldsymbol{\sigma}}^p. \quad (2.31)$$

Les énergies élastiques w et la dissipation plastique Ψ étant des quantités additives, on peut définir les quantités macroscopiques associées comme leur moyenne volumique sur le VER :

$$\bar{w} = \langle w(\mathbf{x}) \rangle = \frac{1}{2} \langle (\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) - \boldsymbol{\varepsilon}^p(\mathbf{x})) : \mathbb{C}(\mathbf{x}) : (\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) - \boldsymbol{\varepsilon}^p(\mathbf{x})) \rangle \quad (2.32)$$

et

$$\bar{\Psi} = \langle \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p(\mathbf{x}) \rangle. \quad (2.33)$$

2.2.2.2 Définition du domaine élastique associé au matériau homogénéisé

Un domaine élastique $\bar{\kappa}$ et une surface d'écoulement $\bar{f}$ macroscopiques peuvent être définis [31] pour le matériau homogène équivalent, associés à tous les états de contrainte macro telles que la déformation plastique $\boldsymbol{\varepsilon}^p(\mathbf{x})$ reste inchangée. Suivant cette définition et en considérant (2.32), $\bar{\kappa}$ est déterminé comme :

$$\bar{\kappa}(\boldsymbol{\varepsilon}^p) = \{f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\varepsilon}^p) \leq 0 \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega \setminus \Gamma\}. \quad (2.34)$$

ou de façon équivalente,

$$\bar{\kappa}(\boldsymbol{\varepsilon}^p) = \bigcap_{\mathbf{x} \in \bar{\Omega} \setminus \Gamma} \{\bar{\boldsymbol{\sigma}} | f(\mathbf{x}) \leq 0\}. \quad (2.35)$$

Géométriquement, $\bar{\kappa}$ peut être interprété comme l'intersection de tous les ensembles $\kappa(\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\varepsilon}^p))$. Il a été montré dans [31] que $\bar{\kappa}$ est issu de trois transformations géométriques : (a) une translation du domaine micro $\kappa(\mathbf{x})$; (b) une transformation linéaire non-uniforme de $\kappa(\mathbf{x})$; (c) $\bar{\kappa}$ est l'intersection de tous les ensembles $\kappa(\mathbf{x})$.

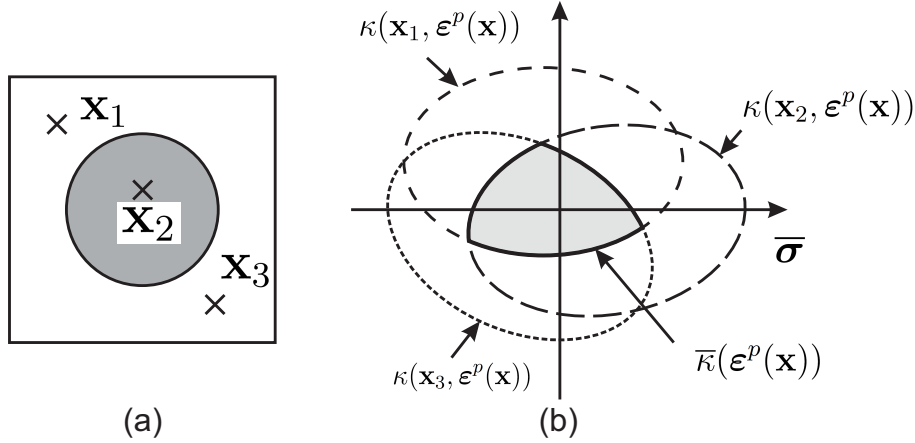


FIGURE 2.2 – Interprétation géométrique de la construction du domaine élastique macroscopique $\bar{\kappa}$: (a) VER ; (b) domaines élastiques associés à trois points du VER et domaine macroscopique élastique associé à ces trois domaines. Le domaine $\bar{\kappa}$ est constitué de l'intersection de tous les domaines $\kappa(\mathbf{x})$ de tous les points $\mathbf{x}$ dans le VER (le domaine réel $\bar{\kappa}$ est l'intersection de l'infinité de domaines associés aux points $\mathbf{x} \in \Omega$)

Comme la convexité d'un ensemble est conservée par une transformation affine et que l'intersection de deux ensembles convexes donne un ensemble convexe [31], nous pouvons en déduire que si $\kappa(\mathbf{x}) \forall \mathbf{x} \in \Omega \setminus \Gamma$ est convexe alors $\bar{\kappa}$ est aussi convexe. Une illustration de l'interprétation géométrique de $\bar{\kappa}$ est fournie dans la figure 2.2.

Mandel [55, 56] et Hill [35, 37] ont montré de manière indépendante que la loi normale d'écoulement microscopique implique que le milieu homogénéisé est associé à une loi d'écoulement macroscopique normale également. Plus précisément, (2.18) implique que

$$\bar{\sigma} \in \bar{\kappa}(\epsilon^p) \text{ and } [\bar{\sigma} - \bar{\sigma}'] : \dot{\epsilon}^p \geq 0 \quad \forall \bar{\sigma}' \in \bar{\kappa}(\epsilon^p). \quad (2.36)$$

2.2.2.3 Formulation discrète par NTFA

On suppose à ce stade (cadre de la méthode NTFA [65]), que le champ de déformations plastiques peut être décomposé en une combinaison linéaire de modes non uniformes tels que

$$\epsilon^p(\mathbf{x}, t) \simeq \sum_{k=1}^M \epsilon_k^p(\mathbf{x}) \alpha_k(t) \quad (2.37)$$

où α_k sont des coefficients scalaires. Nous en déduisons l'expression de la déformation (en omettant d'indiquer la dépendance au temps par la suite) :

$$\epsilon(\mathbf{x}) = \mathbb{A}(\mathbf{x}) : \bar{\epsilon} + \sum_{k=1}^M \mathbf{D}_k(\mathbf{x}) \alpha_k \quad (2.38)$$

où $\mathbf{D}_k(\mathbf{x})$ est le tenseur du second ordre de déformations obtenu en résolvant le problème (P^ε) avec $\alpha_k = 1$, $\alpha_j = 0$, $j \neq k$, $j = 1, \dots, M$ et $\bar{\varepsilon} = 0$. En utilisant (2.4), on obtient l'expression des contraintes locales :

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) &= \mathbb{C}(\mathbf{x}) : (\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) - \boldsymbol{\varepsilon}^p(\mathbf{x})), \\ &= \mathbb{C}(\mathbf{x}) : \left[\mathbb{A}(\mathbf{x}) : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} + \sum_{k=1}^M \mathbf{D}_k(\mathbf{x}) \alpha_k - \sum_{k=1}^M \boldsymbol{\varepsilon}_k^p(\mathbf{x}) \right]. \end{aligned} \quad (2.39)$$

La loi de comportement macroscopique est alors obtenue en prenant la moyenne des contraintes sur Ω :

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}} = \bar{\mathbb{C}} : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} + \sum_{k=1}^M \bar{\boldsymbol{\sigma}}_k^p \alpha_k \quad (2.40)$$

avec $\bar{\mathbb{C}}$ le module effectif décrit en (2.28) et

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}}_k^p = \langle \mathbb{C}(\mathbf{x}) : [\mathbf{D}_k(\mathbf{x}) - \boldsymbol{\varepsilon}_k^p(\mathbf{x})] \rangle. \quad (2.41)$$

ou encore comme

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}} = \bar{\mathbb{C}} : (\bar{\boldsymbol{\varepsilon}} - \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^p) \quad (2.42)$$

où $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^p$ est identifiée comme

$$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^p = \sum_{k=1}^M \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_k^p, \quad \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_k^p = -\bar{\mathbb{C}}^{-1} : \bar{\boldsymbol{\sigma}}_k^p. \quad (2.43)$$

2.2.3 Sélection des modes plastiques par la POD

Le choix des modes plastiques dans la décomposition (2.37) est un point clé dans la procédure visant à réduire le nombre de variables internes. En effet, les modes étant non uniformes, une infinité de possibilité s'offrent pour définir ces modes, et leur pertinence à reproduire les champs réels lors d'un chargement quelconque est critique pour la qualité de l'approximation. Dans les travaux d'origine, Michel et al. [65] ont proposé de définir ces modes comme des champs plastiques échantillonnés à partir de simulations pour quelques cas de chargement sur un VER. Dans ce cas, les modes résultants ne sont malheureusement pas orthogonaux et il est difficile de déterminer comment les sélectionner pour réduire au maximum le nombre de modes. Dans [82], les mêmes auteurs ont proposé d'utiliser une procédure de type POD (Propper Orthogonal Decomposition) pour sélectionner ces modes. Cette méthodologie permet non seulement de construire des modes orthogonaux, mais également de sélectionner le nombre optimal de modes. La méthode POD est décrite en détails ci-dessous.

2.2.3.1 La méthode POD

La méthode de décomposition orthogonale [53] est obtenue par une procédure datant des travaux pionniers de Pearson [73] et Schmidt [84], et qui a été réinventée sous une multitude de noms, telle que la Transformée de Karhunen-Loève

[44, 52], l'Analyse par Composantes Principale [40], les Valeurs Propres Orthogonales propres [51], l'Analyse des Facteurs [29], et les Moindres Carrés Totaux [26]. La Décomposition en Valeurs Singulières (SVD) [26] est un point clé dans la compréhension de ces méthodes.

L'idée principale de la POD est de détecter la corrélation entre des ensembles de données, en permettant d'extraire l'information pertinente. L'un des traits remarquables de cette méthode est son optimalité. Elle fournit le moyen de capturer les phénomènes dominants dans un ensemble de variables de grande dimension avec un nombre faible de modes. La méthode est très liée à la décomposition de Karhunen-Loève issue de la théorie des probabilités, à l'analyse de composants principaux utilisée dans le domaine des statistiques et à la décomposition en valeurs singulières.

Les applications de cette approches sont extrêmement nombreuses dans les disciplines en mécanique et ingénierie et physique, comme l'analyse de variables aléatoires, le traitement d'image, la compression de données, les procédés d'identification et le contrôle en chimie, en océanographie, etc [39]. La POD a été utilisée pour obtenir des modèles réduits approximatés, pour la description des écoulements turbulents [39, 53], l'analyse des vibrations et les systèmes dynamiques chaotiques [21]. En particulier, la méthode POD a été utilisée récemment pour définir des méthodes multi échelle de type FE² avec réduction des temps de calculs par construction de modèles réduits associés aux problèmes non linéaires locaux microscopiques [102]. Enfin, une discussion critique de la méthode dans le cas dynamique linéaire peut être trouvée dans [83].

Nous considérons un solide défini dans un domaine $\omega \subset \mathbb{R}^D$ dont l'évolution est gouvernée par un ensemble fini de r paramètres $\boldsymbol{\zeta} = \{\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_r\}$ pouvant être associés aux conditions aux limites, aux propriétés matérielles, à des caractéristiques géométriques, etc. Soit $\mathbf{q}$ un vecteur à valeurs réelles décrivant la réponse du système et contenant par exemple les composantes des déplacements de N points du solide discrétisé. Dans ce cas, $\mathbf{q} \in \mathbb{R}^{DN}$. L'idée principale est de projeter les équations du problèmes non linéaire sur une base de taille réduite $\boldsymbol{\Phi} = \{\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_M\}$, $\phi_i \in \mathbb{R}^M$, avec $M \ll DN$. La solution approximée est alors exprimée par

$$\tilde{\mathbf{q}}(\boldsymbol{\zeta}) = \sum_{m=1}^M \phi_m \xi_m(\boldsymbol{\zeta}) , \quad (2.44)$$

où $\xi_m(\boldsymbol{\zeta})$ sont des paramètres arbitraires. Dans les problèmes de chargements quasi-statiques, nous substituons la discrétisation temporelle habituellement utilisée par des paramètres liés à l'évolution du chargement mécanique. Soit un espace de Hilbert H dans $\mathbb{R}^N$ équipé d'un produit scalaire $\langle \cdot, \cdot \rangle$ et d'une norme définie par $\|\boldsymbol{\psi}\| = \sqrt{\langle \boldsymbol{\psi}, \boldsymbol{\psi} \rangle}$ pour $\boldsymbol{\psi} \in H$. La métrique associée est définie par $d(\boldsymbol{\psi}, \boldsymbol{\phi}) = \|\boldsymbol{\psi} - \boldsymbol{\phi}\|$ pour $\boldsymbol{\psi}, \boldsymbol{\phi} \in H$. Dans le cadre de la POD, un vecteur $\tilde{\mathbf{q}}(\boldsymbol{\zeta}) \in \mathbb{R}^{DN}$ donné par (2.44) est supposé minimiser la fonctionnelle :

$$J = \frac{1}{S} \sum_{i=1}^S \|\mathbf{q}(\boldsymbol{\zeta}_i) - \tilde{\mathbf{q}}(\boldsymbol{\zeta}_i)\|^2 , \quad (2.45)$$

sous les contraintes :

$$\langle \phi_i, \phi_j \rangle = \delta_{ij} . \quad (2.46)$$

Dans l'Eq. (2.45), S est le nombre de vecteurs échantillonnés. La résolution du problème d'optimisation sous contrainte précédant conduit au problème aux valeurs propres

$$\mathbf{Q}\phi_i = \lambda_i \phi_i . \quad (2.47)$$

Dans (2.47), $\mathbf{Q}$ est la matrice de covariance définie par :

$$\mathbf{Q} = \frac{1}{S} \mathbf{U} \mathbf{U}^T , \quad (2.48)$$

où la matrice $\mathbf{U}$ est une matrice $(DN \times S)$ dont les colonnes sont constituées des vecteurs définis par

$$\mathbf{U} = \{\mathbf{q}(\zeta_1), \mathbf{q}(\zeta_2), \dots, \mathbf{q}(\zeta_S)\} . \quad (2.49)$$

Notons que la matrice $\mathbf{Q}$ est définie semi-positive, et ses valeurs propres λ_i sont rangées par ordre décroissant : $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \lambda_M \geq \dots \geq \lambda_{DN} \geq 0$. En pratique, les valeurs propres décroissent rapidement, comme nous l'illustrerons par la suite. On peut définir l'erreur introduite par cette approximation par rapport à l'approximation complète éléments finis par

$$\epsilon(M) = \frac{1}{S} \sum_{i=1}^S \|\mathbf{q}(\zeta_i) - \tilde{\mathbf{q}}(\zeta_i)\| = \left(\sum_{i=M+1}^{DN} \lambda_i \right)^{1/2} , \quad (2.50)$$

où M est le nombre de fonctions de base. Une base réduite $\Phi = \{\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_M\}$ peut alors être construite en ne retenant qu'un nombre restreint M de fonctions de base dans l'équation (2.44) par le critère :

$$\frac{\left(\sum_{i=M+1}^{DN} \lambda_i \right)^{1/2}}{\left(\sum_{i=1}^{DN} \lambda_i \right)^{1/2}} < \delta , \quad (2.51)$$

où δ est un paramètre de tolérance, petit devant un.

2.2.3.2 Calcul numérique des modes plastiques

En vue de construire les modes POD associés aux champs de déformations plastiques représentatifs, la procédure pratique suivante est adoptée, résumée dans le cadre 2.2.3.2. Premièrement, un ou plusieurs trajets de chargements sont définis, associés à des conditions aux limites imposées sur le VER. Dans ce travail, nous choisissons des trajets de chargements cycliques. Ces choix sont discutés plus en détails dans les exemples du chapitre 3.4. Pour chaque pas de temps t^n de la simulation, les champs plastiques des N points d'intégration du maillage microscopique sont stockés dans un vecteur sous la forme

$$\boldsymbol{\pi}^{(n)} = \{\varepsilon_{11}^p(x_1), \varepsilon_{22}^p(x_1), \varepsilon_{12}^p(x_1), \dots, \varepsilon_{11}^p(x_N), \varepsilon_{22}^p(x_N), \varepsilon_{12}^p(x_N)\}^T \quad (2.52)$$

On définit alors la matrice $\mathbf{U}$ comme :

$$\mathbf{U} = [\boldsymbol{\pi}^{(1)}; \boldsymbol{\pi}^{(2)}; \dots; \boldsymbol{\pi}^{(S)}] \quad (2.53)$$

Cadre 2.2.3.2. Résumé de la procédure pour le calcul des modes plastiques représentatifs par POD.

1. **POUR** chaque trajet de chargement i
2. **POUR** chaque pas de temps t^n

Résoudre la problème élastoplastique sur le VER pour trouver les déformations plastiques $\epsilon_p(\mathbf{x})$.

Construire le vecteur

$$\boldsymbol{\pi}^{(n)} = \{\epsilon_{11}^p(x_1), \epsilon_{22}^p(x_1), \epsilon_{12}^p(x_1), \dots, \epsilon_{11}^p(x_N), \epsilon_{22}^p(x_N), \epsilon_{12}^p(x_N)\}^T$$

Collecter le vecteur dans la matrice $\mathbf{U} = [\boldsymbol{\pi}^{(1)}; \boldsymbol{\pi}^{(2)}; \dots; \boldsymbol{\pi}^{(S)}]$

FIN
3. Résoudre le problème aux valeurs propres
$$\frac{1}{S} \mathbf{U} \mathbf{U}^T \boldsymbol{\phi}_k = \lambda_k \boldsymbol{\phi}_k$$

Sélectionner les M modes associés aux valeurs propres les plus grandes suivant le critère (2.51).

où S désigne le nombre de pas de temps de la simulation. Les vecteurs propres de la matrice de covariance $\frac{1}{S} \mathbf{U} \mathbf{U}^T$ sont alors calculés comme défini dans le paragraphe précédent et les M modes les plus représentatifs suivant le critère d'erreur (2.51) sont sélectionnés. Les modes plastiques représentatifs sont alors fournis par les vecteurs propres associés aux plus grandes valeurs propres dans les points d'intégration du maillage :

$$\boldsymbol{\phi}_i = \{\epsilon_{i,11}^p(x_1), \epsilon_{i,22}^p(x_1), \epsilon_{i,12}^p(x_1), \dots, \epsilon_{i,11}^p(x_N), \epsilon_{i,22}^p(x_N), \epsilon_{i,12}^p(x_N)\}^T. \quad (2.54)$$

2.3 Un algorithme de type return-mapping pour le calcul des composites élastoplastiques

2.3.1 Algorithme général

Sous les hypothèses de décomposition du champ de déformation plastique en un nombre fini de modes (2.37), le problème est à présent paramétré par un nombre fini de coefficients α_k , identifiés comme des variables internes macroscopiques, regroupés dans un vecteur noté $\boldsymbol{\alpha} = \{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_M\}$. Le matériau homogénéisé doit satisfaire le principe de dissipation maximum avec la condition de consistance ($\bar{f} \leq 0$). Ainsi, pour une déformation macroscopique donnée, l'ensemble des paramètres $\boldsymbol{\alpha}$ identifiés comme variables internes macroscopiques est solution du problème

$$\sup_{\substack{\boldsymbol{\alpha}^{(t)} \\ \bar{f}(\boldsymbol{\sigma}^{(t)}) \leq 0}} \bar{\psi}(\boldsymbol{\sigma}(\bar{\boldsymbol{\epsilon}}, \boldsymbol{\alpha}, \dot{\boldsymbol{\alpha}})) \quad (2.55)$$

avec $\bar{\psi}$ la dissipation macroscopique. Sur la base du principe de dissipation plastique maximum ci-dessus, nous proposons un algorithme de type prédiction-

correction "return-mapping" (voir Annexe A.2) pour actualiser les variables internes α , pour une déformation macroscopique donnée. Nous définissons l'approximation en temps suivante (en rappelant que le temps est ici associé à une évolution du chargement, mais que le problème est supposé quasi-statique) :

$$\dot{\alpha} \simeq \frac{\alpha^{n+1} - \alpha^n}{\Delta t} \quad (2.56)$$

où n indique l'indice associé à l'instant t^n et $\Delta t = t^{n+1} - t^n$ est le pas de temps, supposé constant. Une procédure classique de type prédiction-correction, en suivant les algorithmes classiques de type return-mapping (voir par exemple [85]), est développée ici pour transformer le problème (2.55) en un problème de minimisation sous contrainte. À chaque pas de temps t^{n+1} , une contrainte de prédiction (ou test) $\bar{\sigma}^*$ est calculée par :

$$\bar{\sigma}^{*,n+1} = \bar{\mathbb{C}} : \bar{\varepsilon}^{n+1} + \sum_{k=1}^M \bar{\sigma}_k^p \alpha_k^n. \quad (2.57)$$

avec $\bar{\sigma}_k^p$ défini dans l'Eq. (2.41). Le critère de plasticité macroscopique

$$\bar{f}^* (\bar{\sigma}^{*,n+1}) \leq 0 \quad (2.58)$$

est alors testé. Dans le cas où $\bar{f}^* \leq 0$, le chargement est alors purement élastique et l'ensemble des variables internes reste inchangé :

$$\alpha^{n+1} = \alpha^n. \quad (2.59)$$

Dans le cas où $\bar{f}^* > 0$, un pas de correction doit alors être effectué pour vérifier

$$\sup_{\substack{\alpha^{n+1} \\ \bar{f}=0}} \bar{\psi}(\bar{\varepsilon}, \alpha^{n+1}). \quad (2.60)$$

Le problème (2.60) peut être classiquement résolu par une méthode de multiplicateurs de Lagrange et réécrit comme un problème de minimisation sans contrainte comme

$$\inf_{\alpha^{n+1}} -\bar{\psi}(\bar{\varepsilon}, \alpha^{n+1}) + \lambda^{n+1} \bar{f}^{n+1}(\bar{\varepsilon}, \alpha^{n+1}). \quad (2.61)$$

La contrainte est alors donnée par

$$\bar{\sigma}^{n+1} = \bar{\mathbb{C}} : \bar{\varepsilon}^{n+1} + \sum_k \bar{\sigma}_k^p \alpha_k^{n+1}. \quad (2.62)$$

Une illustration du schéma de prédiction-correction proposé est décrit dans la figure 2.3. En raison de l'associativité des lois locales, comme discuté précédemment, la loi effective est également associative, et l'algorithme obtenu est donc du type retour sur la surface d'écoulement par la distance minimale (closest-point return-mapping algorithm, voir [85] pour une présentation plus générale de ces algorithmes).

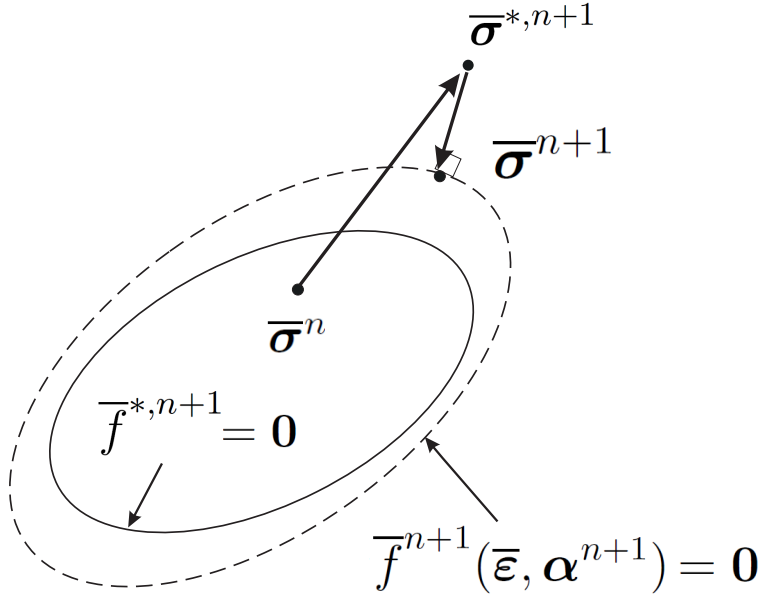


FIGURE 2.3 – Illustration du schéma de prédiction-correction.

2.3.2 Détails et expression des différents opérateurs

En utilisant l'approximation (2.56) et (2.39) la dissipation macroscopique à l'instant t^{n+1} est exprimée par :

$$\overline{\psi}^{n+1} =$$

$$\left\langle \left[\mathbb{C}(\mathbf{x}) : \mathbb{A}(\mathbf{x}) : \overline{\epsilon}^{n+1} + \sum_{k=1}^M \sigma_k^p(\mathbf{x}) \alpha_k^{n+1} \right] : \left[\sum_{k=1}^M \epsilon_k^p(\mathbf{x}) \frac{(\alpha_k^{n+1} - \alpha_k^n)}{\Delta t} \right] \right\rangle. \quad (2.63)$$

La solution du problème (2.61) est donnée par :

$$\begin{cases} -\frac{\partial \overline{\psi}^{n+1}}{\partial \alpha^{n+1}} + \lambda^{n+1} \frac{\partial \overline{f}^{n+1}}{\partial \alpha^{n+1}} = \mathbf{R}_1(\alpha^{n+1}, \lambda^{n+1}) = \mathbf{0} \\ \overline{f}^{n+1} = \mathbf{R}_2(\alpha^{n+1}, \lambda^{n+1}) = \mathbf{0} \end{cases}. \quad (2.64)$$

Le problème (2.64) est non linéaire et doit être résolu de manière itérative. Par la suite, une procédure de linéarisation de type Newton-Raphson est utilisée. Pour cela, un développement de Taylor au premier ordre de (2.64) par rapport à α_k^{n+1} et à λ_k^{n+1} à une itération k donne :

$$\begin{cases} \mathbf{R}_1(\alpha_{k+1}^{n+1}, \lambda_{k+1}^{n+1}) \simeq \mathbf{R}_1(\alpha_k^{n+1}, \lambda_k^{n+1}) + \frac{\partial \mathbf{R}_1(\alpha_k^{n+1}, \lambda_k^{n+1})}{\partial \alpha^{n+1}} \Delta \alpha + \frac{\partial \mathbf{R}_1(\alpha_k^{n+1}, \lambda_k^{n+1})}{\partial \lambda^{n+1}} \Delta \lambda \\ \mathbf{R}_2(\alpha_{k+1}^{n+1}, \lambda_{k+1}^{n+1}) \simeq \mathbf{R}_2(\alpha_k^{n+1}, \lambda_k^{n+1}) + \frac{\partial \mathbf{R}_2(\alpha_k^{n+1}, \lambda_k^{n+1})}{\partial \alpha^{n+1}} \Delta \alpha + \frac{\partial \mathbf{R}_2(\alpha_k^{n+1}, \lambda_k^{n+1})}{\partial \lambda^{n+1}} \Delta \lambda \end{cases}. \quad (2.65)$$

En égalant les termes de gauche de l'Eq. (2.65) à zéro, on obtient le système suivant d'équations, écrit sous forme matricielle comme :

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial \mathbf{R}_1(\boldsymbol{\alpha}_k^{n+1}, \lambda_k^{n+1})}{\partial \boldsymbol{\alpha}_k^{n+1}} & \frac{\partial \mathbf{R}_1(\boldsymbol{\alpha}_k^{n+1}, \lambda_k^{n+1})}{\partial \lambda_k^{n+1}} \\ \frac{\partial \mathbf{R}_2(\boldsymbol{\alpha}_k^{n+1}, \lambda_k^{n+1})}{\partial \boldsymbol{\alpha}_k^{n+1}} & \frac{\partial \mathbf{R}_2(\boldsymbol{\alpha}_k^{n+1}, \lambda_k^{n+1})}{\partial \lambda_k^{n+1}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta \boldsymbol{\alpha} \\ \Delta \lambda \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \mathbf{R}_1(\boldsymbol{\alpha}_k^{n+1}, \lambda_k^{n+1}) \\ \mathbf{R}_2(\boldsymbol{\alpha}_k^{n+1}, \lambda_k^{n+1}) \end{bmatrix}. \quad (2.66)$$

Les variables internes et les multiplicateurs de Lagrange sont actualisés comme :

$$\begin{cases} \boldsymbol{\alpha}_{k+1}^{n+1} = \boldsymbol{\alpha}_k^{n+1} + \Delta \boldsymbol{\alpha}, \\ \lambda_k^{n+1} = \lambda_k^{n+1} + \Delta \lambda, \end{cases} \quad (2.67)$$

jusqu'à ce qu'un critère de tolérance soit atteint. Dans la suite, nous développons les différentes expressions pour le résidu et la matrice tangente dans (2.76). Le premier ensemble d'équations dans (2.64) est exprimé par

$$\begin{aligned} (R_1)_i^{n+1} &= \left\langle \mathbb{C}(\mathbf{x}) : \mathbf{D}_i(\mathbf{x}) : \sum_{k=1}^M \boldsymbol{\varepsilon}_k^p(\mathbf{x}) \frac{(\alpha_k^{n+1} - \alpha_k^n)}{\Delta t} \right\rangle \\ &\quad - \left\langle \mathbb{C}(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\varepsilon}_i^p(\mathbf{x}) : \sum_{k=1}^M \boldsymbol{\varepsilon}_k^p(\mathbf{x}) \frac{(\alpha_k^{n+1} - \alpha_k^n)}{\Delta t} \right\rangle \\ &\quad + \left\langle \mathbb{C}(\mathbf{x}) : \mathbb{A}(\mathbf{x}) : \frac{\boldsymbol{\varepsilon}_i^p(\mathbf{x})}{\Delta t} \right\rangle : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} + \sum_{k=1}^M \left\langle \mathbb{C}(\mathbf{x}) : \mathbf{D}_k(\mathbf{x}) : \frac{\boldsymbol{\varepsilon}_i^p(\mathbf{x})}{\Delta t} \right\rangle \alpha_k^{n+1} \\ &\quad - \sum_{k=1}^M \left\langle \mathbb{C}(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\varepsilon}_k^p(\mathbf{x}) : \frac{\boldsymbol{\varepsilon}_i^p(\mathbf{x})}{\Delta t} \right\rangle \alpha_k^{n+1}, \end{aligned} \quad (2.68)$$

qui peut être réécrit sous forme compacte comme :

$$\begin{aligned} R_i^1 &= \sum_{k=1}^M \left(\bar{H}^{ik} + \bar{H}^{ki} - \bar{J}^{ik} - \bar{J}^{ki} \right) \alpha_k^{n+1} \\ &\quad + \sum_{k=1}^M \left(\bar{J}^{ik} - \bar{H}^{ik} \right) \alpha_k^n + \bar{\mathbf{s}}_i : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} + \lambda^{n+1} \frac{\partial f^{n+1}}{\partial \alpha_i^{n+1}} \end{aligned}$$

avec

$$\bar{H}^{ik} = \left\langle \frac{\mathbb{C}(\mathbf{x}) : \mathbf{D}_i(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\varepsilon}_k^p(\mathbf{x})}{\Delta t} \right\rangle, \quad (2.69)$$

$$\bar{J}^{ik} = \left\langle \frac{\mathbb{C}(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\varepsilon}_i^p(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\varepsilon}_k^p(\mathbf{x})}{\Delta t} \right\rangle, \quad (2.70)$$

et

$$\bar{\mathbf{s}}_i = \langle \mathbb{C}(\mathbf{x}) : \mathbb{A}(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\varepsilon}_i^p(\mathbf{x}) \rangle. \quad (2.71)$$

Le calcul de $R_2^{n+1} = \bar{f}^{n+1}$ est précisé dans le paragraphe 2.3.4.

Dans le système matriciel (2.76), les différents opérateurs matriciels sont détaillés par la suite. La première sous-matrice $\mathbf{K}$ dans le système (2.76) est exprimée par

$$K_{ij} = \frac{\partial (R_1)_i^{n+1}}{\partial \alpha_j^{n+1}} = \left(\overline{H}^{ik} + \overline{H}^{ki} - \overline{J}^{ij} - \overline{J}^{ji} \right) + \lambda^{n+1} \frac{\partial^2 \overline{f}^{n+1}}{\partial \alpha_i^{n+1} \partial \alpha_j^{n+1}}. \quad (2.72)$$

Le vecteur $\mathbf{G}$ est exprimé par

$$G_i = \frac{\partial (R_1)_i^{n+1}}{\partial \lambda^{n+1}} = \frac{\partial \overline{f}}{\partial \alpha_i^{n+1}} \quad (2.73)$$

$$\frac{\partial (R_2)_i^{n+1}}{\partial \alpha_i^{n+1}} = G_i = \frac{\partial \overline{f}}{\partial \alpha_i^{n+1}} \quad (2.74)$$

et

$$\frac{\partial (R_2)_i^{n+1}}{\partial \lambda^{n+1}} = 0. \quad (2.75)$$

Nous obtenons finalement le système linéarisé :

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K} & \mathbf{G} \\ \mathbf{G}^T & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta \boldsymbol{\alpha} \\ \Delta \lambda \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \mathbf{R}_1(\boldsymbol{\alpha}_k^{n+1}, \lambda_k^{n+1}) \\ \overline{f}(\boldsymbol{\alpha}_k^{n+1}, \lambda_k^{n+1}) \end{bmatrix} \quad (2.76)$$

avec $\mathbf{K}$ et $\mathbf{G}$ exprimés par (2.72) et (2.73), respectivement. La fonction $\overline{f}$ est une fonction implicite par rapport à $\boldsymbol{\alpha}$ et $\overline{\varepsilon}$, dont le calcul ainsi que celui de ses dérivées doit être réalisé numériquement, comme précisé dans le paragraphe (2.3.4). Notons que les dérivées partielles $\partial^2 \overline{f} / \partial \alpha_i \partial \alpha_j$ étant symétriques, seule la partie triangulaire supérieure de la matrice Hessienne nécessite d'être évaluée. Pour résumer, les différentes étapes de l'algorithme sont décrites ci-dessous :

Résumé de l'algorithme

1. Calculer les modes POD $\boldsymbol{\varepsilon}^p(\mathbf{x})$: Effectuer des simulations sur le VER suivant des trajets de chargement pré-définis. Stocker les valeurs de $\boldsymbol{\varepsilon}^p(\mathbf{x}, t)$. Calculer et sélectionner les M modes POD en utilisant la procédure décrite dans la section 2.2.3.2.
2. Calculer les opérateurs locaux et macro $\overline{\mathbb{C}}, \overline{\mathbf{s}}_i, \overline{J}^{ik}, \overline{H}^{ik}, \overline{\boldsymbol{\sigma}}_i^p, \mathbf{D}_i(\mathbf{x}), \mathbf{A}(\mathbf{x})$, $i = 1, \dots, M, k = 1, \dots, M$ (voir paragraphe 2.3.3).
3. Calculer la réponse du matériau élastoplastique effectif en utilisant l'algorithme décrit dans le cadre 2.3.2.

2.3.3 Calcul numérique des différents opérateurs

2.3.3.1 Opérateur $\mathbf{A}(\mathbf{x})$

Les composantes de $\mathbf{A}(\mathbf{x})$ sont données par

$$A_{ijkl}(\mathbf{x}) = \varepsilon_{ij}^{(kl)}(\mathbf{x}), \quad (2.77)$$

Cadre 2.3.2. Algorithme de prédiction-correction pour l'actualisation des variables internes macroscopiques

1. **POUR** chaque pas de temps t^{n+1} , connaissant $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^{n+1}$, $\boldsymbol{\alpha}^n$:
 2. Calculer $\bar{f}^{*,n+1}$ (voir paragraphe 2.3.4)
 3. **SI** $\bar{f}^{*,n+1} \leq 0$
Pas élastique : $\boldsymbol{\varepsilon}^{n+1} = \boldsymbol{\varepsilon}^n$
 $\bar{\boldsymbol{\sigma}}^{*,n+1} = \bar{\mathbb{C}} : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^{n+1} + \sum_k \bar{\boldsymbol{\sigma}}_k^p \alpha_k^n$
Aller en 1.
 4. **SI** $\bar{f}^{*,n+1} > 0$
Pas plastique : Résoudre le problème (2.64) en utilisant la procédure de Newton-Raphson décrite dans la section 2.3.4 pour trouver $\boldsymbol{\alpha}^{n+1}$
Calculer la contrainte $\bar{\boldsymbol{\sigma}}^{n+1} = \bar{\mathbb{C}} : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^{n+1} + \sum_k \bar{\boldsymbol{\sigma}}_k^p \alpha_k^{n+1}$
Aller en 1.
- FIN**

où $\varepsilon_{ij}^{(kl)}(\mathbf{x})$ est le champ de déformations obtenu en résolvant le problème (P^ε) pour $\boldsymbol{\varepsilon}^p(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ et $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}} = \frac{1}{2}(\mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_l + \mathbf{e}_l \otimes \mathbf{e}_k)$. En considérant un cas 2D en déformations planes, les champs de déformation élémentaires macroscopiques sont donnés par

$$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^{(11)} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^{(22)} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^{(12)} = \begin{bmatrix} 0 & 1/2 & 0 \\ 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (2.78)$$

En écrivant les déformations sous forme vectorielle, on a :

$$\{\boldsymbol{\varepsilon}^{(kl)}\} = \begin{bmatrix} \varepsilon_{11}^{kl} \\ \varepsilon_{22}^{kl} \\ 2\varepsilon_{12}^{kl} \end{bmatrix}. \quad (2.79)$$

En utilisant une approximation classique d'éléments finis, on a

$$\{\boldsymbol{\varepsilon}^{(kl)}\} = \mathbf{B}^e(\mathbf{x}) \mathbf{u}_e^{(kl)}, \quad (2.80)$$

où $\mathbf{B}^e(\mathbf{x})$ est une matrice de dérivées de fonctions de forme où $\mathbf{u}_e^{(kl)}$ est la solution en déplacements dont $\boldsymbol{\varepsilon}^{(kl)}(\mathbf{x})$ dérive, dans les nœuds de l'élément e . La forme matricielle associée à $\mathbb{A}(\mathbf{x})$ est donc donnée, en 2D et déformations planes, par :

$$\underbrace{\mathbf{A}(\mathbf{x})}_{3 \times 3} = \underbrace{\mathbf{B}^e(\mathbf{x})}_{3 \times 2n} \begin{bmatrix} \underbrace{\mathbf{u}_e^{(11)}}_{2n \times 1}; \underbrace{\mathbf{u}_e^{(22)}}_{2n \times 1}; \underbrace{\mathbf{u}_e^{(12)}}_{2n \times 1} \end{bmatrix} = \underbrace{\mathbf{B}^e(\mathbf{x})}_{3 \times 2n} \underbrace{\mathbf{U}^e}_{2n \times 3} \quad (2.81)$$

avec n le nombre de nœuds par élément.

2.3.3.2 Opérateur $\mathbf{D}_i(\mathbf{x})$

Les champs de déformation $\mathbf{D}_i(\mathbf{x})$ sont obtenus en résolvant le problème P^ε pour $\bar{\varepsilon} = 0$ et $\alpha_i = 1$, $\alpha_j = 0$. Soit $\mathbf{u}^{(\alpha i)}$ la solution nodale en déplacement du problème, on peut écrire $\mathbf{D}_i(\mathbf{x})$ sous la forme vectorielle :

$$\underbrace{\{\mathbf{D}_i(\mathbf{x})\}}_{3 \times 1} = \underbrace{\mathbf{B}^e(\mathbf{x})}_{3 \times 2n} \underbrace{\mathbf{u}_e^{\alpha i}}_{2n \times 1}. \quad (2.82)$$

2.3.3.3 Opérateur $\bar{\mathbb{C}}$

Soit $\mathbf{C}(\mathbf{x})$ la forme matricielle associée à $\mathbb{C}(\mathbf{x})$:

$$\mathbf{C}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} C_{1111}(\mathbf{x}) & C_{1122}(\mathbf{x}) & C_{1112}(\mathbf{x}) \\ C_{1122}(\mathbf{x}) & C_{2222}(\mathbf{x}) & C_{2212}(\mathbf{x}) \\ C_{1112}(\mathbf{x}) & C_{2212}(\mathbf{x}) & C_{1212}(\mathbf{x}) \end{bmatrix}. \quad (2.83)$$

La forme matricielle $\bar{\mathbb{C}}$ associée à $\bar{\mathbb{C}}$ est donnée classiquement par :

$$\bar{\mathbb{C}} = \langle \mathbf{C}(\mathbf{x}) \mathbf{B}^e(\mathbf{x}) \rangle \mathbf{U}^e \quad (2.84)$$

qui est évaluée numériquement par

$$\underbrace{\bar{\mathbb{C}}}_{3 \times 3} = \frac{1}{\sum_e A^e} \sum_e \sum_k^{N_{int}} \underbrace{\mathbf{C}(\mathbf{x}_k^e)}_{3 \times 3} \underbrace{\mathbf{B}^e(\mathbf{x}_k^e)}_{3 \times 2n} \underbrace{\mathbf{U}^e}_{2n \times 3} w_k A^e, \quad (2.85)$$

où e est le nombre d'éléments dans le maillage associé au VER, N_{int} est le nombre de points d'intégration par élément, $\mathbf{x}_k^e$ est la position d'un point d'intégration dans un élément, w_k est le poids de Gauss associé à un point d'intégration et A^e est l'aire d'un élément.

2.3.3.4 Opérateur $\bar{\mathbf{s}}_i(\mathbf{x})$

De la même manière, en mettant $\bar{\mathbf{s}}_i(\mathbf{x})$ sous la forme vectorielle

$$\{\bar{\mathbf{s}}_i(\mathbf{x})\} = \begin{bmatrix} (\bar{\mathbf{s}}_i)_{11} \\ (\bar{\mathbf{s}}_i)_{22} \\ (\bar{\mathbf{s}}_i)_{12} \end{bmatrix} \quad (2.86)$$

on a :

$$\underbrace{\{\bar{\mathbf{s}}_i(\mathbf{x})\}}_{3 \times 1} = \left\langle \underbrace{\mathbf{C}(\mathbf{x})}_{3 \times 3} \underbrace{\mathbf{B}^e(\mathbf{x})}_{3 \times 2n} \right\rangle \underbrace{\mathbf{u}_i^{pe}}_{2n \times 1}, \quad (2.87)$$

avec $\mathbf{u}_i^{pe}$ la solution en déplacements associée au mode POD $\boldsymbol{\varepsilon}_i^p(\mathbf{x})$. On peut évaluer numériquement $\{\bar{\mathbf{s}}_i(\mathbf{x})\}$ par :

$$\{\bar{\mathbf{s}}_i(\mathbf{x})\} = \frac{1}{\sum_e A^e} \sum_e \sum_k \mathbf{C}(\mathbf{x}^k) \mathbf{B}^e(\mathbf{x}^k) w_k A_k \mathbf{u}_i^{pe}. \quad (2.88)$$

2.3.3.5 Opérateurs $\overline{H}^{ik}$ et $\overline{J}^{ik}$

De même, on a :

$$\overline{H}^{ik} = \frac{1}{\sum_e A^e} \sum_e \sum_l \{ \mathbf{u}_e^{\alpha i} \}^T \{ \mathbf{B}^e(\mathbf{x}^l) \}^T \mathbf{C}(\mathbf{x}^l) \mathbf{B}^e(\mathbf{x}^l) w_l A_l \mathbf{u}_l^{pe}, \quad (2.89)$$

$$\overline{J}^{ik} = \frac{1}{\sum_e A^e} \sum_e \sum_l \{ \mathbf{u}_e^{\alpha i} \}^T \{ \mathbf{B}^e(\mathbf{x}^l) \}^T \mathbf{C}(\mathbf{x}^l) \mathbf{B}^e(\mathbf{x}^l) w_l A_l \mathbf{u}_e^{\alpha k}, \quad (2.90)$$

qui doivent être évalués pour $i = 1, \dots, M$, $k = 1, \dots, M$. Il est à noter que ces calculs préliminaires sont linéaires et peu coûteux à effectuer.

2.3.4 Evaluation numérique de $\overline{f}$ et de ses dérivées

Une solution pour définir $\overline{f}$ associée au domaine élastique macroscopique $\overline{\kappa}$ est de prendre la valeur maximale des fonctions $f(\mathbf{x})$ associées aux points matériels dans le VER :

$$\overline{f} = \sup_{\mathbf{x}} (f(\mathbf{x}, \overline{\varepsilon}, \overline{\sigma}(\alpha))) \quad (2.91)$$

ou encore, en considérant un maillage par éléments finis du VER et k points d'intégration de Gauss :

$$\overline{f} = \sup_k (f^{(k)}(\overline{\varepsilon}, \overline{\sigma}(\alpha))) \quad (2.92)$$

où $f^{(k)}$ sont les valeurs de la fonction d'écoulement associée à un point d'intégration k dans le maillage. La fonction construite $\overline{f}$ possède bien un bord $\overline{\kappa}$ satisfaisant la définition (2.35). Une illustration est fournie dans la figure 2.4.

2.3.4.1 Evaluation directe par post-traitement sur le VER

Une première méthode consiste, lors du calcul macroscopique, à évaluer $\overline{f}$ par (2.92) en faisant pour toutes les fois où la fonction doit être évaluée, une boucle sur tous les éléments du maillage microscopique. Le calcul ne nécessite pas de résoudre un système d'équations mais simplement d'évaluer numériquement les fonctions $\overline{f}^{(k)}$ en utilisant la relation de localisation (2.39) par post-traitement, connaissant $\overline{\varepsilon}$ et α dans tous les éléments du VER. Le temps de calcul associé à cette évaluation croît donc linéairement avec le nombre d'éléments dans le VER. L'évaluation des dérivées est réalisée par différences finies :

$$\frac{\partial \overline{f}(\mathbf{x}, \overline{\varepsilon}, \alpha)}{\partial \alpha_k} \simeq \frac{\overline{f}(\mathbf{x}, \overline{\varepsilon}, \alpha + \delta \alpha^{(k)}) - \overline{f}(\mathbf{x}, \overline{\varepsilon}, \alpha)}{\delta \alpha} \quad (2.93)$$

où

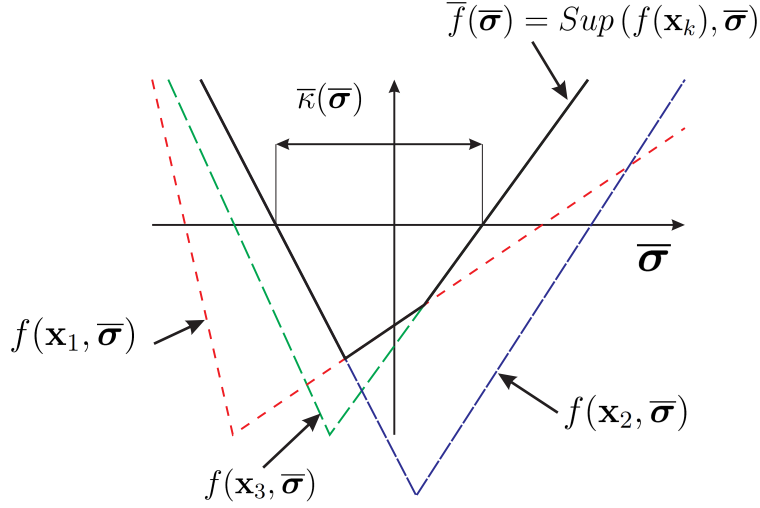


FIGURE 2.4 – Illustration de la construction de la fonction $\bar{f}$.

$$\delta \alpha^{(k)} = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ \delta \alpha \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \quad \leftarrow k \quad (2.94)$$

avec $\delta \alpha^{(k)}$ une perturbation et $\delta \alpha$ un paramètre scalaire tel que $|\delta \alpha| \ll 1$. De même, en notant $\bar{f}(\mathbf{x}, \bar{\epsilon}, \alpha) \equiv \bar{f}(\alpha)$ on peut estimer la dérivée seconde par :

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \bar{f}(\alpha)}{\partial \alpha_k \partial \alpha_m} \simeq & \frac{\bar{f}(\alpha + \delta \alpha^{(k)} + \delta \alpha^{(m)}) - \bar{f}(\alpha - \delta \alpha^{(k)} + \delta \alpha^{(m)}) - \bar{f}(\alpha + \delta \alpha^{(k)})}{4\delta \alpha^2} \\ & + \frac{\bar{f}(\alpha - \delta \alpha^{(k)} - \delta \alpha^{(m)}) - \bar{f}(\alpha + \delta \alpha^{(k)} - \delta \alpha^{(m)})}{4\delta \alpha^2}. \end{aligned} \quad (2.95)$$

2.3.4.2 Méthode accélérée par représentation de $\bar{f}$ en variables séparées

Pour accélérer les calculs lors de la mise en œuvre de l'algorithme de return-mapping, nous proposons ici une deuxième méthode pour représenter $\bar{f}$, qui est une fonction scalaire multidimensionnelle de $\bar{\epsilon}$ et α , comme une représentation en variables séparées stockées à partir de calculs préliminaires réalisés sur le VER. Nous supposons que la fonction $\bar{f}$ peut être approximée par :

$$\bar{f}(\bar{\epsilon}, \alpha) \simeq \sum_{r=1}^R f_r^{\epsilon_{11}}(\bar{\epsilon}_{11}) f_r^{\epsilon_{22}}(\bar{\epsilon}_{22}) f_r^{\epsilon_{12}}(\bar{\epsilon}_{12}) f_r^{\alpha_1}(\alpha_1) \times \dots \times f_r^{\alpha_M}(\alpha_M). \quad (2.96)$$

Les fonctions $f_r^{\varepsilon_{ij}}(\bar{\varepsilon}_{ij})$ et $f_r^{\alpha_i}(\alpha_i)$ sont des fonctions unidimensionnelles, qui peuvent être calculées par la méthode PARAFAC [45]. Les détails sur la façon de calculer les différentes fonctions de cette approximation à partir de valeurs pré-calculées sont précisé dans le chapitre 4.5. Le nombre de calculs préliminaires pour pouvoir calculer $\bar{f}$ dans cette méthode est important, de l'ordre de $N^{3(d-1)+M}$, avec d la dimension du problème et m le nombre de modes, N étant le nombre de points d'échantillonnage suivant chaque axe de l'espace multidimensionnel et M le nombre de modes. Cette technique est donc restreinte pour un nombre $3(d-1)+M$ faible. Ces calculs préliminaires peuvent néanmoins être réalisés en parallèle, car tous indépendants. L'avantage est qu'une fois les fonctions $f_r^{\varepsilon_{ij}}(\varepsilon_{ij})$ et $f_r^{\alpha_i}(\alpha_i)$ calculées, il n'est plus nécessaire de ré-effectuer des calculs de post-traitement sur le maillage du VER pour évaluer la fonction $\bar{f}$, qui est calculée simplement par interpolation dans les vecteurs discrets associés à $f_r^{\varepsilon_{ij}}(\varepsilon_{ij})$ et $f_r^{\alpha_i}(\alpha_i)$:

$$\bar{f}(\bar{\varepsilon}, \alpha) \simeq \sum_{r=1}^R \tilde{f}_{\varepsilon_{11}}(\bar{\varepsilon}_{11}) \tilde{f}_{\varepsilon_{22}}(\bar{\varepsilon}_{22}) \tilde{f}_{\varepsilon_{12}}(\bar{\varepsilon}_{12}) \tilde{f}_{\alpha_1}(\alpha_1) \times \dots \times \tilde{f}_{\alpha_M}(\alpha_M) \quad (2.97)$$

avec

$$\tilde{f}_{\varepsilon_{11}}(\bar{\varepsilon}_{11}) \simeq \sum_i N_i(\bar{\varepsilon}_{11}) \left\{ \tilde{f}_{\varepsilon_{11}} \right\}_i \quad (2.98)$$

où $\left\{ \tilde{f}_{\varepsilon_{11}} \right\}_i$ est une valeur discrète de $f_{\varepsilon_{11}}$ fournie sous forme de vecteur par la méthode PARAFAC et N_i une fonction d'interpolation C^1 . Par exemple, des fonctions d'interpolation de type spline sont utilisées dans ce travail. De même, les dérivées sont simplement exprimées par :

$$\frac{\partial \bar{f}}{\partial \alpha_i}(\bar{\varepsilon}, \alpha) \simeq \sum_{r=1}^R \tilde{f}_{\varepsilon_{11}}(\bar{\varepsilon}_{11}) \tilde{f}_{\varepsilon_{22}}(\bar{\varepsilon}_{22}) \tilde{f}_{\varepsilon_{12}}(\bar{\varepsilon}_{12}) \tilde{f}_{\alpha_1}(\bar{\alpha}_1) \times \dots \frac{\partial \tilde{f}_{\alpha_i}(\bar{\alpha}_i)}{\alpha_i} \dots \times \tilde{f}_{\alpha_M}(\bar{\alpha}_M) \quad (2.99)$$

et

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \bar{f}}{\partial \alpha_i \partial \alpha_j}(\bar{\varepsilon}, \alpha) &\simeq \sum_{r=1}^R \tilde{f}_{\varepsilon_{11}}(\bar{\varepsilon}_{11}) \tilde{f}_{\varepsilon_{22}}(\bar{\varepsilon}_{22}) \tilde{f}_{\varepsilon_{12}}(\bar{\varepsilon}_{12}) \tilde{f}_{\alpha_1}(\bar{\alpha}_1) \times \dots \\ &\dots \frac{\partial \tilde{f}_{\alpha_i}(\bar{\alpha}_i)}{\alpha_i} \dots \frac{\partial \tilde{f}_{\alpha_j}(\bar{\alpha}_j)}{\alpha_j} \dots \times \tilde{f}_{\alpha_M}(\bar{\alpha}_M) \quad i \neq j, \end{aligned} \quad (2.100)$$

$$\frac{\partial^2 \bar{f}}{\partial \alpha_i^2}(\bar{\varepsilon}, \alpha) \simeq \sum_{r=1}^R \tilde{f}_{\varepsilon_{11}}(\bar{\varepsilon}_{11}) \tilde{f}_{\varepsilon_{22}}(\bar{\varepsilon}_{22}) \tilde{f}_{\varepsilon_{12}}(\bar{\varepsilon}_{12}) \tilde{f}_{\alpha_1}(\bar{\alpha}_1) \times \dots \frac{\partial^2 \tilde{f}_{\alpha_i}(\bar{\alpha}_i)}{\alpha_i^2} \dots \times \tilde{f}_{\alpha_M}(\bar{\alpha}_M) \quad i = j. \quad (2.101)$$

2.4 Conclusion

Nous avons présenté dans ce chapitre une première contribution originale consistant en une méthode d'homogénéisation pour les composites élastoplastiques, étendant le cas de la méthode NTFA pour ce cas. La méthodologie consiste, après avoir sélectionné des modes de déformation élastoplastiques représentatifs par une approche de type POD, à définir une procédure d'actualisation des variables internes macroscopiques associées aux modes plastiques par le biais d'un algorithme de type prédiction-correction (return-mapping), permettant de considérer des cycles de charge et de décharge et la définition d'un domaine élastique macroscopique. Enfin, nous avons proposé plusieurs techniques numériques permettant d'évaluer la fonction d'écoulement macroscopique avec ou sans retours au VER au cours du calcul macroscopique pour l'évaluation des contraintes. Dans le chapitre suivant, nous appliquons cette méthode et évaluons la qualité associée au travers de plusieurs exemples numériques.

Chapitre 3

Applications de la méthode NTFA en homogénéisation élastoplastique

3.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous appliquons la méthodologie décrite précédemment à plusieurs exemples associés à des composites hétérogènes dont les phases sont élastoplastiques. Nous présentons dans un premier temps un exemple de stratifié dont les phases sont élastoplastiques, et pour lequel une solution analytique peut être établie et permettre une comparaison avec la solution numérique. Dans une deuxième partie, nous testons la qualité de la méthode pour des exemples impliquant des microstructures périodiques bidimensionnelles, associées à des matériaux contenant des inclusions ou des pores. Des chargements cycliques avec charge et décharge sont appliqués, et la solution obtenue par la méthode d'homogénéisation présentée dans le chapitre précédent est comparée avec une solution de référence fournie par un calcul éléments finis direct.

3.2 Composite stratifié élastoplastique

Dans ce premier exemple, un composite stratifié est considéré, comme représenté dans la figure 3.1. Celui-ci est constitué de couches d'épaisseur finie, infinies dans le plan $(\mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3)$ des couches et associés à des matériaux élastoplastiques supposés homogènes par phase. Pour ce cas, une solution analytique a été fournie dans [32], que nous rappelons ci-dessous. Nous comparons ensuite la solution analytique avec un calcul numérique de réponse homogénéisée en appliquant le schéma décrit dans le chapitre précédent.

3.2.1 Solution analytique

3.2.1.1 Définition du problème et équations associées

Soit une base orthonormale $\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3\}$ avec $\mathbf{n} = \mathbf{e}_3$ la normale au plan constituant les empilements du composite, et $\mathbb{P}$ et $\mathbb{P}^\perp$ des opérateurs de projection dans le plan normal aux couches et suivant la normale au plan :

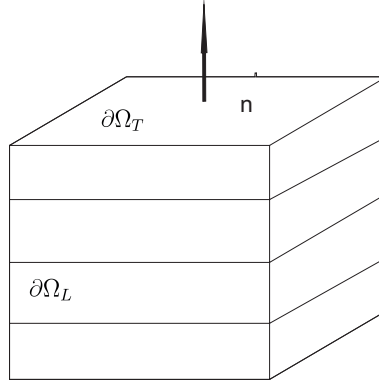


FIGURE 3.1 – Composite stratifié composé de phases élastoplastiques : géométrie.

$$\mathbb{P}\boldsymbol{\varepsilon} = \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & 0 \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbb{P}^\perp \boldsymbol{\sigma} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \sigma_{13} \\ 0 & 0 & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{bmatrix}, \quad (3.1)$$

avec

$$\mathbb{P} = (\mathbf{I} - \mathbf{N}) \underline{\otimes} (\mathbf{I} - \mathbf{N}) = \mathbb{I} - \mathbf{N} \underline{\otimes} \mathbf{I} - \mathbf{I} \underline{\otimes} \mathbf{N} + \mathbf{N} \underline{\otimes} \mathbf{N}$$

et $\mathbf{N} = \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}$, $\mathbb{P}^\perp = \mathbb{I} - \mathbb{P}$. On considère les conditions aux limites mixtes suivantes pour prévenir les effets de bord libre de le VER :

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbb{P}\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}\mathbf{x} \text{ sur } \partial\Omega_L \text{ et } \boldsymbol{\sigma}\mathbf{n} = (\mathbb{P}^\perp \bar{\boldsymbol{\sigma}})\mathbf{n} \text{ sur } \partial\Omega_T, \quad (3.2)$$

où $\partial\Omega_L$ et $\partial\Omega_T$ désignent les bords de Dirichlet et de Neumann, associés respectivement aux bords supérieurs et inférieurs, et aux faces latérales, respectivement (voir figure 3.1).

3.2.1.2 Tenseur de localisation de contraintes et de déformations

La loi de comportement est donnée dans chaque phase par :

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \mathbb{C}(\mathbf{x}) : (\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) - \boldsymbol{\varepsilon}^p(x)), \quad (3.3)$$

avec

$$\mathbb{C} = 2\mu \mathbf{I} \underline{\otimes} \mathbf{I} + \lambda \mathbf{I} \otimes \mathbf{I}. \quad (3.4)$$

En adoptant un critère de von Mises

$$f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\sigma}) = \sqrt{\boldsymbol{\varepsilon} : \mathbb{H} : \boldsymbol{\varepsilon}} - \sqrt{\frac{2}{3}} y_0(\mathbf{x}) \leq 0, \quad (3.5)$$

où $\mathbb{H} = \mathbf{I} \underline{\otimes} \mathbf{I} - \mathbf{I} \otimes \mathbf{I}/3$ et $y_0(x)$ la limite élastique. On définit :

$$\mathbb{F} = (\mathbb{P}^\perp \mathbb{C} \mathbb{P}^\perp)^{-1} = \frac{1}{2\mu} (\mathbb{P}^\perp - \eta \mathbf{N} \otimes \mathbf{N}) \quad (3.6)$$

et

$$\mathbb{G} = (\mathbb{P}\mathbb{C}^{-1}\mathbb{P})^{-1} = 2\mu [\mathbb{P} + \eta(\mathbf{I} - \mathbf{N}) \otimes (\mathbf{I} - \mathbf{N})] \quad (3.7)$$

d'où $\eta = \lambda/(\lambda + 2\mu) = \nu/(1 + \nu)$. On a donc :

$$\langle \mathbb{F} \rangle = \frac{1}{2} \langle \mu^{-1} \rangle \mathbb{P}^\perp - \frac{1}{2} \langle \mu^{-1} \eta \rangle \mathbf{N} \otimes \mathbf{N}, \quad (3.8)$$

$$\langle \mathbb{G} \rangle = 2 \langle \mu \rangle \mathbb{P} + 2 \langle \mu \eta \rangle (\mathbf{I} - \mathbf{N}) \otimes (\mathbf{I} - \mathbf{N}). \quad (3.9)$$

On obtient aussi l'inverse de $\mathbb{F}$ et $\mathbb{G}$ de manière explicite par :

$$\langle \mathbb{F} \rangle^{-1} = \frac{2}{\langle \mu \rangle^{-1}} (\mathbb{P}^\perp + \frac{\langle \mu^{-1} \eta \rangle}{\langle \mu^{-1} \rangle - \langle \mu^{-1} \eta \rangle} \mathbf{N} \otimes \mathbf{N}) \quad (3.10)$$

et

$$\langle \mathbb{G} \rangle^{-1} = \frac{1}{2 \langle \mu \rangle} \left[\mathbb{P} - \frac{\langle \mu \eta \rangle}{\langle \mu \rangle + 2 \langle \mu \eta \rangle} (\mathbf{I} - \mathbf{N}) \otimes (\mathbf{I} - \mathbf{N}) \right]. \quad (3.11)$$

On aboutit aux relations suivantes entre les tenseurs microscopiques et macroscopiques :

$$\boldsymbol{\varepsilon} = (\mathbb{S}\mathbb{G} + \mathbb{F} \langle \mathbb{F} \rangle^{-1} \langle \mathbb{F}\mathbb{C} \rangle) \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} + \mathbb{F}\mathbb{C}\boldsymbol{\varepsilon}^p - \mathbb{F} \langle \mathbb{F} \rangle^{-1} \langle \mathbb{F}\mathbb{C} \rangle \boldsymbol{\varepsilon}^p \quad (3.12)$$

$$\boldsymbol{\sigma} = (\mathbb{C}\mathbb{F} + \mathbb{G} \langle \mathbb{G} \rangle^{-1} \langle \mathbb{G}\mathbb{S} \rangle) \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} - \mathbb{G}\boldsymbol{\varepsilon}^p + \mathbb{G} \langle \mathbb{G} \rangle^{-1} \langle \mathbb{G}\boldsymbol{\varepsilon}^p \rangle. \quad (3.13)$$

Nous identifions les tenseurs de localisation de contrainte et déformation :

$$\mathbb{A} = \mathbb{S}\mathbb{G} + \mathbb{F} \langle \mathbb{F} \rangle^{-1} \langle \mathbb{F}\mathbb{C} \rangle \quad (3.14)$$

$$\mathbb{B} = \mathbb{C}\mathbb{F} + \mathbb{G} \langle \mathbb{G} \rangle^{-1} \langle \mathbb{G}\mathbb{S} \rangle \quad (3.15)$$

et les tenseur de deformation et de contrainte residuelles :

$$\boldsymbol{\varepsilon}_0 = \mathbb{F}\mathbb{C}\boldsymbol{\varepsilon}^p - \mathbb{F} \langle \mathbb{F} \rangle^{-1} \langle \mathbb{F}\mathbb{C}\boldsymbol{\varepsilon}^p \rangle \quad (3.16)$$

$$\boldsymbol{\sigma}_r = -\mathbb{G}\boldsymbol{\varepsilon}^p + \mathbb{G} \langle \mathbb{G} \rangle^{-1} \langle \mathbb{G}\boldsymbol{\varepsilon}^p \rangle. \quad (3.17)$$

3.2.1.3 Expressions des quantités effectives

Le tenseur de rigidité effectif est obtenu par :

$$\begin{aligned} \bar{\mathbb{C}} &= \langle \mathbb{G} \rangle + \langle \mathbb{C}\mathbb{F} \rangle \langle \mathbb{F} \rangle^{-1} \langle \mathbb{F}\mathbb{C} \rangle \\ &= \bar{C}_1 \mathbb{P} + \bar{C}_2 \mathbb{P}^\perp + \bar{C}_3 (\mathbf{I} - \mathbf{N}) \otimes (\mathbf{I} - \mathbf{N}) \\ &= \bar{C}_4 [\mathbf{N} \otimes (\mathbf{I} - \mathbf{N}) + (\mathbf{I} - \mathbf{N}) \otimes \mathbf{N}] + \bar{C}_5 \mathbf{N} \otimes \mathbf{N} \end{aligned} \quad (3.18)$$

avec

$$\overline{C}_1 = 2 \langle \mu \rangle, \quad \overline{C}_2 = \frac{2}{\langle \mu^{-1} \rangle} \quad (3.19)$$

$$\overline{C}_3 = 2 \langle \mu \eta \rangle + \frac{2 \langle \eta \rangle^2}{\langle \mu^{-1} \rangle - \langle \mu^{-1} \eta \rangle} \quad (3.20)$$

$$\overline{C}_4 = \frac{2 \langle \eta \rangle}{\langle \mu^{-1} \rangle - \langle \mu^{-1} \eta \rangle} \quad (3.21)$$

et

$$\overline{C}_5 = \frac{2 \langle \mu^{-1} \eta \rangle}{\langle \mu^{-1} \rangle (\langle \mu^{-1} \rangle - \langle \mu^{-1} \eta \rangle)}. \quad (3.22)$$

On obtient également le tenseur de localisation pour les contraintes :

$$\mathbb{B} = \mathbb{P}^\perp + \beta_1 \mathbb{P} + \beta_2 (\mathbf{I} - \mathbf{N}) \otimes (\mathbf{I} - \mathbf{N}) + \beta_3 (\mathbf{I} - \mathbf{N}) \otimes \mathbf{N} \quad (3.23)$$

avec

$$\beta_1 = \frac{\mu}{\langle \mu \rangle}, \quad \beta_2 = \frac{\mu \eta \langle \mu \rangle - \langle \mu \eta \rangle \mu}{\langle \mu \rangle (\langle \mu \rangle + 2 \langle \mu \eta \rangle)} \quad (3.24)$$

et

$$\beta_3 = \frac{\langle \mu \rangle (\eta - \langle \eta \rangle) + 2 \eta (\langle \mu \eta \rangle - \langle \mu \rangle \langle \eta \rangle)}{\langle \mu \rangle + 2 \langle \mu \eta \rangle}. \quad (3.25)$$

Le tenseur des contrainte résiduelles est calculé par :

$$\begin{aligned} \sigma_r = \frac{2\mu}{\langle \mu \rangle} \langle \mu \mathbb{P} \mathbf{E}_p \rangle - 2\mu \mathbb{P} \mathbf{E}_p + 2\mu \left[\frac{(\langle \mu \rangle \eta - \langle \mu \eta \rangle) \langle \mu tr(\mathbb{P} \mathbf{E}_p) \rangle}{\langle \mu \rangle (\langle \mu \rangle + 2 \langle \mu \eta \rangle)} \right. \\ \left. + \frac{(1 + 2\eta) \langle \mu \eta tr(\mathbb{P} \mathbf{E}_p) \rangle}{\langle \mu \rangle + 2 \langle \mu \eta \rangle} - \eta tr(\mathbb{P} \mathbf{E}_p) \right] (\mathbf{I} - \mathbf{N}). \end{aligned} \quad (3.26)$$

Le critère de von Mises peut alors être ré-écrit sous la forme :

$$\overline{f}(\mathbf{x}, \overline{\boldsymbol{\sigma}}, \boldsymbol{\varepsilon}^p) = \sqrt{\overline{\boldsymbol{\sigma}} : \hat{\mathbb{H}} : \overline{\boldsymbol{\sigma}} + 2 \overline{\boldsymbol{\sigma}}'_r : \mathbb{B} : \overline{\boldsymbol{\sigma}} + \overline{\boldsymbol{\sigma}}'_r : \overline{\boldsymbol{\sigma}}'_r} - \sqrt{\frac{2}{3}} y_0(\mathbf{x}) \leq 0 \quad (3.27)$$

avec

$$\begin{aligned} \hat{\mathbb{H}} = \mathbb{B}^T \mathbb{H} \mathbb{B} = \mathbb{P}^\perp + \beta_1^2 \mathbb{P} - \frac{1}{3} (\beta_1^2 - 2\beta_2^2 - 2\beta_1 \beta_2) (\mathbf{I} - \mathbf{N}) \otimes (\mathbf{I} - \mathbf{N}) \\ - \frac{1}{3} (\beta_1 + 2\beta_2 - \beta_1 \beta_3 - 2\beta_2 \beta_3) [\mathbf{N} \otimes (\mathbf{I} - \mathbf{N}) + (\mathbf{I} - \mathbf{N}) \otimes \mathbf{N}] \\ - \frac{1}{3} (1 + 4\beta_2 - 4\beta_2^2 - 6\beta_3^2) \mathbf{N} \otimes \mathbf{N} \end{aligned} \quad (3.28)$$

et $S'_r = \mathbb{H} S_r$. Le domaine macroscopique elastique est alors donné par :

$$\overline{\kappa}(\varepsilon_p) = \{ \overline{\boldsymbol{\sigma}} | \overline{f}(\mathbf{x}, \overline{\boldsymbol{\sigma}}, \varepsilon_p) \leq 0 \quad \forall \mathbf{x} \in \overline{\Omega} \} \quad (3.29)$$

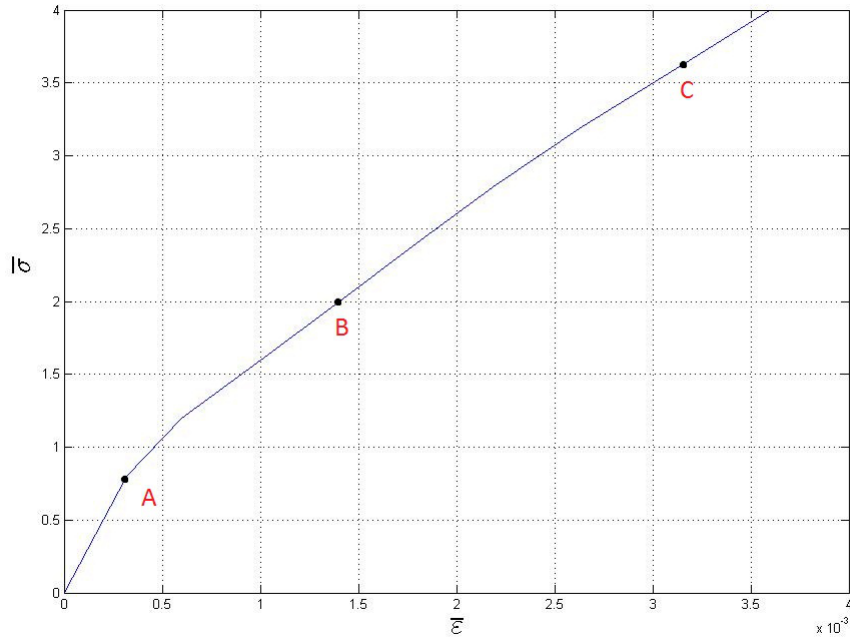


FIGURE 3.2 – Réponse du composite stratifié élastoplastique : les trois états A, B et C correspondent respectivement à un état où les deux phases sont élastiques, un état où l’une des phases est plastifiée, et un état où les deux phases sont plastifiées.

3.2.2 Résultats numériques

Nous testons ici la solution fournie par la méthodologie décrite dans le chapitre précédent. Pour cela, un VER associé à la microstructure stratifiée est considéré. Après un chargement représentatif appliqué sur le VER, les modes POD sont extraits par la technique décrite dans le paragraphe 2.2.3.2. Les paramètres des phases sont les suivants : $E_1 = 2000$ GPa, $E_2 = 4000$ GPa, et les limites élastiques sont choisies comme : $\sigma_y^1 = 1$ GPa et $\sigma_y^2 = 3$ GPa. La figure 3.2 fournit la réponse effective du composite associé, pour trois états caractéristiques décrits par les points A, B et C, correspondant respectivement à un état où les deux phases sont élastiques, un état où l’une des phases est plastifiée, et un état où les deux phases sont plastifiées. Nous avons représenté ici à la fois la solution analytique fournie ci-dessus, et le résultat d’un calcul numérique direct. Les états de déformation dans la direction normale aux couches sont fournies dans les figures 3.3, 3.4 et 3.5.

La courbe de réponse obtenue par la méthode d’homogénéisation présentée dans le chapitre précédent est comparée avec la solution analytique dans la figure 3.6. Nous constatons des différences entre les deux solutions pour de grandes valeurs de la déformation. Cette différence peut être expliquée par les conditions aux limites appliquées pour le cas de la solution analytique (contraintes effectives imposée sur les bords latéraux) et les conditions utilisées lors de la simulation numérique (déformation macroscopique uniforme sur tous les bords). Cependant, la contrainte limite est bien capturée par le modèle homogénéisé.

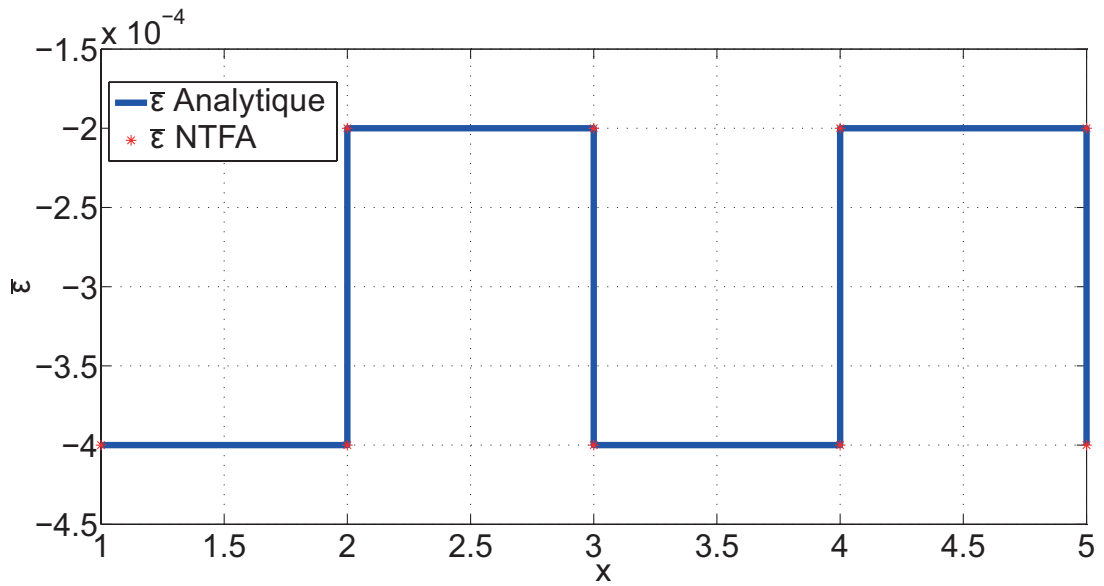


FIGURE 3.3 – Etat de déformation dans le composite stratifié pour l'état correspondant au point A (les deux phases sont élastiques).

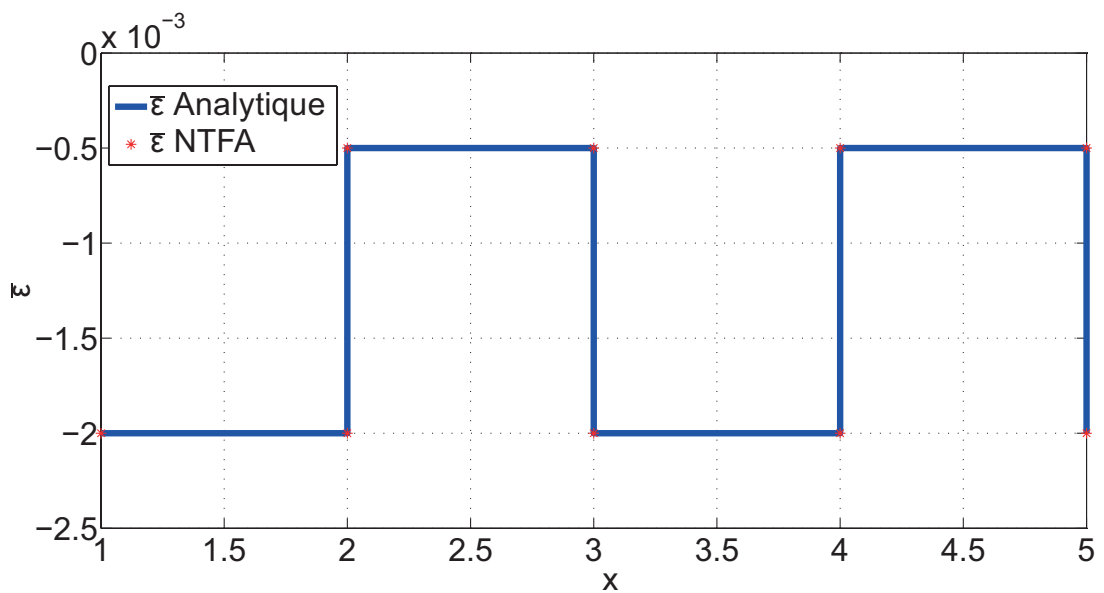


FIGURE 3.4 – Etat de déformation dans le composite stratifié pour l'état correspondant au point B (l'une des phases est plastifiée).

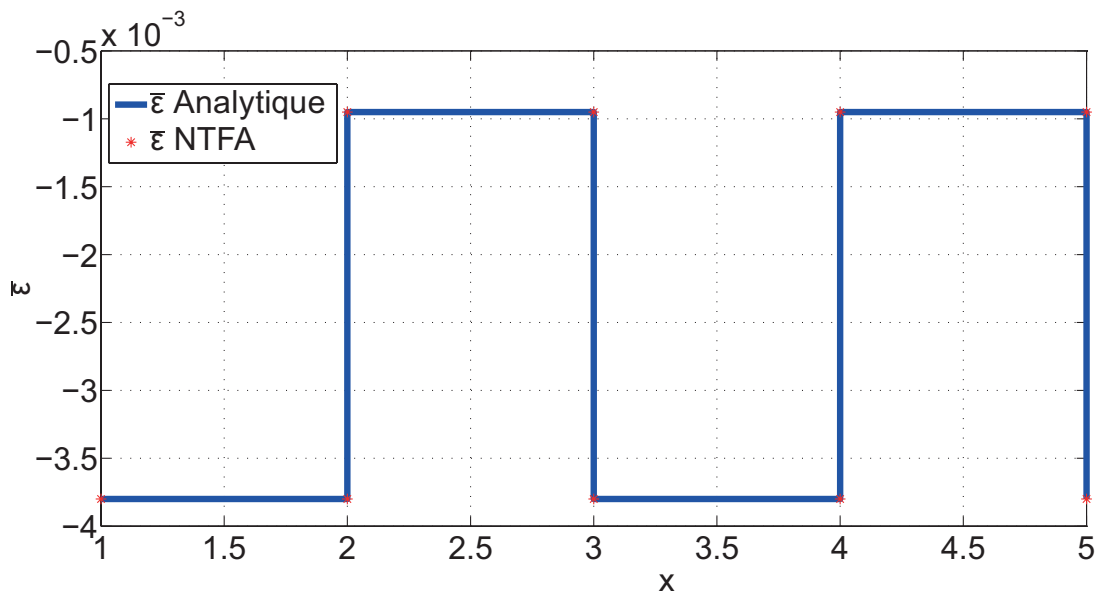


FIGURE 3.5 – Etat de déformation dans le composite stratifié pour l'état correspondant au point C (les deux phases sont plastifiée).

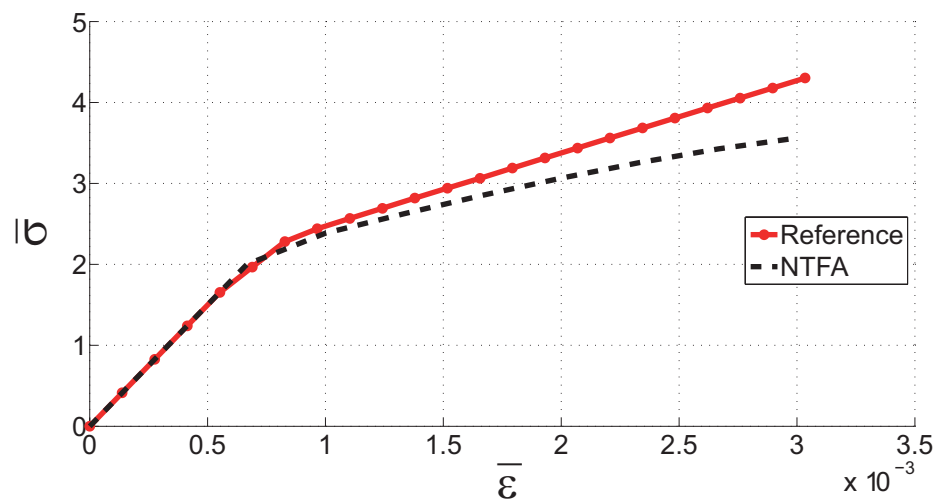


FIGURE 3.6 – Comparaison NTFA/solution de référence.

3.3 Composites avec hétérogénéités périodiques

Dans cette série d'exemples, nous considérons plusieurs microstructures, décrites dans les figures 3.7, 3.14 et 3.18 et pour lesquels le modèle éléments finis associé est également représenté. Pour chacun de ces cas, que nous décrivons séparément par la suite, nous appliquons la démarche décrite dans le chapitre 2 :

1. (Etape préliminaire) Nous effectuons des trajets de chargement et calculons les modes plastiques par POD, comme décrit dans le paragraphe 2.2.3.2.
2. (Etape préliminaire) nous calculons les différents opérateurs énumérés dans la section 2.3.3.
3. (Etape préliminaire) Nous calculons des valeurs discrètes de la fonction $\bar{f}$ et calculons les fonctions associées à sa représentation en variables séparées comme décrit dans le paragraphe 2.3.4.
4. Nous appliquons ensuite un chargement cyclique, et calculons la réponse homogénéisée par l'algorithme décrit dans le paragraphe 2.3.1.

Pour les différents cas, les propriétés suivantes sont choisies pour les phases. La matrice possède une limite élastique inférieure à celle des inclusions. Pour le cas du matériau poreux, les propriétés sont celles de la matrice.

Phase	Module de Young	Limite élastique	Coeff. de Poisson
Inclusion	$E_{inc} = 4000N/m^2$	$\sigma_{yinc} = 2000N/m^2$	$\nu_{inc} = 0,3$
Matrice	$E_{mat} = 2000N/m^2$	$\sigma_{ymat} = 1300N/m^2$	$\nu_{mat} = 0,3$

Pour tous les exemples suivants de ce chapitre, on fera l'hypothèse des petites perturbations en déformations planes.

3.3.1 Composite avec inclusions rigides

Nous considérons le composite décrit par le VER de la figure 3.7. Les inclusions sont circulaires, disposées sur un réseau hexagonal et la fraction volumique d'inclusions est de $f = 0.21$.

Pour ce premier cas, le champ de déformations macroscopiques imposé pour calculer les modes POD et pour évaluer la réponse homogénéisée est décrit dans la figure 3.8. Dans ces premiers exemples, ces chargements sont identiques. Nous testerons la méthode pour des chargements différents dans l'exemple décrit dans le paragraphe 3.3.3.

Les champs plastiques extraits par la méthode POD sont représentés dans la figure 3.9.

La courbe de convergence des valeurs propres associées à chaque mode est décrite dans la figure 3.10. On peut constater que les valeurs propres décroissent rapidement, indiquant qu'un nombre faible de modes est suffisant pour représenter la solution du champ de déformations plastique. Une erreur de $\delta \simeq \lambda_i/\lambda_{max} = 10^{-6}$ peut être atteinte pour seulement 6 modes.

Nous appliquons ensuite le chargement macroscopique décrit dans la figure 3.8 et utilisons l'algorithme décrit dans le paragraphe 2.3.1 pour calculer les contraintes macroscopiques correspondantes. Nous utilisons dans un premier temps la méthode décrite dans le paragraphe 2.3.4.1 pour évaluer la fonction $\bar{f}$. Les

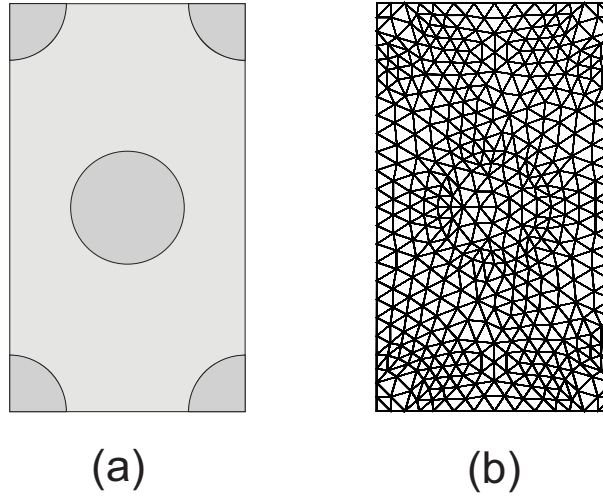


FIGURE 3.7 – Volume élémentaire, microstructure périodique avec inclusions rigides.

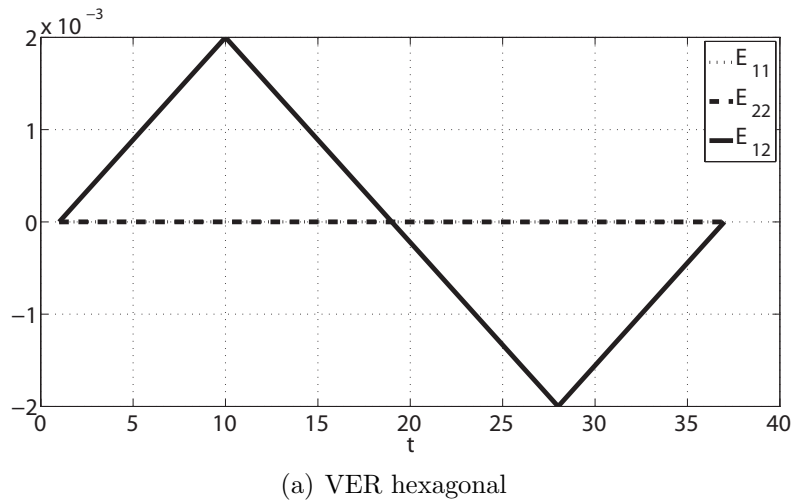
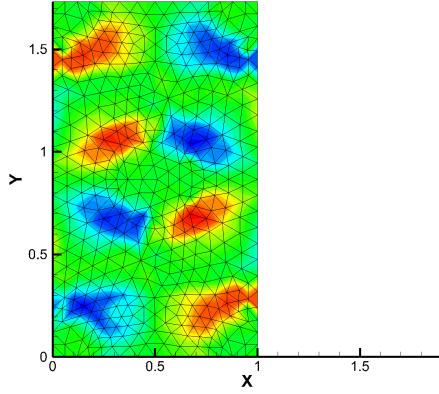
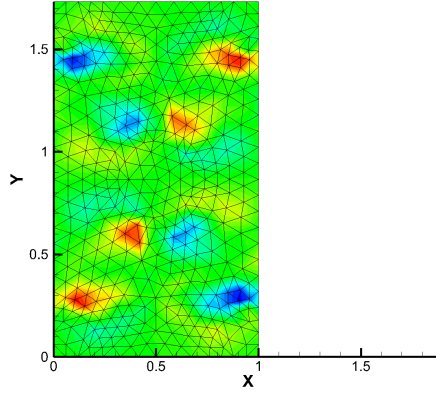


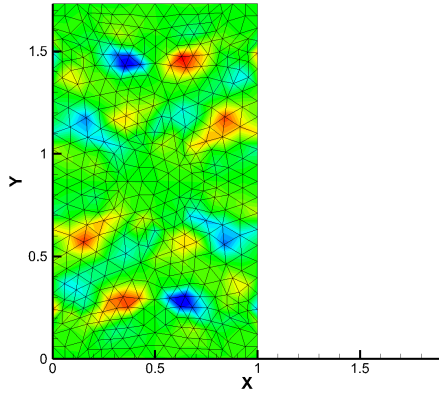
FIGURE 3.8 – Chargement de déformations macroscopiques imposées au cours du calcul.



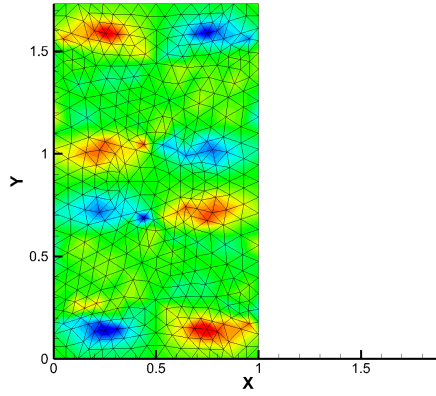
$$\lambda/\lambda_{max} = 1$$



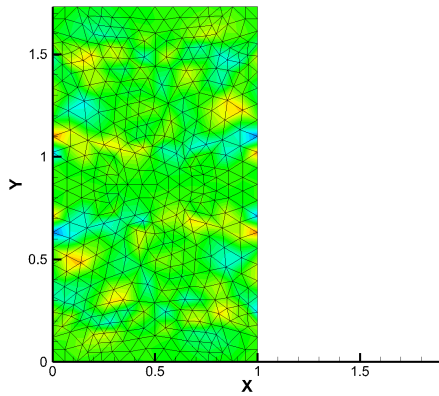
$$\lambda/\lambda_{max} = 1.76.10^{-3}$$



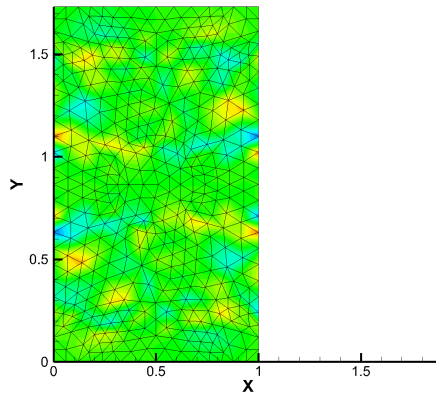
$$\lambda/\lambda_{max} = 2.06.10^{-4}$$



$$\lambda/\lambda_{max} = 6.63.10^{-5}$$



$$\lambda/\lambda_{max} = 4.07.10^{-5}$$



$$\lambda/\lambda_{max} = 9.15.10^{-6}$$

FIGURE 3.9 – Champs de déformations pastiques représentatifs extraits par POD pour le composite avec inclusions rigides.

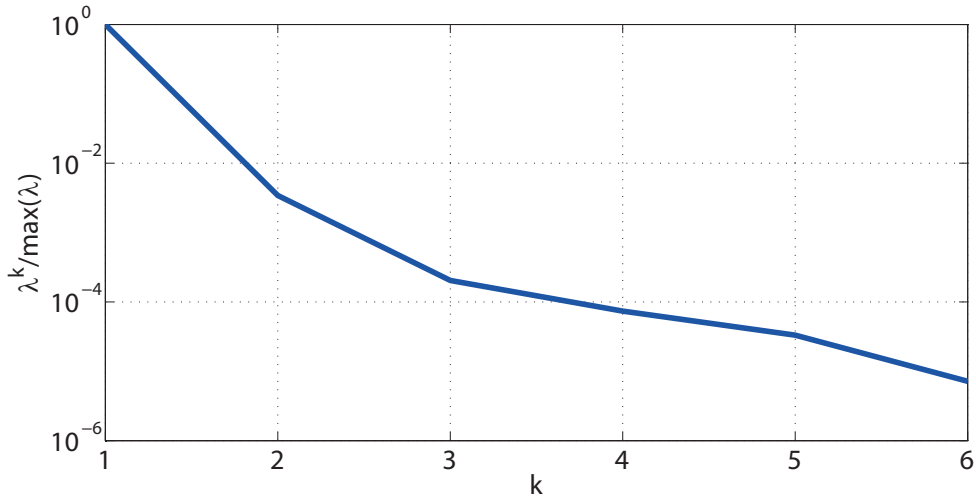


FIGURE 3.10 – Valeurs propres associées aux modes de déformations plastiques pour le composite 1.

résultats, présentés dans la figure 3.11, ne sont pas satisfaisants. Bien que l’algorithme de Newton-Raphson converge en quelques itérations, la solution se dégrade lorsque le nombre de modes augmente par rapport à la courbe de référence.

Nous appliquons ensuite la méthode décrite dans le paragraphe 2.3.4.2 pour l’évaluation de $\bar{f}$, en utilisant la représentation en variables séparées. Les résultats, présentés dans la figure 3.12 montrent dans ce cas un bon accord avec la solution de référence et une convergence avec le nombre de modes, même si des écarts existent. Pour des raisons de temps, il n’a pas été possible de déterminer les causes de la divergence de la solution dans le premier cas. Une analyse complémentaire sera nécessaire pour mieux comprendre ce phénomène.

La méthode permet de décrire le domaine plastique macroscopique comme le niveau zéro de (2.91), en utilisant les relations (2.39), (2.39) et (2.42), connaissant les valeurs des variables internes α_k associées à un état admissible des contraintes, par l’utilisation de l’algorithme de prédiction-correction présenté dans le chapitre précédent. Nous représentons quelques évolutions du domaine macroscopique pour cet exemple au cours du chargement dans la figure 3.13.

3.3.2 Composite anisotrope

Nous considérons à présent le composite anisotrope décrit dans la figure 3.14.

Les inclusions sont ici ellipsoïdales, avec des valeurs de demi-axes de $a = 0.3$, $b = 0.1$, pour une longueur de VER carré $L = 1$ mm. Les propriétés sont celles de l’exemple précédent. Le chargement macroscopique utilisé à la fois pour le calcul des modes POD et de la réponse macroscopique, est identique au cas précédent. Les modes POD obtenus sont décrits dans la figure 3.15, et la courbe de convergence associée dans la figure 3.16.

Nous avons constaté le même type de divergence encore ici lorsque la méthode directe décrite dans le paragraphe 2.3.4.1 est utilisée pour évaluer $\bar{f}$ dans le calcul macroscopique. Nous présentons les résultats en utilisant la deuxième méthode (paragraphe 2.3.4.2), dans la figure 3.17.

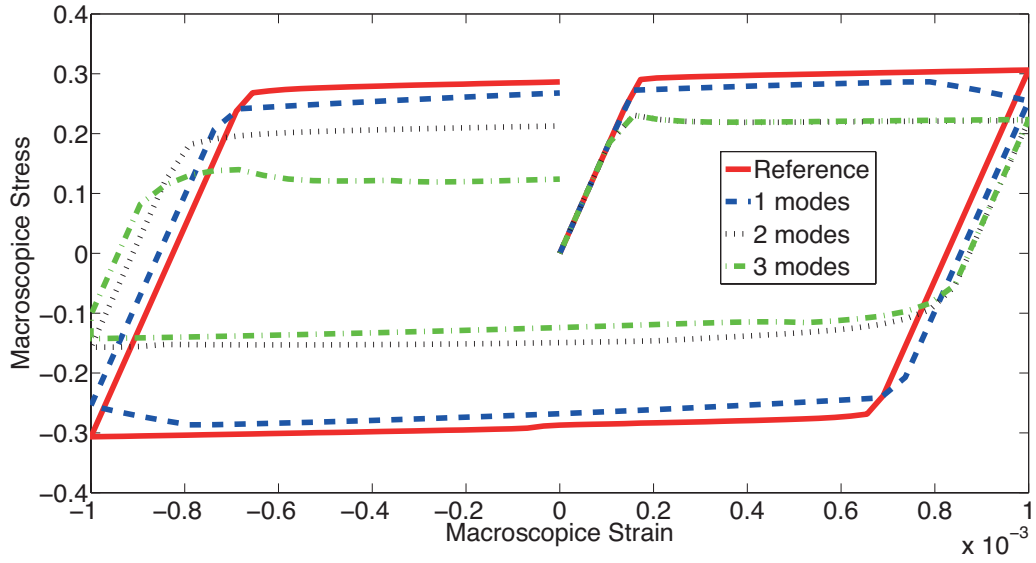


FIGURE 3.11 – Réponse (contrainte effective) du composite pour un chargement cyclique, comparaison entre un calcul direct (référence) et la réponse donnée par l’algorithme de return-mapping proposé, pour une évaluation directe de $\bar{f}$ (paragraphe 2.3.4.1). On constate une divergence de la solution avec le nombre de modes.

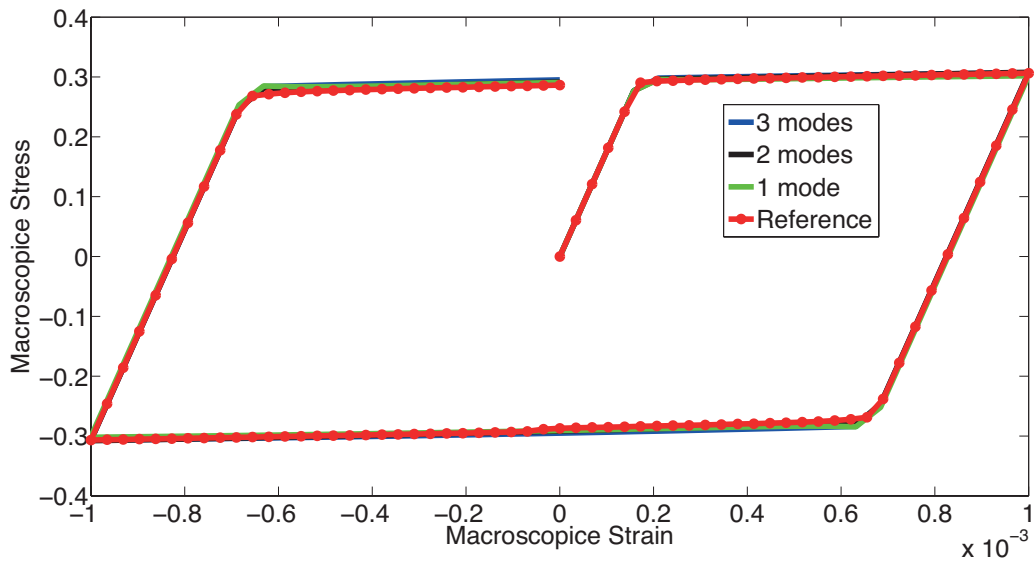


FIGURE 3.12 – Réponse (contrainte effective) du composite pour un chargement cyclique, comparaison entre un calcul direct (référence) et la réponse donnée par l’algorithme de return-mapping proposé, pour une évaluation de $\bar{f}$ en variables séparées.

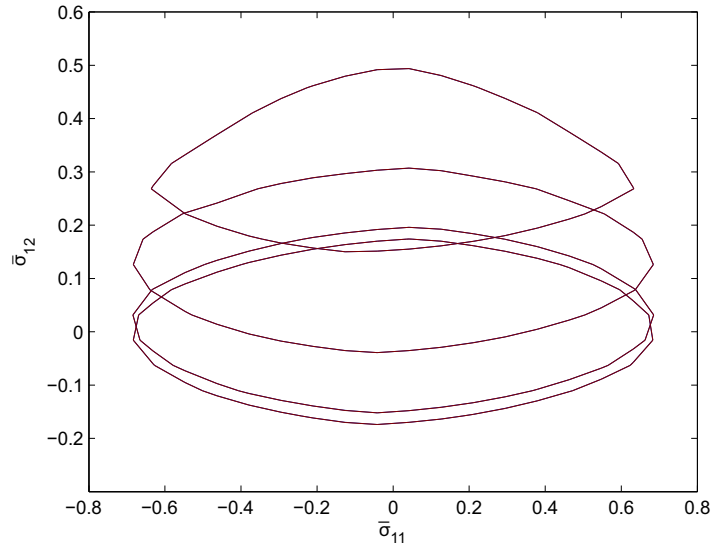


FIGURE 3.13 – Evolution du domaine élastique macroscopique $\bar{\kappa}$ au cours du chargement pour le composite à inclusions rigides.

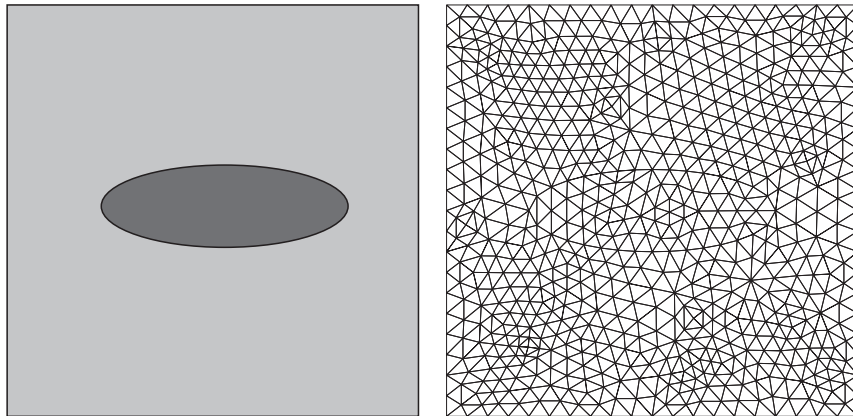


FIGURE 3.14 – Volume élémentaire représentatif associé au composite anisotrope : (a) géométrie; (b) maillage.

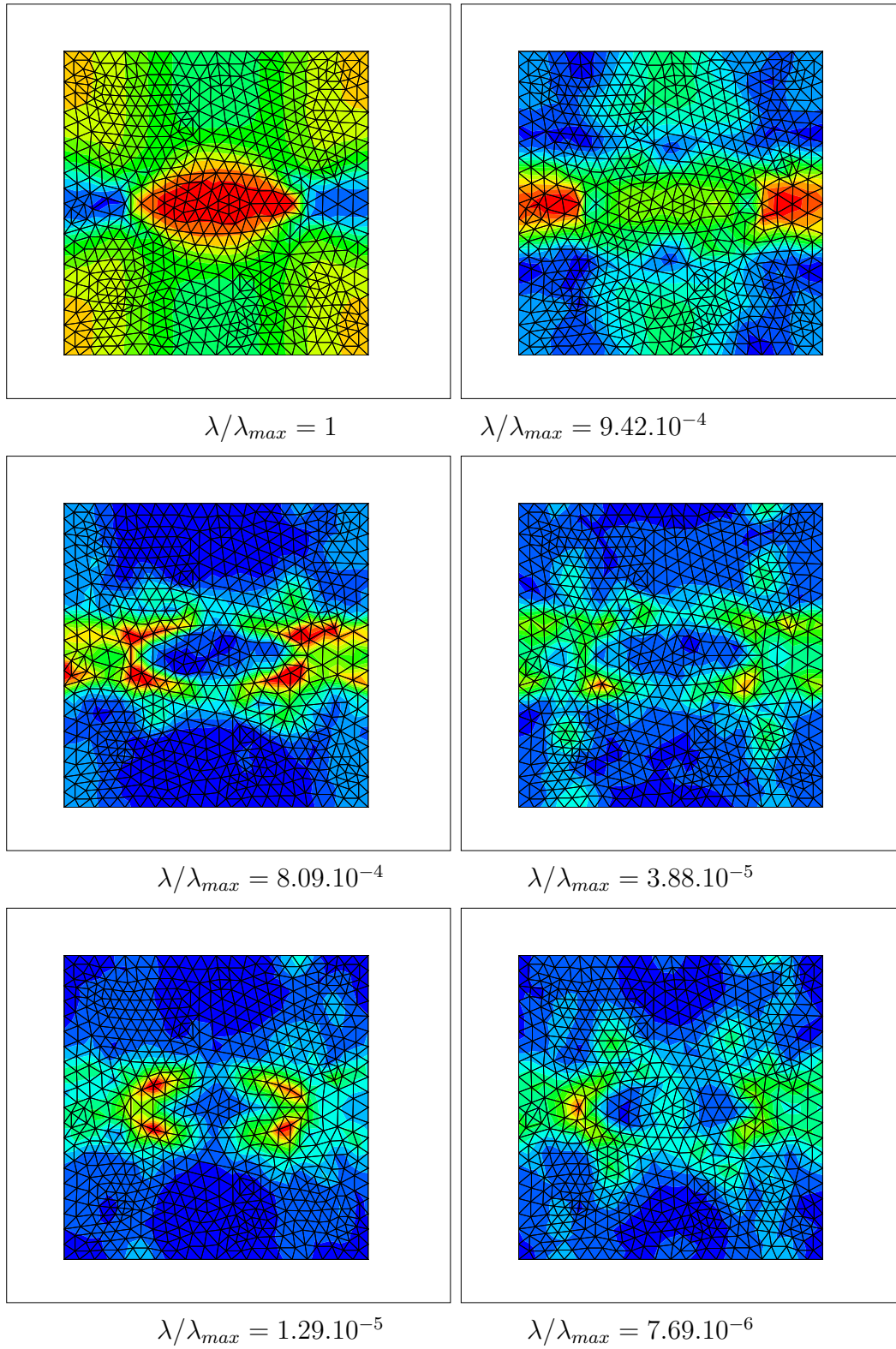


FIGURE 3.15 – Champs de déformations plastiques représentatifs extraits par POD pour le composite anisotrope.

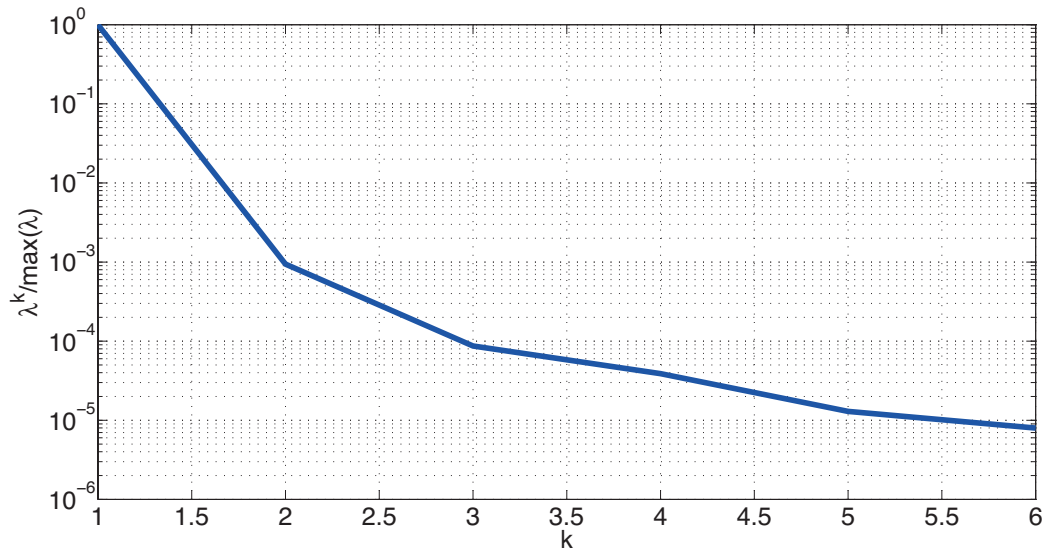


FIGURE 3.16 – Convergence des valeurs propres pour les champs de déformation plastiques POD pour le composite anisotrope.

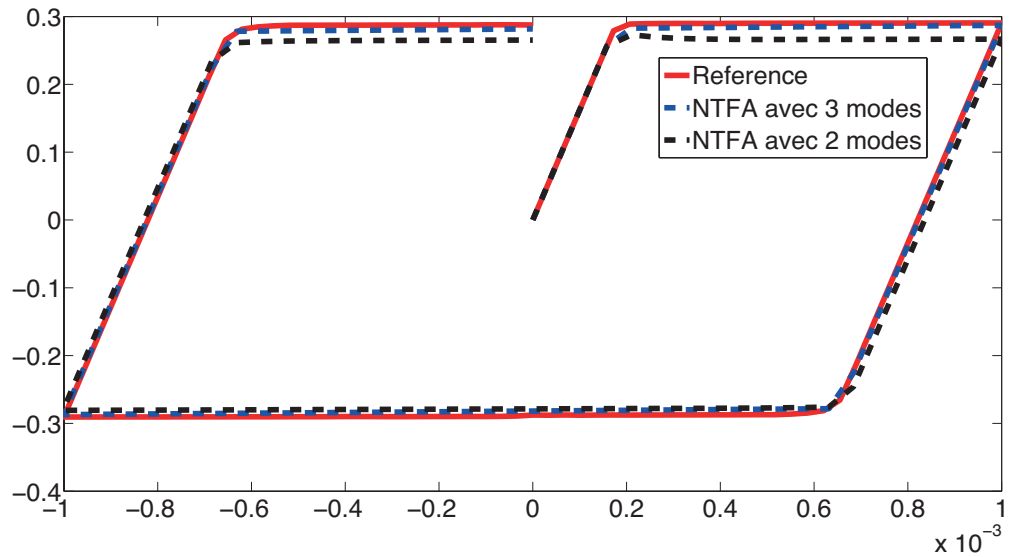


FIGURE 3.17 – Réponse (contrainte effective) du composite anisotrope pour un chargement cyclique, comparaison entre un calcul direct (référence) et la réponse donnée par l'algorithme de return-mapping proposé, pour une évaluation de $\bar{f}$ en variables séparées.

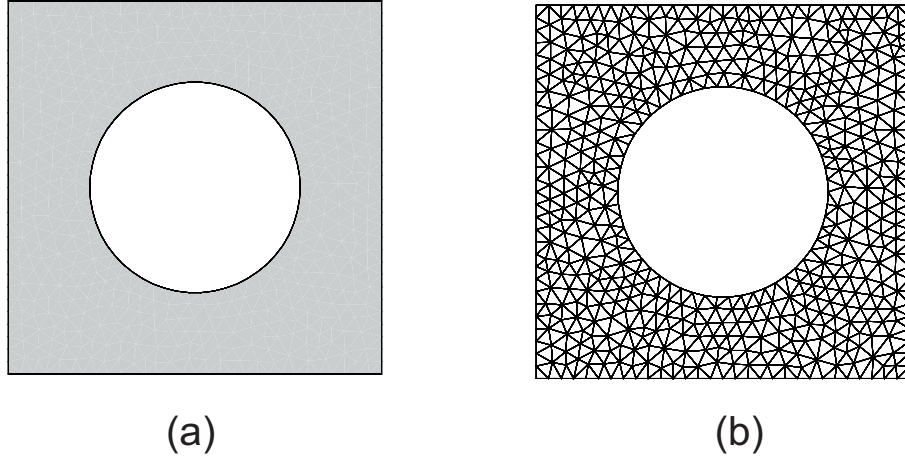


FIGURE 3.18 – Volume élémentaire représentatif associé au milieu poreux : (a) géométrie ; (b) maillage.

Nous constatons encore ici un assez bon accord entre la solution de référence et le calcul des contraintes obtenues par application de l'algorithme proposé. A noter que cet exemple représente un cas difficile pour les méthodes analytiques ou semi-analytiques, ou des schémas associés à des comportements effectifs sont généralement utilisés.

3.3.3 Milieu poreux à matrice élastoplastique

Dans ce nouvel exemple, nous étudions un milieu poreux dont la matrice est élastoplastique parfaite, et dont la microstructure est décrite dans la figure 3.18. Les pores sont de forme cylindrique et de fraction volumique $f = 0.25$. Les propriétés de la matrice sont celles de la matrice du composite 1.

Dans un premier temps, nous appliquons le même chargement macroscopique pour le calcul des modes POD et de la réponse macroscopique que précédemment. Les modes POD obtenus sont décrits dans la figure 3.19.

La courbe de convergence des modes est décrite dans la figure 3.20.

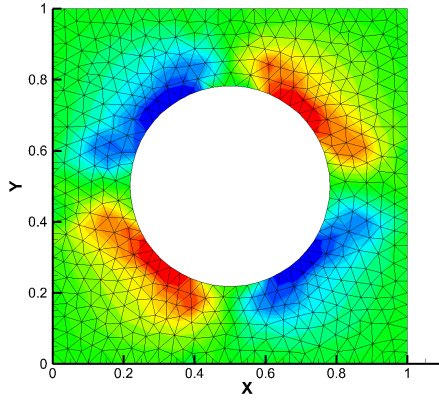
Les résultats du calcul macroscopique obtenus en appliquant l'algorithme décrit dans le paragraphe 2.3.1 avec une évaluation de $\bar{f}$ en variables séparées sont donnés dans la figure 3.21.

Ici encore, un bon accord avec la solution est observé. Une illustration de l'évolution du domaine élastique macroscopique est présentée dans la figure 3.22 pour ce cas.

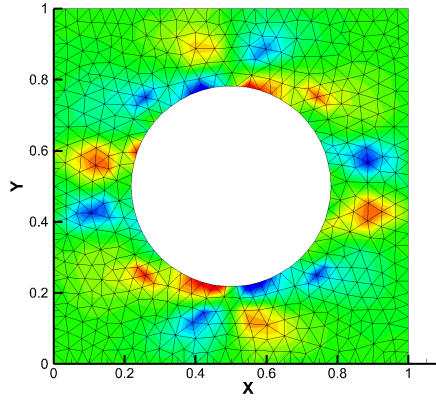
Nous appliquons ensuite un chargement plus complexe, combinant alternativement traction et cisaillement. Pour ce cas, deux chargements, l'un en traction et l'autre en cisaillement, sont appliqués au préalable pour le calcul des modes POD. Le chargement en déformations macroscopiques décrit dans la figure 3.23 est ensuite appliqué pour le calcul de réponse macroscopique. Trois modes sont utilisés pour la simulation.

Les résultats sont présentés dans la figure 3.24.

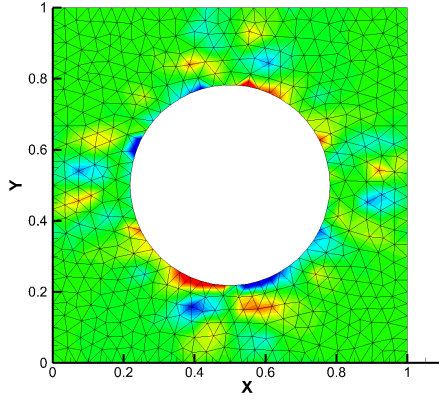
On peut constater pour ce trajet plus complexe qu'en début de simulation le modèle homogénéisé calculé est en bon accord avec la solution, mais qu'en fin de chargement, des différences apparaissent. Ces différences peuvent être liées au



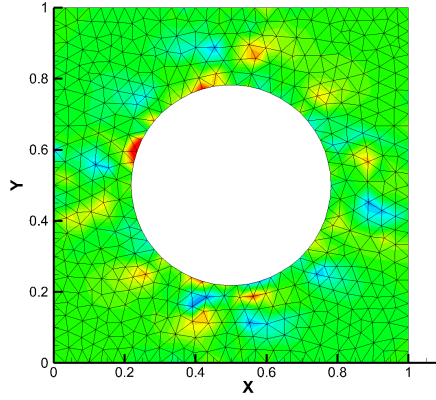
$$\lambda/\lambda_{max} = 1$$



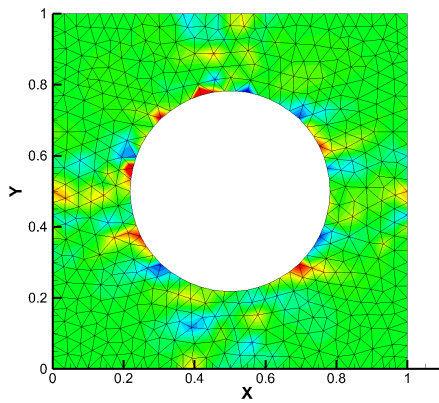
$$\lambda/\lambda_{max} = 8.95 \cdot 10^{-3}$$



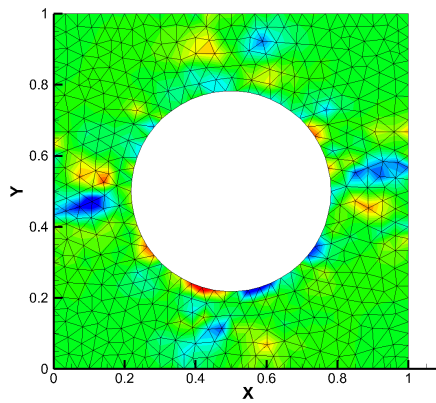
$$\lambda/\lambda_{max} = 4.45 \cdot 10^{-4}$$



$$\lambda/\lambda_{max} = 2.64 \cdot 10^{-4}$$



$$\lambda/\lambda_{max} = 8.85 \cdot 10^{-5}$$



$$\lambda/\lambda_{max} = 6.99 \cdot 10^{-5}$$

FIGURE 3.19 – Champs de déformations plastiques représentatifs extraits par POD pour le matériau poreux.

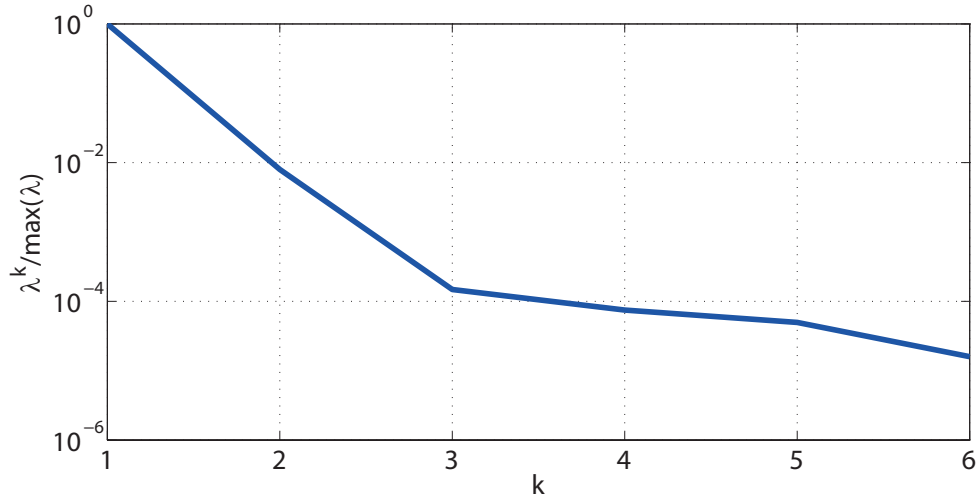


FIGURE 3.20 – Convergence des valeurs propres pour les champs de déformation plastiques POD pour le matériau poreux.

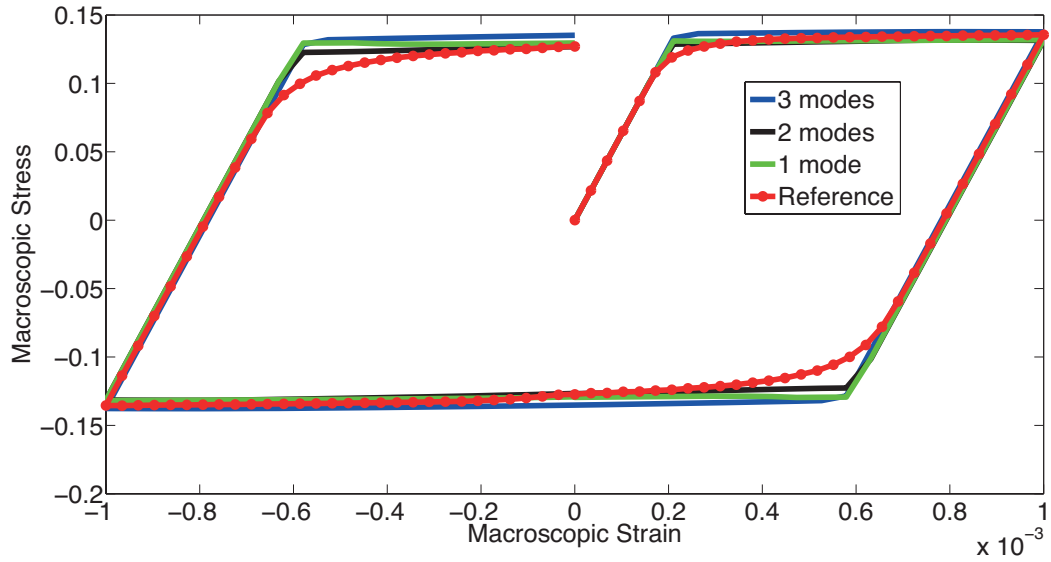


FIGURE 3.21 – Réponse (contrainte effective) du composite pour un chargement cyclique, comparaison entre un calcul direct (référence) et la réponse donnée par l'algorithme de return-mapping proposé, pour une évaluation de $\bar{f}$ en variables séparées pour le milieu poreux.

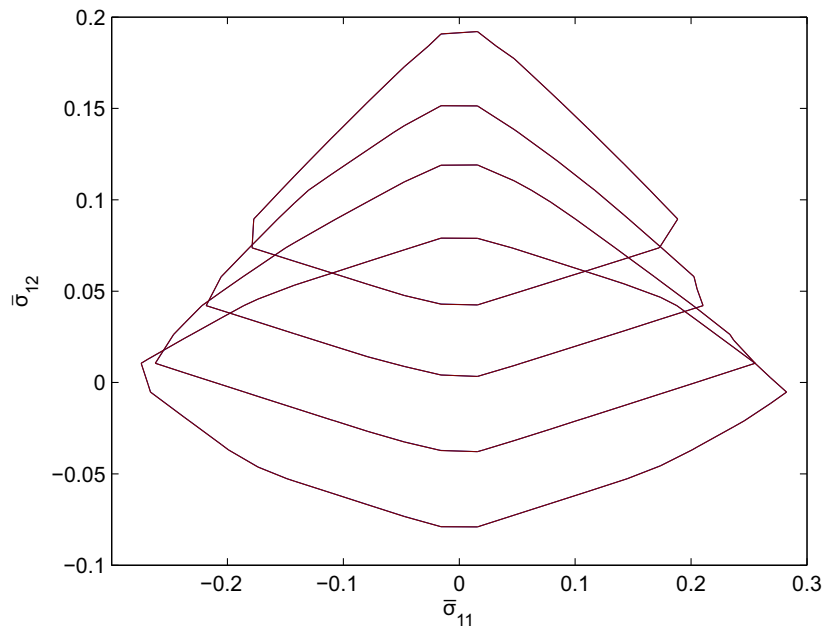


FIGURE 3.22 – Evolution du domaine élastique macroscopique $\bar{\kappa}$ pour le milieu poreux.

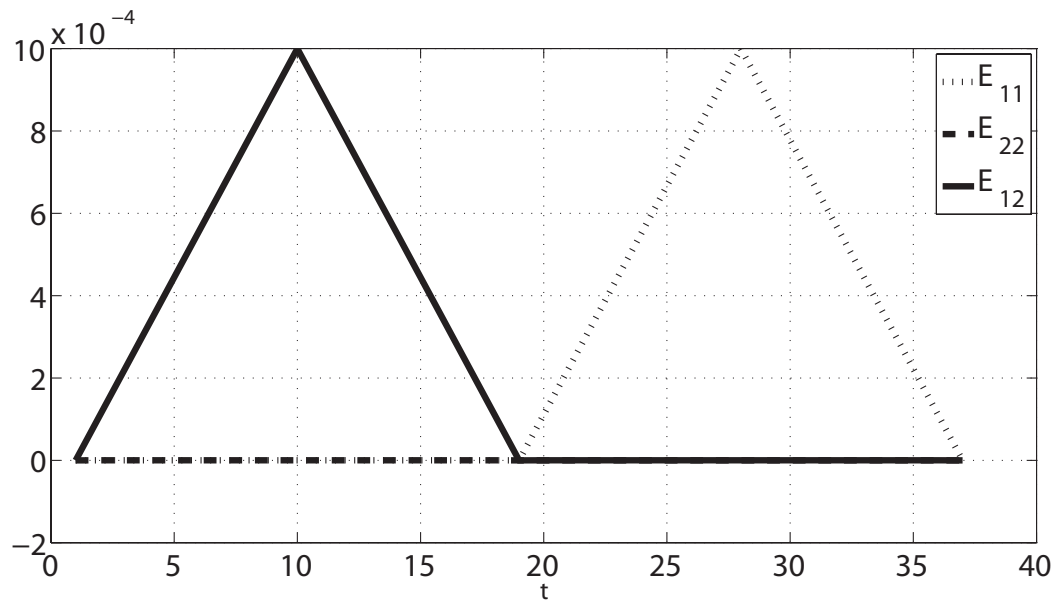


FIGURE 3.23 – Déformations macroscopiques imposées, trajet de chargement cyclique complexe.

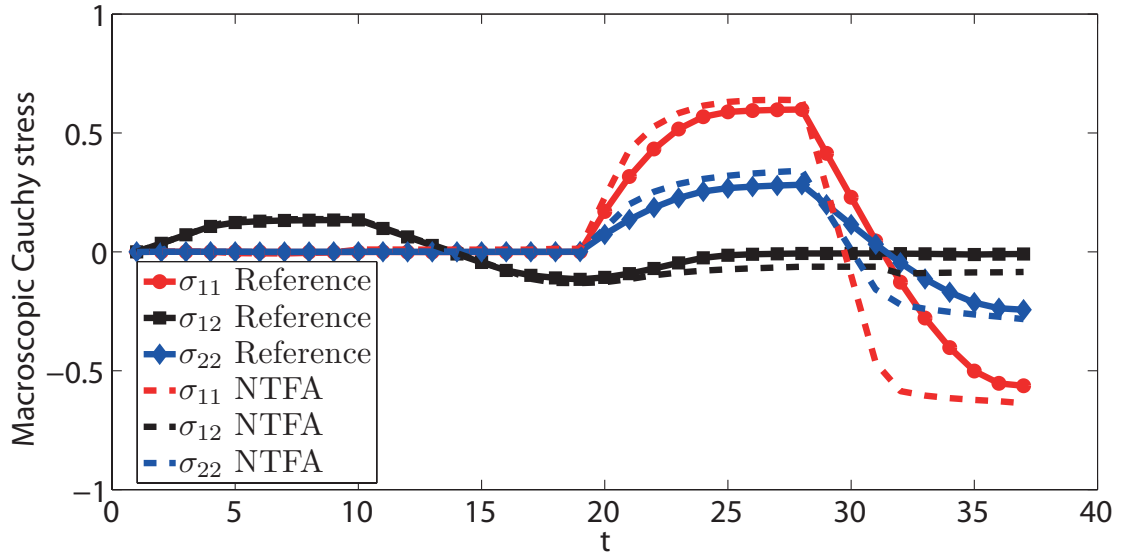


FIGURE 3.24 – Réponse (contrainte effective) du composite pour un chargement cyclique complexe (figure 3.23), comparaison entre un calcul direct (référence) et la réponse donnée par l’algorithme de return-mapping proposé pour le milieu poreux.

défaut des modes pré-calculés à reproduire les modes plastiques issus de l’histoire complexe du chargement.

3.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté des applications de la démarche d’homogénéisation numérique proposée pour les composites élastoplastiques. Nous avons dans un premier temps traité un composite stratifié, pour lequel une solution analytique existe. Dans un deuxième temps, nous avons traité des microstructures plus complexes périodiques bidimensionnelles, pour lesquelles une solution de référence a été déterminée par un calcul par éléments finis direct. Dans chaque cas, les solutions obtenues par l’algorithme proposé ont été comparées avec les solutions de références et la qualité de l’approximation obtenue discutée. Nous établissons les constats suivants :

1. Pour un pas de chargement en déformations macroscopiques, l’algorithme de Newton-Raphson proposé converge en quelques itérations ;
2. L’algorithme diverge pour une évaluation directe de $\bar{f}$ (voir paragraphe 2.3.4.1) en fonction du nombre de modes. Par contre, celui-ci donne des résultats satisfaisants pour une évaluation de $\bar{f}$ par interpolation dans une base de donnée (représentation séparée, voir paragraphe 2.3.4.2). Dans l’état actuel de ce travail, nous n’avons pas pu déterminer la raison de ces différences dans l’algorithme. Des études complémentaires seront nécessaires pour éclaircir ce point.

3. La seconde méthode pour l'évaluation de $\bar{f}$ est plus coûteuse lors des calculs préliminaires, car nécessite l'évaluation de celle-ci pour ce nombreuses valeurs des déformations macroscopiques et des variables internes macroscopiques. Cependant, lors du calcul macroscopique, les calculs sont énormément accélérés, car il n'est plus nécessaire de revenir au VER pour évaluer $\bar{f}$.
4. La méthode permet d'obtenir une estimation satisfaisante du comportement effectif pour les composites élastoplastiques avec des microstructures arbitraires, possiblement anisotropes, à un coût bien moindre que dans les méthodes de type FE². En effet, dans la méthode FE², un problème non linéaire doit être résolu en chaque point d'intégration du maillage de la structure, et toutes les variables internes associées aux éléments de tous les maillages microscopiques doivent être stockées, représentant des coûts en temps de calcul et en place mémoire énormes pour de grands maillages. Dans le cadre de la méthode proposée ici, seules les variables internes associées aux champs de déformation plastiques représentatifs (POD) doivent être stockées (de l'ordre de 2 ou 3 par éléments), et tous les opérateurs nécessaires pour l'évaluation du comportement macroscopique peuvent être calculés dans une phase préliminaire au calcul de structure. Bien que des études soient encore nécessaires pour déterminer la cause de certains problèmes de divergence des calculs mentionnés plus haut, la méthode semble donc prometteuse.

Chapitre 4

Homogénéisation des composites non linéaires élastiques en petites et grandes déformations dans des espaces paramétriques de grandes dimensions

4.1 Introduction

L'homogénéisation des matériaux non linéaires élastiques et hyperélastiques non linéaires est d'un intérêt majeur pour la modélisation des structures constituées de matériaux biologiques ou de polymères renforcés. Les lois non linéaires élastiques peuvent également permettre de modéliser des comportements élastoplastiques pour des chargements monotones sans décharge élastique (théorie de la déformation), ou viscoplastiques, si les déformations et les contraintes sont remplacées par leurs dérivées temporelles. Dans ce cas, la loi de comportement peut être entièrement définie par un potentiel unique, qui permet de simplifier les méthodes numériques pour l'homogénéisation des matériaux associés. Dans ce chapitre, les méthodes numériques d'homogénéisation proposées exploitent ce principe. Nous rappelons dans un premier temps les principes de la méthode des "potentiels numériques" [101, 103] dans laquelle le potentiel effectif associé au comportement effectif est représenté numériquement par une interpolation de valeurs discrètes, pré-calculées sur un VER. Nous montrons que cette technique possède ses limites pour des grilles d'échantillonnage régulièrement réparties dans l'espace paramétrique, pour des problèmes tridimensionnels ou des problèmes où d'autres paramètres tels que la fraction volumique ou des caractéristiques matérielles peuvent varier. Nous introduisons alors une nouvelle méthode d'interpolation basée sur des "réseaux de neurones" permettant de construire des modèles de potentiels pour des espaces paramétriques plus grands et en se basant sur des nuages de points distribués aléatoirement dans l'espace paramétrique, en nombre plus faible que pour des échantillonnages dans des grilles régulières. Nous introduisons la méthode numérique d'homogénéisation associée et analysons sa qualité au travers d'exemples sur des volumes élémentaires représentatifs en calcul de structures.

4.2 Homogénéisation des composites non linéaires élastiques

4.2.1 Homogénéisation des composites non linéaires élastiques en petites déformations

Nous considérons ici le problème d'homogénéisation des matériaux hétérogènes dont les phases possèdent un comportement non linéaire élastique, en petites déformations. Nous supposons que la microstructure est entièrement caractérisée par un volume élémentaire représentatif (VER) $\bar{\Omega}$ composé de N phases homogènes. Le sous-domaine $\bar{\Omega}$ est composé de phases $r \in \{1, 2, \dots, N\}$ associés à des sous-domaines notés $\bar{\Omega}_r$, décrits par une fonction caractéristique $\chi^{(r)}$ telle que $\chi^{(r)}(\mathbf{x}) = 1$ pour $\mathbf{x} \in \bar{\Omega}_r$ et $\chi^{(r)}(\mathbf{x}) = 0$ pour $\mathbf{x} \notin \bar{\Omega}_r$. Nous notons $\langle \cdot \rangle_r$ la moyenne sur $\bar{\Omega}_r$ et $\langle \cdot \rangle$ la moyenne sur $\bar{\Omega}$. La fraction volumique de la phase r est donnée par $c^{(r)} = \langle \chi^{(r)} \rangle$. Les interfaces sont supposées parfaites et notées collectivement Γ . Le bord de $\bar{\Omega}$ est désigné par $\partial\Omega$ et le domaine ouvert associé Ω . Soit une fonction de densité d'énergie donnée w associée au composite sous la forme

$$w(\mathbf{x}, \boldsymbol{\varepsilon}) = \sum_{r=1}^N \chi^{(r)}(\mathbf{x}) w^{(r)}(\boldsymbol{\varepsilon}), \quad (4.1)$$

où $w^{(r)}$ est la fonction de densité d'énergie de la phase r . Nous supposons par la suite que chaque fonction de densité d'énergie $w^{(r)}$ est convexe mais pas nécessairement quadratique par rapport à $\boldsymbol{\varepsilon}$. La loi de comportement locale du composite est donnée par

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{\partial w(\mathbf{x}, \boldsymbol{\varepsilon})}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}, \quad (4.2)$$

où $\boldsymbol{\sigma}$ est le tenseur des contraintes de Cauchy qui doit satisfaire les équations d'équilibre (2.3) en l'absence de forces de volume.

Les quantités macroscopiques (effectives) pour les déformations $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$ et les contraintes $\bar{\boldsymbol{\sigma}}$ sont définies comme leur moyenne volumique, Eqs. (2.1) et (2.2).

Les conditions aux limites considérées ici peuvent être de l'une des formes suivantes :

(a) conditions statiquement uniformes :

$$\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} = \bar{\boldsymbol{\sigma}} \mathbf{n} \quad \text{sur} \quad \partial\Omega \quad (4.3)$$

où $\mathbf{n}$ est le vecteur normal unitaire sortant par rapport à la surface $\partial\Omega$;

(b) conditions cinématiquement uniformes :

$$\mathbf{u} = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} \mathbf{x} \quad \text{sur} \quad \partial\Omega; \quad (4.4)$$

(c) conditions périodiques :

$$\mathbf{u} - \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} \mathbf{x} \text{ est périodique et } \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} \text{ est anti-périodique sur } \partial\Omega. \quad (4.5)$$

Les équations (2.3)-(4.2) associées à l'une des conditions aux limites (4.3)-(4.5) forment le problème aux limites non linéaire pour déterminer la relation

de comportement effective du composite. Le problème peut être mis sous une forme variationnelle. Par exemple, lorsque les conditions (4.4) sont imposées, la fonction de densité d'énergie effective $\bar{w}$ du composite est obtenue en résolvant le problème de minimisation :

$$\bar{w}(\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}) = \inf_{\mathbf{v} \in \mathcal{K}(\bar{\boldsymbol{\varepsilon}})} \langle w(\mathbf{x}, \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v})) \rangle \quad (4.6)$$

où $\mathcal{K}(\bar{\boldsymbol{\varepsilon}})$ est l'espace de tous les déplacements $\mathbf{v}$ définis sur Ω et vérifiant les conditions aux limites $\mathbf{u} = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}\mathbf{x}$ sur $\partial\Omega$. On peut montrer que $\bar{w}$ est une fonction convexe de $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$ si w est convexe par rapport à $\boldsymbol{\varepsilon}$ [74]. De plus, la loi de comportement effective est donnée par (voir par exemple [35]) :

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}} = \frac{\partial \bar{w}(\bar{\boldsymbol{\varepsilon}})}{\partial \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}}. \quad (4.7)$$

L'idée de base des méthodes numériques développées par la suite est de proposer une représentation numérique de $\bar{w}$ à partir de laquelle il sera possible d'évaluer la loi de comportement. Les formes faibles en vue de la résolution par éléments finis de ce problème sont classiques et fournies dans l'annexe A.1.1.1, ainsi que la discrétisation associée.

4.2.2 Homogénéisation des composites non linéaires élastiques en grandes déformations

4.2.2.1 Formulation du problème d'homogénéisation

Nous formulons ici le problème d'homogénéisation pour un composite en grandes déformations hyperélastiques. Soit un point matériel dont la position dans la configuration actuelle est notée $\mathbf{x}$ et $\mathbf{X}$ dans la configuration de référence. Ces quantités sont reliées par

$$\mathbf{x} = \mathbf{X} + \mathbf{u}, \quad (4.8)$$

où $\mathbf{u}$ est le vecteur déplacement. Le tenseur gradient de déformation $\mathbf{F}$ en $\mathbf{X}$ est défini par

$$\mathbf{F} = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{X}} = \mathbf{1} + \nabla_{\mathbf{X}}(\mathbf{u}), \quad (4.9)$$

où $\mathbf{1}$ est le tenseur identité du second ordre et $\nabla_{\mathbf{X}}(\cdot)$ est l'opérateur gradient par rapport à la configuration de référence. Le matériau est ici supposé composé de phases hyperélastiques occupant comme précédemment des sous-domaines $\Omega^{(r)}$. Le comportement des phases est caractérisé par une fonction densité d'énergie, ou potentiel élastique $\Psi^{(r)}$ dépendant du tenseur des déformations de Cauchy-Green droit $\mathbf{C} = \mathbf{F}^T \mathbf{F}$. Ainsi, la fonction de densité d'énergie locale du composite peut être exprimée par

$$\Psi(\mathbf{X}, \mathbf{C}) = \sum_{r=1}^N \chi^{(r)}(\mathbf{X}) \Psi^{(r)}(\mathbf{C}). \quad (4.10)$$

Les fonctions de densité d'énergie $\Psi^{(r)}(\mathbf{C})$ satisfont automatiquement le principe d'objectivité. L'impénétrabilité du matériau impose la condition $\Psi^{(r)} \rightarrow \infty$ lorsque $\det(\mathbf{C}) \rightarrow 0^+$. Dans une description Lagrangienne, la loi de comportement locale est donnée par

$$\mathbf{S} = 2 \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{C}}(\mathbf{X}, \mathbf{C}), \quad (4.11)$$

où $\mathbf{S}$ est le second tenseur des contraintes de Piola-Kirchhoff. Une régularité suffisante de Ψ par rapport à $\mathbf{C}$ est supposée. D'autres quantités utiles peuvent être définies :

$$J = \det(\mathbf{F}), \quad \mathbf{P} = \mathbf{F}\mathbf{S}, \quad \boldsymbol{\sigma} = \frac{1}{J} \mathbf{P}\mathbf{F}^T, \quad (4.12)$$

où J est le Jacobien et $\mathbf{P}$ le premier tenseur des contraintes de Piola-Kirchhoff. Le tenseur élastique tangent du quatrième ordre est défini par :

$$\mathbb{L} = 4 \frac{\partial^2 \Psi(\mathbf{X}, \mathbf{C})}{\partial \mathbf{C} \partial \mathbf{C}}. \quad (4.13)$$

A l'échelle macroscopique, les quantités cinématiques sont définies comme suit :

$$\bar{\mathbf{F}} = \langle \mathbf{F} \rangle, \quad \bar{J} = \det(\bar{\mathbf{F}}) \neq \langle J \rangle, \quad (4.14)$$

$$\bar{\mathbf{C}} = (\bar{\mathbf{F}})^T \bar{\mathbf{F}} \neq \langle \mathbf{C} \rangle, \quad \bar{\mathbf{E}} = \frac{1}{2} (\bar{\mathbf{C}} - \mathbf{1}) \neq \langle \mathbf{E} \rangle. \quad (4.15)$$

Une extension du Lemme de Hill-Mandel en grandes déformations postule que si le VER est soumis à des conditions aux limites cinématiquement uniformes ou périodiques (4.27), alors

$$\langle \mathbf{P} : \mathbf{F} \rangle = \langle \mathbf{P} \rangle : \langle \mathbf{F} \rangle. \quad (4.16)$$

Une conséquence du Lemme de Hill est que le premier tenseur des contraintes de Piola-Kirchhoff peut être défini par :

$$\bar{\mathbf{P}} = \langle \mathbf{P} \rangle = \frac{\partial \bar{\Psi}^*(\bar{\mathbf{F}})}{\partial \bar{\mathbf{F}}}, \quad (4.17)$$

où $\bar{\Psi}^*(\bar{\mathbf{F}})$ définit la fonction de densité d'énergie (ou potentiel) associée avec le matériau homogène équivalent, déterminé par

$$\bar{\Psi}^*(\bar{\mathbf{F}}) = \inf_{\mathbf{F} \in \mathcal{K}^*(\bar{\mathbf{F}})} \langle \Psi^*(\mathbf{X}, \mathbf{F}) \rangle = \inf_{\mathbf{F} \in \mathcal{K}^*(\bar{\mathbf{F}})} \sum_{r=1}^N c^{(r)} \langle \Psi^{*(r)}(\mathbf{F}) \rangle^{(r)}, \quad (4.18)$$

où $\mathcal{K}^*$ est l'ensemble des tenseurs des déformations compatibles. On peut montrer que $\bar{\Psi}^*$ est objective. De plus, $\bar{\Psi}(\bar{\mathbf{C}}) = \bar{\Psi}^*(\bar{\mathbf{F}})$. On peut noter que seuls $\bar{\mathbf{F}}$ et $\bar{\mathbf{P}}$ peuvent être définis comme leur contrepartie microscopique. De plus nous avons les relations suivantes :

$$\bar{\mathbf{S}} = \bar{\mathbf{F}}^{-1} \bar{\mathbf{P}} \neq \langle \mathbf{S} \rangle, \quad \bar{\boldsymbol{\sigma}} = \frac{1}{J} \bar{\mathbf{P}} \bar{\mathbf{F}}^T \neq \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle. \quad (4.19)$$

Une relation similaire à (4.17) peut être établie pour relier $\bar{\mathbf{S}}$ et $\bar{\mathbf{C}}$. En utilisant (4.17), nous avons

$$\bar{P}_{ij} = \frac{\partial \bar{\Psi}^*(\bar{\mathbf{F}})}{\partial \bar{F}_{ij}} = \frac{\partial \bar{\Psi}^*(\bar{\mathbf{F}})}{\partial \bar{C}_{kl}} \frac{\partial \bar{C}_{kl}}{\partial \bar{F}_{ij}} = \frac{\partial \bar{\Psi}(\bar{\mathbf{C}})}{\partial \bar{C}_{kl}} \frac{\partial \bar{C}_{kl}}{\partial \bar{F}_{ij}} \quad (4.20)$$

et

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{C}_{kl}}{\partial \bar{F}_{ij}} &= \frac{\partial}{\partial \bar{F}_{ij}} (\bar{F}_{mk} \bar{F}_{ml}) = \frac{\partial \bar{F}_{mk}}{\partial \bar{F}_{ij}} \bar{F}_{ml} + \bar{F}_{mk} \frac{\partial \bar{F}_{ml}}{\partial \bar{F}_{ij}} \\ &= \delta_{mi} \delta_{kl} \bar{F}_{ml} + \bar{F}_{mk} \delta_{mi} \delta_{lj} = \bar{F}_{il} \delta_{kj} + \bar{F}_{ik} \delta_{lj}, \end{aligned} \quad (4.21)$$

ce qui conduit à

$$\bar{S}_{\alpha j} = \bar{F}_{\alpha i} \bar{P}_{ij} = \bar{F}_{\alpha i}^{-1} \frac{\partial \bar{\Psi}(\bar{\mathbf{C}})}{\partial \bar{C}_{kl}} (\bar{F}_{il} \delta_{kj} + \bar{F}_{ik} \delta_{lj}) = \frac{\partial \bar{\Psi}(\bar{\mathbf{C}})}{\partial \bar{C}_{kl}} (\delta_{\alpha l} \delta_{kj} + \delta_{\alpha k} \delta_{lj}). \quad (4.22)$$

Après quelques simplifications et en utilisant la symétrie de $\bar{\mathbf{C}}$ on obtient

$$\bar{\mathbf{S}} = 2 \frac{\partial \bar{\Psi}(\bar{\mathbf{C}})}{\partial \bar{\mathbf{C}}}. \quad (4.23)$$

Ainsi, la fonction de densité effective $\bar{\Psi}$ du composite peut être définie comme

$$\bar{\Psi}(\bar{\mathbf{C}}) = \inf_{\mathbf{C} \in \mathcal{K}(\bar{\mathbf{C}})} \langle \Psi(\mathbf{X}, \mathbf{C}) \rangle = \inf_{\mathbf{C} \in \mathcal{K}(\bar{\mathbf{C}})} \sum_{r=1}^N c^{(r)} \langle \Psi^{(r)}(\mathbf{C}) \rangle_r, \quad (4.24)$$

où $\mathcal{K}$ est l'ensemble des tenseurs des déformations admissibles pour $\bar{\mathbf{C}}$. En d'autres termes, pour un état de déformation macroscopique $\bar{\mathbf{C}}$, la valeur correspondante de $\bar{\Psi}(\bar{\mathbf{C}})$ est obtenue par moyenne des potentiels locaux $\Psi(\mathbf{X}, \mathbf{C})$, où $\mathbf{C}(\mathbf{X})$ est un champ de déformations admissible. De la même manière, le tenseur élastique tangent $\bar{\mathbb{L}}$ peut être exprimé par

$$\bar{\mathbb{L}} = 4 \frac{\partial^2 \bar{\Psi}(\bar{\mathbf{C}})}{\partial \bar{\mathbf{C}}^2}. \quad (4.25)$$

A l'échelle microscopique, les contraintes doivent vérifier les conditions d'équilibre local :

$$\nabla_X \cdot (\mathbf{F}\mathbf{S}) = \mathbf{0} \quad \text{sur } \Omega \setminus \Gamma. \quad (4.26)$$

L'Eq. (4.26) doit être complétée par des conditions aux limites. Comme en petites déformations, plusieurs types de conditions aux limites peuvent être définis. Dans ce travail, nous utilisons les conditions aux limites uniformes cinématiques, définies dans le cas des grandes déformations par

$$\mathbf{u}(\mathbf{X}) = (\bar{\mathbf{F}} - \mathbf{1})\mathbf{X} + \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{X}) = \mathbf{u}^d(\mathbf{X}) \quad \text{sur } \partial\Omega, \quad (4.27)$$

où $\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{X})$ est un champ de déplacements périodique sur $\bar{\Omega}$.

Dans le cas des grandes déformations, comme le problème aux limites a pour but de déterminer le potentiel $\bar{\Psi}(\bar{\mathbf{C}})$, il est désirable de définir des conditions aux limites sur le VER en fonction de $\bar{\mathbf{C}}$. Nous verrons également par la suite que la représentation de $\bar{\Psi}(\bar{\mathbf{C}})$ dans un espace paramétrique associé aux composantes du tenseur des déformations de Cauchy-Green droit $\bar{\mathbf{C}}$ permet de réduire la dimension de cet espace par rapport à une description en fonction du tenseur $\bar{\mathbf{F}}$, qui lui n'est pas symétrique. La fonction $\bar{\Psi}$ ne dépendant pas de la rotation $\bar{\mathbf{R}}$, nous pouvons choisir parmi tous les choix possibles de $\bar{\mathbf{R}}$ le tenseur unité $\bar{\mathbf{R}} = \mathbf{1}$ qui conduit à $\bar{\mathbf{F}} = \bar{\mathbf{U}} = \bar{\mathbf{C}}^{1/2}$. Les conditions aux limites (4.27) peuvent alors être réexprimées par

$$\mathbf{u}(\mathbf{X}) = (\bar{\mathbf{C}}^{1/2} - \mathbf{1})\mathbf{X} + \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{X}) \quad \text{sur } \partial\Omega. \quad (4.28)$$

A l'échelle macroscopique, les équations d'équilibre doivent être vérifiées :

$$\nabla_X \cdot (\bar{\mathbf{F}}\bar{\mathbf{S}}) = \mathbf{0} \quad \text{sur } \bar{\Omega}, \quad (4.29)$$

avec les conditions aux limites sur le bord du domaine :

$$\bar{\mathbf{u}}(\bar{\mathbf{X}}) = \hat{\mathbf{u}}(\mathbf{X}) \quad \text{sur } \partial\bar{\Omega}_u, \quad \bar{\mathbf{P}}\hat{\mathbf{N}} = \hat{\mathbf{F}} \quad \text{sur } \partial\bar{\Omega}_F, \quad (4.30)$$

où $\bar{\mathbf{u}}$, $\bar{\mathbf{X}}$, $\partial\bar{\Omega}_u$, $\partial\bar{\Omega}_F$, $\hat{\mathbf{F}}$ et $\hat{\mathbf{N}}$ représentent les déplacements macroscopiques, les coordonnées macroscopiques dans la configuration de référence, le bord où les conditions de Dirichlet sont imposées, le bord où les conditions de Neumann sont imposées, la force externe appliquée et le vecteur normal unitaire sortant à $\partial\Omega$.

4.2.2.2 Forme faible pour le problème hyperélastique

la forme faible associée au problème (4.26)-(4.28) est donnée par :

Trouver $\mathbf{u} \in \mathcal{D}$, $\mathcal{D} = \{\mathbf{v} | \mathbf{v}(\mathbf{x}) = \mathbf{u}^d(\mathbf{x}) \text{ on } \partial\Omega, \mathbf{v} \in \mathcal{S}\}$ tel que :

$$\int_{\Omega} \mathbf{S}(\mathbf{u}) : \delta\mathbf{E}(\mathbf{u}, \delta\mathbf{u}) d\Omega = 0 \quad \forall \delta\mathbf{u} \in \mathcal{D}_0, \quad (4.31)$$

où $\mathcal{D}_0 = \{\mathbf{v} | \mathbf{v}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \text{ on } \partial\Omega, \mathbf{v} \in \mathcal{S}\}$, $\mathcal{S}$ étant un espace des fonctions suffisamment régulières, et $\delta\mathbf{E}$ est exprimé par :

$$\delta\mathbf{E}(\mathbf{u}; \delta\mathbf{u}) = \frac{1}{2} (\nabla_X(\delta\mathbf{u})^T \mathbf{F}(\mathbf{u}) + \mathbf{F}(\mathbf{u})^T \nabla_X(\delta\mathbf{u})). \quad (4.32)$$

Le problème (4.31) étant non linéaire, une procédure itérative est nécessaire pour sa résolution. Par exemple, en utilisant une méthode de Newton-Raphson, on peut utiliser le problème linéarisé à chaque itération k :

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \delta\mathbf{E}(\mathbf{u}^k, \delta\mathbf{u}) : \mathbb{L}(\mathbf{u}^k) : \delta\mathbf{E}(\mathbf{u}^k, \Delta\mathbf{u}) d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{S}(\mathbf{u}^k) : \Delta\mathbf{E}(\Delta\mathbf{u}, \delta\mathbf{u}) d\Omega \\ = - \int_{\Omega} \mathbf{S}(\mathbf{u}^k) : \delta\mathbf{E}(\mathbf{u}^k, \delta\mathbf{u}) d\Omega, \end{aligned} \quad (4.33)$$

où $\mathbf{u}^k$ est l'incrément de déplacement tel qu'à l'itération $k+1$ nous avons $\mathbf{u}^{k+1} = \mathbf{u}^k + \Delta\mathbf{u}$ et

$$\Delta \mathbf{E}(\Delta \mathbf{u}, \delta \mathbf{u}) = \frac{1}{2} (\nabla_X(\Delta \mathbf{u})^T \nabla_X(\delta \mathbf{u}) + \nabla_X(\delta \mathbf{u})^T \nabla_X(\Delta \mathbf{u})) . \quad (4.34)$$

La forme faible du problème macroscopique (4.29)-(4.30) est similaire à (4.32) en remplaçant les quantités macroscopiques par des quantités microscopiques. La forme linéarisée associée possède également la même forme que (4.33) en remplaçant les quantités macroscopiques par les quantités microscopiques.

4.3 Méthode de potentiels numériques

4.3.1 Idées de base

La méthode des potentiels numériques introduite dans [101, 103] et étendue au cadre stochastique dans [14, 15], est une méthode d'homogénéisation numérique dans laquelle le potentiel effectif $\bar{w}(\bar{\epsilon})$, et $\bar{\Psi}(\bar{\mathbf{C}})$, pour les petites et grandes déformations, respectivement, est évalué numériquement et interpolé dans l'espace des composantes des déformations macroscopiques lors du calcul de structure par

$$\bar{w}(\bar{\epsilon}) \approx \sum_i N_i(\bar{\epsilon}) \bar{w}_i \quad \bar{\Psi}(\bar{\mathbf{C}}) \approx \sum_i N_i(\bar{\mathbf{C}}) \bar{\Psi}_i, \quad (4.35)$$

où N_i sont des fonctions d'interpolation dans l'espace des déformations macroscopiques. Pour obtenir les valeurs discrètes du potentiel, des calculs éléments finis (utilisés ici, bien que toute autre méthode de résolution numérique locale, XFEM [69], FFT [64], etc. puissent être choisies sans modification de la méthode) sont menés sur un VER en chaque point d'un sous-domaine dans l'espace des déformations macroscopiques. Pour chacun de ces points, les conditions aux limites correspondantes sont imposées sur le bord du VER et le problème non linéaire correspondant est résolu. Une fois calculées et stockées, ces valeurs discrètes de la fonction potentielle macroscopique ($\bar{w}_i$ ou $\bar{\Psi}_i$) peuvent être interpolées et dérivées pour évaluer les contraintes $\bar{\boldsymbol{\sigma}}$ et $\bar{\mathbf{S}}$ (respectivement en petites et grandes déformations) par

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}}(\bar{\epsilon}) \approx \sum_i \frac{\partial N_i(\bar{\epsilon})}{\partial \bar{\epsilon}} \bar{w}_i, \quad \bar{\mathbf{S}}(\bar{\mathbf{C}}) \approx 2 \sum_i \frac{\partial N_i(\bar{\mathbf{C}})}{\partial \bar{\mathbf{C}}} \bar{\Psi}_i. \quad (4.36)$$

Finalement, le tenseur élastique tangent désigné par $\bar{\mathbb{M}}$ dans le cas des petites déformations et par $\bar{\mathbb{L}}$ pour les grandes déformations, et nécessaire en chaque point du maillage macroscopique pour résoudre numériquement le problème au niveau de la structure, est calculé par

$$\bar{\mathbb{M}}(\bar{\epsilon}) \approx \sum_i \frac{\partial^2 N_i(\bar{\epsilon})}{\partial \bar{\epsilon} \partial \bar{\epsilon}} \bar{w}_i \quad \bar{\mathbb{L}}(\bar{\mathbf{C}}) \approx 4 \sum_i \frac{\partial^2 N_i(\bar{\mathbf{C}})}{\partial \bar{\mathbf{C}} \partial \bar{\mathbf{C}}} \bar{\Psi}_i. \quad (4.37)$$

Les étapes principales de la méthode sont résumées ci-dessous.

1. Définir un VER associé à la microstructure du matériau hétérogène.

2. Un domaine $\Delta \subset \mathbb{R}^6$ pour un problème 3D ou $\Delta \subset \mathbb{R}^3$ pour un problème 2D est défini, associé à l'espace des composantes des déformations macroscopiques ($\bar{\varepsilon}$).
3. Le domaine Δ est discrétisé en un nombre fini de nœuds. Pour chaque nœud, les valeurs correspondantes de $\bar{\varepsilon}$ sont utilisées pour définir des conditions aux limites sur le VER. Le problème est alors résolu numériquement. À partir de l'état de déformations à l'équilibre, le potentiel macroscopique $\bar{w}(\bar{\varepsilon})$ (ou $\bar{\Psi}(\bar{\mathbf{C}})$ pour les grandes déformations) est calculé. L'opération est répétée pour tous les nœuds.
4. Un schéma d'interpolation approprié est appliqué pour construire une représentation continue du potentiel à partir de la base de donnée, consistant en une collection de valeurs discrètes scalaires du potentiel et associées à des valeurs des composantes des déformations macroscopiques. Durant le calcul de structure à l'échelle macroscopique, les composantes du tenseur des contraintes et le tenseur élastique tangent sont évalués par interpolation et dérivation de l'approximation continue en utilisant les relations (4.36)-(4.37). Pour les points situés en dehors du domaine de déformations macroscopique, une méthode d'extrapolation peut être utilisée [103].

4.3.2 Construction de potentiels avec échantillonnage dans des grilles régulières

Une première approche directe pour construire une interpolation est de définir une grille de points régulièrement espacés dans un sous-domaine $\mathcal{E}$ dans l'espace des déformations macroscopiques. Cette technique a été adoptée par exemple dans [101, 103].

Nous rappelons dans cette section le cadre de la méthode pour le cas des petites déformations. Pour les grandes déformations, les déformations infinitésimales ε_{ij} doivent être remplacées par le tenseur des déformations de Cauchy-Green droit C_{ij} et les contraintes de Cauchy σ_{ij} par le second tenseur des contraintes de Piola-Kirchhoff S_{ij} .

Par la suite, la notation de Voigt est utilisée pour les indices des composantes des tenseurs du second ordre des déformations et des contraintes. Dans ce cas, chaque axe $\bar{\varepsilon}_\alpha$ associé avec la déformation macroscopique $\bar{\varepsilon}_\alpha$ avec $\alpha = 1, 2, \dots, d$ est uniformément discrétisé. La valeur d représente le nombre de composantes de déformation indépendantes (3 en 2D et 6 en 3D dans le cas compressible), plus d'éventuels paramètres supplémentaires (stochastiques, paramètres associés à la microstructure, etc.). Des valeurs minimum $\bar{\varepsilon}_\alpha^{\min}$ et maximum $\bar{\varepsilon}_\alpha^{\max}$ doivent être choisies. Dans le cas des petites déformations, ces valeurs peuvent être choisies en respectant l'hypothèse des petites déformations. Le choix de ces valeurs dans le cas des grandes déformations est plus délicat, et discuté dans [103]. Une discrétisation uniforme de l'axe $\bar{\varepsilon}_\alpha$ sur l'intervalle $[\bar{\varepsilon}_\alpha^{\min}, \bar{\varepsilon}_\alpha^{\max}]$ peut être obtenue en introduisant un ensemble de points $\{\xi_0^\alpha, \xi_1^\alpha, \dots, \xi_{m_\alpha}^\alpha\}$ tels que $\bar{\varepsilon}_\alpha^{\min} = \xi_0^\alpha < \xi_1^\alpha < \dots < \xi_{m_\alpha}^\alpha = \bar{\varepsilon}_\alpha^{\max}$ et $\xi_1^\alpha - \xi_0^\alpha = \xi_2^\alpha - \xi_1^\alpha = \dots = \xi_{m_\alpha}^\alpha - \xi_{m_\alpha-1}^\alpha$. Ainsi, le sous-domaine $\Delta = [\bar{\varepsilon}_1^{\min}, \bar{\varepsilon}_1^{\max}] \times [\bar{\varepsilon}_2^{\min}, \bar{\varepsilon}_2^{\max}] \times \dots \times [\bar{\varepsilon}_d^{\min}, \bar{\varepsilon}_d^{\max}]$ de $\mathcal{E}$ est discrétisé en une grille uniforme. Un nœud de Δ est un point $(\xi_{i_1}^1, \xi_{i_2}^2, \dots, \xi_{i_d}^d)$ avec $0 \leq i_\alpha \leq m_\alpha$. Dans ce travail, nous posons $m_1 + 1 = m_2 + 1 = \dots = m_d + 1 = p$ tels que Δ contienne p^d nœud.

Ensuite, il faut évaluer $\bar{w}$ en chaque nœud de Δ par Eléments finis. Plus précisément, étant données les composantes du tenseur des déformations effectives

$(\xi_{i_1}^1, \xi_{i_2}^2, \dots, \xi_{i_d}^d)$ correspondant au nœud $i_1 i_2 \dots i_d$ avec $0 \leq i_\alpha \leq p-1$, nous appliquons la méthode des Éléments Finis pour résoudre le problème aux limites non linéaire sur le VER $\bar{\Omega}$. Soit $\mathbf{u}(\mathbf{x}; \xi_{i_1}^1, \xi_{i_2}^2, \dots, \xi_{i_d}^d)$ la composante des déplacements correspondant obtenus par un calcul FEM. L'évaluation de $\bar{w}$ au nœud $i_1 i_2 \dots i_d$ est donnée par

$$\bar{w}(\xi_{i_1}^1, \xi_{i_2}^2, \dots, \xi_{i_d}^d) = \langle w[\mathbf{x}, \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}(\mathbf{x}; \xi_{i_1}^1, \xi_{i_2}^2, \dots, \xi_{i_d}^d))] \rangle. \quad (4.38)$$

Pour la suite, la valeur de $\bar{w}$ évaluée au nœud $i_1 i_2 \dots i_d$ est désignée par $\bar{w}_{i_1 i_2 \dots i_d}$, via

$$\bar{w}_{i_1 i_2 \dots i_d} = \bar{w}(\xi_{i_1}^1, \xi_{i_2}^2, \dots, \xi_{i_d}^d). \quad (4.39)$$

De plus, nous introduisons une "hypermatrice" $\bar{\mathbb{W}}$ dont les composantes sont constituées de tous les éléments $\bar{w}_{i_1 i_2 \dots i_d}$ ($1 \leq i_\alpha \leq m_\alpha$), et notée symboliquement

$$\bar{\mathbb{W}} = [\bar{w}_{i_1 i_2 \dots i_d}] . \quad (4.40)$$

Après avoir résolu p^d problèmes non linéaires par FEM, les estimations $\bar{w}_{i_1 i_2 \dots i_d}$ de $\bar{w}$ sont obtenues pour p^d nœuds. Ces estimations constituent une représentation discrète de $\bar{w}$. En interpolant des valeurs nodales $\bar{w}_{i_1 i_2 \dots i_d}$ par une méthode appropriée, pour $0 \leq i_\alpha \leq p-1$, nous obtenons une approximation continue de $\bar{w}^*$. Pour un problème 2D $d = 3$ (3 composantes de déformations symétriques indépendantes) et en 3D $d = 6$. D'autres paramètres peuvent être ajoutés et augmentent dans ce cas la taille d de l'espace, comme des valeurs de coefficients associés à la microstructure. Dans la suite, nous décrivons deux techniques pour réaliser cette interpolation, qui doit être effectuée efficacement en vue d'un calcul de structure où cette opération sera répétée un très grand nombre de fois. La première technique utilise des fonctions splines multidimensionnelles. La seconde permet d'accélérer l'opération d'interpolation par réduction de la base de donnée $\bar{w}_{i_1 i_2 \dots i_6}$ par une méthode de représentation en variables séparées.

4.3.2.1 Méthode d'interpolation spline en grandes dimensions

Dans ce paragraphe, nous décrivons une méthode d'interpolation directe de la base de données $\bar{w}_{i_1 i_2 \dots i_6}$ par l'utilisation d'une technique d'interpolation de type spline multidimensionnelle. Pour satisfaire à la condition que l'approximation continue $\bar{w}^*$ de $\bar{w}$ soit de continuité $\mathcal{C}^2$, nous choisissons des fonctions spline cubiques. Nous rappelons brièvement l'interpolation par splines cubiques en une dimension pour des nœuds régulièrement espacés dans l'annexe C.

Pour le cas multidimensionnel, on peut appliquer la procédure décrite en détails dans [27]. Une fois réalisée la discrétisation décrite ci-dessus du domaine Δ de $\mathcal{E}$ et les estimation nodales $\bar{w}_{i_1 i_2 \dots i_6}$ de $\bar{w}$, nous cherchons à construire l'approximation $\bar{w}^*$ de $\bar{w}$ telle que

$$\bar{w}^*(\xi_{i_1}^1, \xi_{i_2}^2, \dots, \xi_{i_6}^6) = \bar{w}_{i_1 i_2 \dots i_6}, \quad 0 \leq i_\alpha \leq p-1. \quad (4.41)$$

Ceci est accompli en interpolant les valeurs nodales $\bar{w}_{i_1 i_2 \dots i_6}$ par le biais des fonctions splines cubiques :

$$\bar{w}^*(\bar{\varepsilon}_1, \bar{\varepsilon}_2, \dots, \bar{\varepsilon}_6) = \sum_{i_1=1}^{p+2} \dots \sum_{i_6=1}^{p+2} c_{i_1 i_2 \dots i_6} \prod_{j=1}^6 \phi_{i_j}^j(\bar{\varepsilon}_j). \quad (4.42)$$

Dans cette expression, les fonction splines cubiques $\phi_{i_j}^j$ sont définies par

$$\phi_{i_j}^j(\bar{\varepsilon}_j) = \Phi\left(\frac{\bar{\varepsilon}_j - \bar{\varepsilon}_j^{\min}}{h_j} + 2 - i_j\right) \quad (4.43)$$

où $h_j = (\bar{\varepsilon}_j^{\min} - \bar{\varepsilon}_j^{\max})/m_j$ et

$$\Phi(t) = \begin{cases} (2 - |t|)^3, & 1 \leq |t| \leq 2; \\ 4 - 6|t|^2 + 3|t|^3, & |t| \leq 1; \\ 0, & \text{sinon.} \end{cases} \quad (4.44)$$

Les coefficients $c_{i_1 i_2 \dots i_6}$ sont obtenus en vérifiant les conditions (4.41). Le nombre d'inconnues du problème est de $\prod_{j=1}^d (m_j + 3)$. Un algorithme efficace pour déterminer les coefficients $c_{i_1 i_2 \dots i_6}$ est fourni dans [27]. De nombreuses routines sont disponibles pour construire des fonctions spline cubiques. Par exemple, la routine Matlab® (fonction "interp.m" avec l'argument "spline").

On peut alors exprimer la relation contraintes-déformations sous la forme :

$$\begin{aligned} \bar{\sigma}_k^*(\bar{\varepsilon}_1, \bar{\varepsilon}_2, \dots, \bar{\varepsilon}_6) &= \frac{\partial \bar{w}^*(\bar{\varepsilon}_1, \bar{\varepsilon}_2, \dots, \bar{\varepsilon}_6)}{\partial \bar{\varepsilon}_k} = \\ &= \sum_{i_1=1}^{p+2} \dots \sum_{i_6=1}^{p+2} c_{i_1 i_2 \dots i_6} \left\{ \prod_{j \neq k}^6 \phi_{i_j}^j(\bar{\varepsilon}_j) \right\} \frac{\partial \phi_{i_k}^k(\bar{\varepsilon}_k)}{\partial \bar{\varepsilon}_k}. \end{aligned} \quad (4.45)$$

Le module tangent effectif peut alors être calculé par l'Eq. (4.37) avec

$$\begin{aligned} \hat{M}_{kl}^*(\bar{\varepsilon}_1, \bar{\varepsilon}_2, \dots, \bar{\varepsilon}_6) &= \frac{\partial^2 \bar{w}^*(\bar{\varepsilon}_1, \bar{\varepsilon}_2, \dots, \bar{\varepsilon}_6)}{\partial \bar{\varepsilon}_k \partial \bar{\varepsilon}_l} \\ &= \sum_{i_1=1}^{p+2} \dots \sum_{i_6=1}^{p+2} c_{i_1 i_2 \dots i_6} \left\{ \prod_{j \neq k, l}^6 \phi_{i_j}^j(\bar{\varepsilon}_j) \right\} \frac{\partial \phi_{i_k}^k(\bar{\varepsilon}_k)}{\partial \bar{\varepsilon}_k} \frac{\partial \phi_{i_l}^l(\bar{\varepsilon}_l)}{\partial \bar{\varepsilon}_l} \text{ si } k \neq l \end{aligned} \quad (4.46)$$

$$\begin{aligned} \hat{M}_{kl}^*(\bar{\varepsilon}_1, \bar{\varepsilon}_2, \dots, \bar{\varepsilon}_6) &= \\ &= \sum_{i_1=1}^{p+2} \dots \sum_{i_6=1}^{p+2} c_{i_1 i_2 \dots i_6} \left\{ \prod_{j \neq l}^6 \phi_{i_j}^j(\bar{\varepsilon}_j) \right\} \frac{\partial^2 \phi_{i_l}^l(\bar{\varepsilon}_l)}{\partial \bar{\varepsilon}_l^2} \text{ si } k = l. \end{aligned} \quad (4.47)$$

La convergence de telles approximations par rapport au nombre de nœuds p est garantie par la théorie classique des approximations polynomiales et est par exemple discutée dans [5]. Pour des problèmes 2D faisant intervenir 3 composantes indépendantes de la déformation, cette première méthode est très rapide, même pour des grilles de discrétisation relativement fines. Cependant, pour des problèmes 3D où 6 composantes du tenseur des déformations interviennent, la détermination des coefficients $c_{i_1 i_2 \dots i_6}$ implique la résolution d'un système d'équations de très grande taille et nécessite des ressources en temps de calcul et en mémoire gigantesques. Dans la suite, une technique alternative est proposée pour éviter ces inconvénients.

4.3.2.2 Méthode d'interpolation basée sur une approximation en variables séparées

La décomposition de tenseurs de grands ordres en produits tensoriels de vecteurs est une technique efficace de compression des données et de reconstruction de modèles à partir de description réduites. Ce type de techniques remonte aux travaux de Hitchcock [38]. Celles-ci ont été redécouvertes de manière indépendante et renommé à plusieurs reprises sous les noms de facteurs parallèles (PARAFAC) [30],[45] ou encore décomposition canonique [10]. Une autre décomposition similaire est la décomposition en valeurs singulières de grands ordres (Higher-Order Singular Value Decomposition, HOSVD) [49]. Par rapport à la décomposition PARAFAC, la HOSVD fait intervenir un tenseur de cœur dans le produit tensoriel (voir [99]). Muti et Bourennane [71] ont utilisé la HOSVD pour des analyses de signal multidimensionnel. Beylkin et Molhenkamp [6] ont élaboré des algorithmes basés sur une représentation en variables séparées pour résoudre des systèmes linéaires de grandes dimensions et ont discuté les problèmes de conditionnement dans ce cadre. Les mêmes auteurs ont également développé des algorithmes pour résoudre les problèmes impliquant des fonctions antisymétriques, qui interviennent par exemple dans la résolution de l'équation de Schrödinger en mécanique quantique.

Dans cette deuxième approche (appelée NEXP2 par la suite), l'hypermatrice $\bar{\mathbb{W}}$ définie par (4.40) est approximée par sa représentation en variables séparées $\bar{\mathbb{U}}$:

$$\bar{\mathbb{W}} \approx \bar{\mathbb{U}}(\xi_{i_1}^1, \xi_{i_2}^2, \dots, \xi_{i_6}^6) = \sum_{r=1}^R \phi_1^r \otimes \phi_2^r \otimes \dots \otimes \phi_6^r, \quad (4.48)$$

où ϕ_i^r ($i = 1, \dots, 6$) est un vecteur à valeurs réelles associé avec les composantes du tenseur des déformations macroscopiques $\bar{\varepsilon}_i$ et R est un entier. En notation indicelle l'Eq. (4.48) est donnée par :

$$\bar{w}_{i_1 i_2 \dots i_6} \approx \bar{U}_{i_1 i_2 \dots i_6} = \sum_{r=1}^R \{\phi_1^r\}_{i_1} \{\phi_2^r\}_{i_2} \dots \{\phi_6^r\}_{i_6}, \quad (4.49)$$

où $\{\phi_j^r\}_k$ représente la k -ième valeur du vecteur ϕ_j^r . Les vecteurs ϕ_j^r dans (4.48) sont déterminés numériquement en résolvant le problème de minimisation suivant pour R donné :

$$\inf_{\phi_j^r} \left\| \bar{\mathbb{W}} - \sum_{r=1}^R \phi_1^r \otimes \phi_2^r \otimes \dots \otimes \phi_6^r \right\|^2, \quad r = 1, \dots, R, \quad j = 1, \dots, 6, \quad (4.50)$$

où $\|\cdot\|$ est la norme de Frobenius. Pour réaliser une précision donnée, R peut être augmenté tel que :

$$\left\| \bar{\mathbb{W}} - \sum_{r=1}^R \phi_1^r \otimes \phi_2^r \otimes \dots \otimes \phi_6^r \right\| < \delta, \quad (4.51)$$

où δ est un paramètre de tolérance. Le problème (4.50) étant non linéaire par rapport aux vecteurs inconnus ϕ_j^r , une procédure itérative est nécessaire pour

sa résolution. Un algorithme efficace est l'algorithme de point fixe des moindres carrés alternés [10, 30, 104], dans lequel à chaque itération le problème n'est résolu que par rapport à une dimension, toutes les autres variables associées étant fixées. De nombreuses routines ont été développées depuis plusieurs années et sont disponibles, comme par exemple la routine Matlab® "parafac.m", pouvant être obtenue librement sur [4].

Une fois $\bar{\mathbb{U}}$ calculé, une valeur arbitraire de $\bar{w}$ peut être approximée en interpolant les valeurs discrètes unidimensionnelles ϕ_j^r . Ainsi, nous obtenons une représentation en variables séparées de $\bar{w}^*$ sous la forme :

$$\bar{w}(\bar{\varepsilon}_1, \bar{\varepsilon}_2, \dots, \bar{\varepsilon}_6) \approx \bar{w}^*(\bar{\varepsilon}_1, \bar{\varepsilon}_2, \dots, \bar{\varepsilon}_6) = \sum_{r=1}^R \tilde{\phi}_1^r(\bar{\varepsilon}_1) \tilde{\phi}_2^r(\bar{\varepsilon}_2) \dots \tilde{\phi}_6^r(\bar{\varepsilon}_6) , \quad (4.52)$$

où $\tilde{\phi}_j^r(\bar{\varepsilon}_j)$ sont les valeurs interpolées de ϕ_j^r :

$$\tilde{\phi}_j^r(\bar{\varepsilon}_j) = \sum_{k=1}^n N_k(\bar{\varepsilon}_j) \{ \phi_j^r \}_k . \quad (4.53)$$

Dans l'Eq. (4.53), N_k est une fonction d'interpolation unidimensionnelle de continuité $\mathcal{C}^2$ associée avec le nœud k , et n représente le nombre de nœuds associées à la fonction de forme $N_k(\bar{\varepsilon}_j)$ dont les valeurs en $\bar{\varepsilon}_j$ sont différentes de zéro. Comme précédemment, la contrainte peut être exprimée par

$$\bar{\sigma}_i^*(\bar{\varepsilon}_1, \bar{\varepsilon}_2, \dots, \bar{\varepsilon}_6) = \sum_{r=1}^R \left(\left\{ \prod_{k \neq i} \tilde{\phi}_k^r(\bar{\varepsilon}_k) \right\} \frac{\partial \tilde{\phi}_i^r(\bar{\varepsilon}_i)}{\partial \bar{\varepsilon}_i} \right) , \quad (4.54)$$

où

$$\frac{\partial \tilde{\phi}_i^r(\bar{\varepsilon}_i)}{\partial \bar{\varepsilon}_i} = \sum_{k=1}^n \frac{\partial N_k(\bar{\varepsilon}_i)}{\partial \bar{\varepsilon}_i} \{ \phi_i^r \}_k . \quad (4.55)$$

Enfin, l'approximation $\hat{\mathbb{M}}^*$ de $\hat{\mathbb{M}}$ est évaluée par :

$$\hat{M}_{ij}^*(\bar{\varepsilon}_1, \bar{\varepsilon}_2, \dots, \bar{\varepsilon}_6) = \sum_{r=1}^R \left(\left\{ \prod_{k \neq i,j} \tilde{\phi}_k^r(\bar{\varepsilon}_k) \right\} \frac{\partial \tilde{\phi}_i^r(\bar{\varepsilon}_i)}{\partial \bar{\varepsilon}_i} \frac{\partial \tilde{\phi}_j^r(\bar{\varepsilon}_j)}{\partial \bar{\varepsilon}_j} \right) \quad \text{si } i \neq j , \quad (4.56)$$

$$\hat{M}_{ij}^*(\bar{\varepsilon}_1, \bar{\varepsilon}_2, \dots, \bar{\varepsilon}_6) = \sum_{r=1}^R \left(\left\{ \prod_{k \neq i} \tilde{\phi}_k^r(\bar{\varepsilon}_k) \right\} \frac{\partial^2 \tilde{\phi}_i^r(\bar{\varepsilon}_i)}{\partial \bar{\varepsilon}_i^2} \right) \quad \text{si } i = j , \quad (4.57)$$

avec

$$\frac{\partial^2 \tilde{\phi}_i^r(\bar{\varepsilon}_i)}{\partial \bar{\varepsilon}_i^2} = \sum_{k=1}^n \frac{\partial^2 N_k(\bar{\varepsilon}_i)}{\partial \bar{\varepsilon}_i^2} \{ \phi_i^r \}_k . \quad (4.58)$$

Pour un domaine de déformations macroscopique en dimensions 6, cette approche nécessite seulement de réaliser la transformation PARAFAC décrite précédemment, puis d'évaluer les coefficients de spline cubiques unidimensionnelles, réduisant les coûts liés d'une part au calcul de ces coefficients, puis à l'évaluation de l'interpolation (seulement des interpolations unidimensionnelles sont nécessaires) lors du calcul de structure. Ces techniques ont été appliquées pour des calculs de structures composites non linéaires en petite et grandes déformations dans [101, 103]. Cependant, avec ce type de technique, le nombre de valeurs (calculs locaux) à effectuer, même s'il reste faible par rapport à un calcul à deux échelles type FE^2 (voir une analyse dans [101]), reste très important en 3D (p^6 calculs non linéaires à réaliser) et devient impraticable pour des ensembles paramétriques encore plus grands, par exemples pour des problèmes stochastiques ou des problèmes où des paramètres tels que la fraction volumique ou des propriétés matériaux peuvent varier, dans des objectifs d'optimisation. Dans le cas des problèmes stochastiques, une extension de la méthode des potentiels a été proposée dans [15] où le potentiel est directement développé sous forme de chaos polynomaux. Pour les problèmes 3D et incluant plus de paramètres, nous proposons dans cette thèse une nouvelle extension de la méthode des potentiels numériques, où l'approximation du potentiel est basée sur des réseaux de neurones.

4.4 Homogénéisation non linéaire pour des espaces paramétriques de grandes dimensions

4.4.1 Approximation de fonctions multidimensionnelles par réseaux de neurones artificiels

La représentation de fonctions dérivables dans des espaces de grandes dimensions joue un rôle très important en sciences de l'ingénieur et en sciences physiques. Par exemple, la problématique de représenter des surfaces de réponse pour l'analyse de la rupture des structures est un enjeu crucial en génie civil et en ingénierie. La représentation de fonctions de densité de probabilité est également largement utilisée pour identifier des modèles probabilistes dans la représentation des incertitudes dans les modèles. L'identification de potentiels d'interaction pour la dynamique moléculaire est également une activité de recherche intensive en chimie théorique [8], [60]. Nous nous intéressons ici aux schémas d'approximation associés pour la représentation de telles fonctions dans l'objectif de construire des potentiels numériques dans des espaces paramétriques de grandes dimensions en vue de construire des modèles de comportement homogénéisé pour les matériaux non linéaires élastiques. Les principales difficultés de la représentation de ces fonctions interviennent lorsque les espaces paramétriques sont de grandes dimensions, pour les raisons suivantes : (a) le nombre de valeurs échantillonnées ou calculées augmente exponentiellement avec la dimensionnalité ; (b) la définition de schémas d'interpolation en grande dimension et dans des nuages de points aléatoires est délicate ; (c) La définition d'une approximation en présence de données échantillonnées non uniformément réparties dans l'espace ou partielles n'est pas triviale. Des schémas d'interpolation ont été proposés, comme par exemple (parmi beaucoup d'autres : les splines multidimensionnelles décrites ci-dessus ou les méthodes de moindres carrés mobiles [17]). D'autres représentations existent,

comme la décomposition en sommes de produits de fonctions unidimensionnelles en variables séparées [6, 2], comme par exemple utilisée dans la méthode PGD (Propper Orthogonal Decomposition) [33, 34, 13]. Les approximants de type réseaux de neurones (Neural Networks, ou NN [58]) et que nous présentons par la suite ont l'avantage de permettre la définition d'approximants en grandes dimensions avec un nombre de fonctions et de points d'échantillons plus réduit, ceux-ci pouvant être répartis aléatoirement dans l'espace paramétrique. Nous rappelons ci-dessous les principes de la méthode.

Une représentation très utilisée par exemple en mécanique atomistique et en chimie pour l'approximation de potentiels d'interaction est l'approximation dite "multi-modes" [11, 12], donnée sous la forme :

$$\begin{aligned}
f(x_1, x_2, \dots, x_D) = & f_0 + \sum_{n=1}^D f_i^{(1)}(x_i) + \sum_{i < j=1}^{C_D^2} f_{ij}^{(2)}(x_i, x_j) + \dots \\
& + \sum_{i_1, i_2, \dots, i_n}^{C_D^n} f_{i_1, i_2, \dots, i_n}^{(n)}(x_{i_1}, x_{i_2}, \dots, x_{i_n}) + \dots + f_{12, \dots, D}^{(D)}(x_1, x_2, \dots, x_D)
\end{aligned} \tag{4.59}$$

où $C_j^i = \frac{i!}{(n-k)!k!}$. Des approximations de ce type ont été généralisées dans [87, 80], où celles-ci sont appelées HDMR (High-Dimensional Model representation). Si une fonction est à identifier en utilisant la représentation (4.59), il est nécessaire d'utiliser des ensembles de données différentes pour identifier chaque fonction f . Le nombre de fonctions f augmentant de façon combinatoire avec D et d , il devient impossible en pratique d'appliquer ces méthodes pour des dimensions importantes (de l'ordre de $D = 10$), où les termes d'ordre $d = 3$ deviennent nécessaires.

Dans [80], la méthode HDMR aléatoire a été introduite, permettant en principe d'identifier toutes les fonctions f à partir d'un même ensemble de points aléatoirement distribués dans l'espace. Il est alors nécessaire de minimiser l'erreur dans tout l'espace et d'évaluer des intégrales multidimensionnelles ce qui peut s'avérer extrêmement coûteux.

Dans une série de travaux [58, 57, 61, 59, 60, 63, 62] Manzhos et al. ont proposé une méthode d'approximation de fonctions en grandes dimensions basées sur des techniques de représentation multimodales dites de "réseaux de neurones" à partir de données partielles et permettant d'accomplir une réduction significative de la représentation en terme de données discrètes à calculer.

Une autre difficulté est que quel que soit le choix des fonctions f , il est nécessaire de construire C_D^d fonctions D -dimensionnelles. Une façon de réduire le nombre de fonctions est d'utiliser de nouvelles coordonnées, obtenues à partir des coordonnées initiales par une transformation linéaire [60, 59]. Ainsi, on peut montrer [59] qu'il existe une transformation linéaire des coordonnées permettant d'obtenir une qualité arbitraire dans le contexte de la HDMR pour un ordre de développement k (d'après le théorème d'approximation universel [16]) :

$$\exists \hat{\mathbf{A}}, \mathbf{b} : \mathbf{y} = \hat{\mathbf{A}}\mathbf{x} + \mathbf{b}$$

$$f^{HDMR}(\mathbf{y}) = f_0 + \sum_i f_i(y_i^{(1)}) + \sum_{i_1, i_2} f_{i_1, i_2}(y_{i_1}^{(2)}, y_{i_2}^{(2)})$$

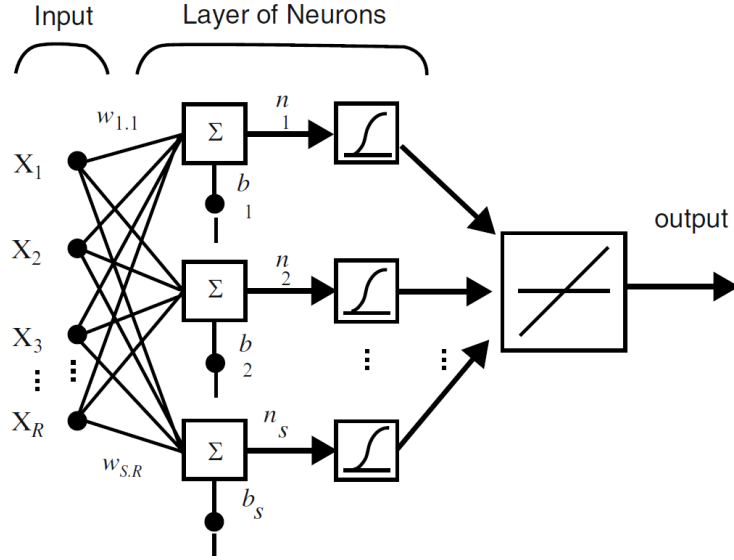


FIGURE 4.1 – Réseau de neurones à une couche cachée.

$$+ \sum_{i_1, i_2, \dots, i_k} f_{i_1, i_2, \dots, i_k} \left(y_{i_1}^{(1)}, y_{i_2}^{(2)}, \dots, y_{i_k}^{(k)} \right)$$

$$\forall \epsilon > 0, |f^{HDMR}(\mathbf{y}) - f(\mathbf{x})| < \epsilon, \forall k \geq 1.$$

Avec ces deux ingrédients, il est possible de représenter des fonctions dans des espaces de grande dimension en maintenant le nombre de fonctions et de points d'échantillonnage faible au regard de l'augmentation de la dimensionnalité [59, 60] à condition que la fonction possède une certaine régularité. La nouvelle représentation est exprimée par :

$$f(x_1, x_2, \dots, x_D) \simeq \tilde{f}(x_1, x_2, \dots, x_D) = \sum_{i=1}^L f_i^{NN} (y_1^i, y_2^i, \dots, y_d^i) \quad (4.60)$$

où les fonctions $f_i^{NN} (y_1^i, y_2^i, \dots, y_d^i)$, $d < D$ sont appelées fonctions "réseaux de neurones" (NN) et

$$\mathbf{y}^i = \mathbf{A}^i \mathbf{x} + \mathbf{b}^i, \quad (4.61)$$

où $\mathbf{A}^i$ est une matrice rectangulaire. Les représentation par réseaux de neurones utilisent des fonctions appelées neurones dont les arguments sont des combinaisons linéaires des coordonnées x_i . Un réseau simple de neurones dit à une couche cachée (voir [57, 54, 88]) est représenté schématiquement dans la figure 4.1 et est exprimé par :

$$f_i^{NN} (y_1^i, y_2^i, \dots, y_d^i) = \sum_{n=1}^N c_n^i g(\mathbf{w}^n \cdot \mathbf{y}^i + d_n^i) + d_0^i \quad (4.62)$$

où la fonction g est la fonction d'activation. Une fonction d'activation sigmoïde $g(x) = 2(1 + e^{-2x})^{-1} - 1$ est utilisé dans ce travail, bien que toute fonction lisse non linéaire puisse être utilisée. Par exemple, la fonction exponentielle $g(x) = e^x$ produit f sous la forme [62] :

$$f_i^{NN}(y_1^i, y_2^i, \dots, y_d^i) = \sum_{n=1}^N c_n \prod_{j=1}^d e^{\mathbf{w}^n \cdot \mathbf{y}^i} + d_0^i. \quad (4.63)$$

Cette représentation possède des avantages pour l'intégration et la dérivation en grandes dimensions. Au final, pour L , N , d et M fixés, les paramètres A_{jk}^i , b_j^i , c_n^i , w_i^n et d_0^i doivent être identifiés, en minimisant la fonctionnelle :

$$J = \left(\frac{1}{M} \sum_{k=1}^M \left(f(\mathbf{x}^k) - \sum_i f_i^{NN}(\mathbf{y}^{ki}) \right)^2 \right)^{1/2}. \quad (4.64)$$

Les M points d'échantillonnage $\mathbf{x}^k$ peuvent être répartis aléatoirement dans l'espace paramétrique. Identifier simultanément tous les paramètres des fonctions f_i^{NN} induit un coût en temps et en mémoire prohibitif. Pour alléger les coûts, un algorithme de type point-fixe est proposé dans [62], en identifiant les paramètres de chaque fonction indépendamment en fixant ceux des autres à chaque itération. Pour d donné, on peut améliorer la qualité de l'approximation soit en augmentant le nombre de fonctions L soit en augmentant le nombre de termes N , soit en augmentant le nombre de points échantillonnés M . Un exemple de code permettant l'identification des différents paramètres du schéma (4.64) à partir d'un nuage de points aléatoire peut être trouvé dans [63].

4.4.2 Tests numériques : fonctions analytiques en grandes dimensions

Dans cette série de test, nous évaluons la qualité de l'approximation NN en considérant des fonctions analytiques que nous cherchons à reproduire par des valeurs échantillonnées aléatoirement dans un hypercube $[-1; 1]^D$, avec D la dimension. Les fonctions testées sont les suivantes :

$$f^{(A)} = \sum_{i=1}^D x_i^2 \quad D = 6; 8; 10; \quad (4.65)$$

$$f^{(B)} = e^{-\sum_{i=1}^D x_i} \quad D = 6; 8; 10; \quad (4.66)$$

$$f^{(C)} = \sqrt{\sum_{i=1}^D x_i^2} \quad D = 6; 8; 10. \quad (4.67)$$

Pour chaque cas, les coefficients A_{jk}^i , b_j^i , c_n^i , w_i^n et d_0^i de l'approximation NN (4.60)-(4.62) sont identifiés. Une analyse de convergence est réalisée par rapport :

1. au nombre M de points échantillonnés
2. au nombre L de fonctions de base dans (4.60)

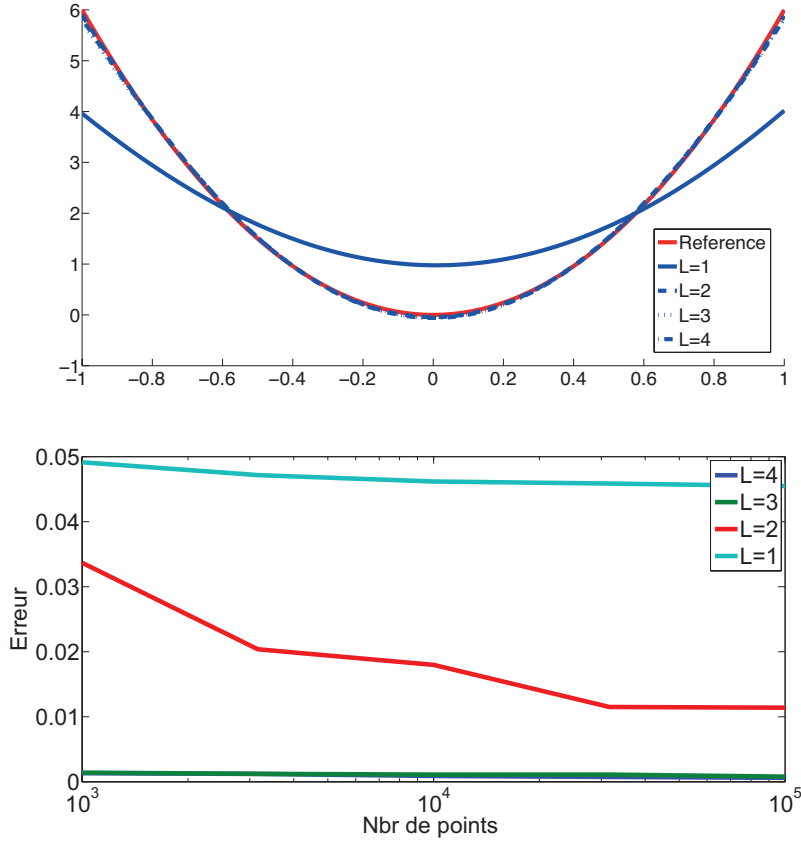


FIGURE 4.2 – Fonction $f^{(A)} = \sum_{i=1}^d x_i^2$, $D = 6$. Le paramètre $N = 4$ est fixé, L varie, le nombre de points d'échantillonnage est de $M = 10^5$; (a) Approximation pour $x_1 = x_2 \dots = x_D$; (b) Convergence de l'erreur par rapport au nombre de points échantillonnés.

3. au nombre N de fonctions d'activation dans (4.62)

Le nombre d dans (4.60) est fixé à $d = 3$ pour tous les exemples étudiés. Les résultats sont présentés dans les figures 4.2-4.7 pour la fonction $f^{(A)}$, dans les figures 4.8-4.13 pour la fonction $f^{(B)}$ et dans les figures 4.14-4.19 pour la fonction $f^{(C)}$. Pour les courbes tracées, le nombre de points d'échantillonnage a été fixé à $M = 10^5$ valeurs.

Ces différents résultats permettent de conclure sur les points suivants :

1. Des nombres de fonctions f_i^{NN} et de termes d'approximations L de l'ordre de 4 et 4, respectivement doivent être choisis pour obtenir des qualités suffisantes d'approximation pour les exemples traités.
2. La qualité de l'approximation peut être maintenue à un niveau satisfaisant pour un nombre de points d'évaluation M n'augmentant pas exponentiellement avec la dimension D , permettant d'envisager des applications pour des dimensions de l'ordre de 10.

Nous notons que cette approximation permet de reproduire des fonctions complexes, telle que la fonction $f^{(C)}$, qui présente une discontinuité de dérivées à

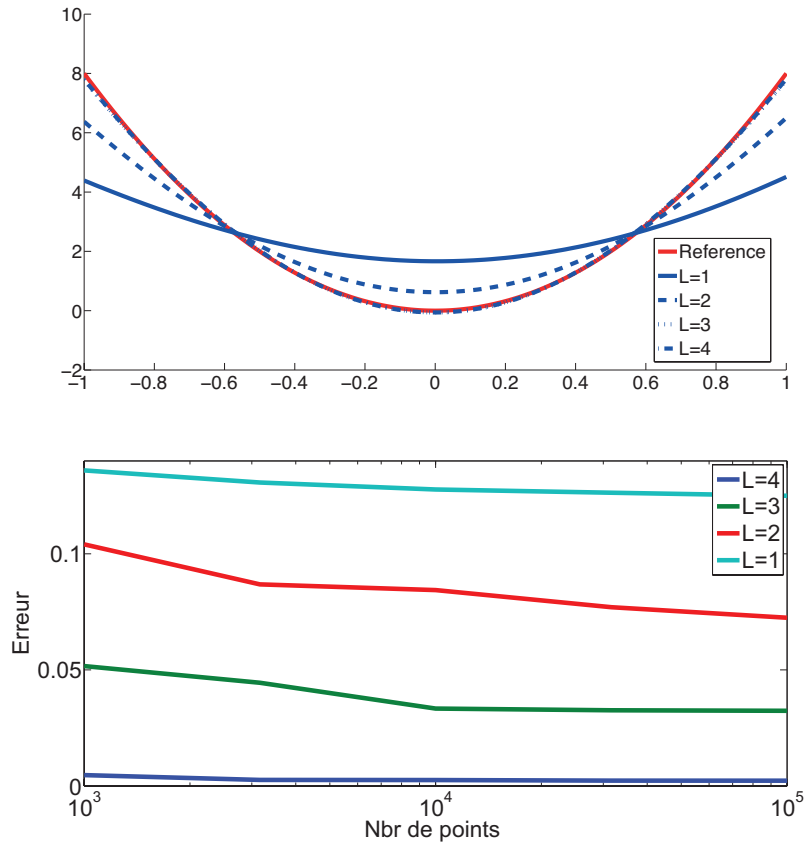


FIGURE 4.3 – Fonction $f^{(A)} = \sum_{i=1}^d x_i^2$, $D = 8$. Le paramètre $N = 2$ est fixé, L varie, le nombre de points d'échantillonnage est de $M = 10^5$; (a) Approximation pour $x_1 = x_2 \dots = x_D$; (b) Convergence de l'erreur par rapport au nombre de points échantillonnés.

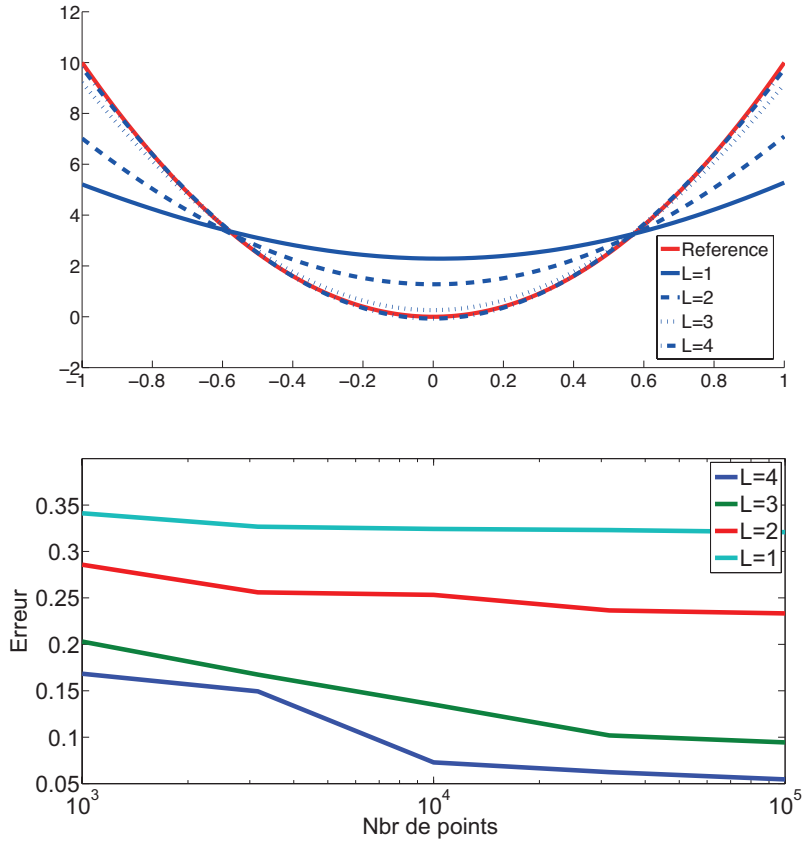


FIGURE 4.4 – Fonction $f^{(A)} = \sum_{i=1}^D x_i^2$, $D = 10$. Le paramètre $N = 4$ est fixé, L varie, le nombre de points d'échantillonnage est de $M = 10^5$; (a) Approximation pour $x_1 = x_2 \dots = x_D$; (b) Convergence de l'erreur par rapport au nombre de points échantillonnés.

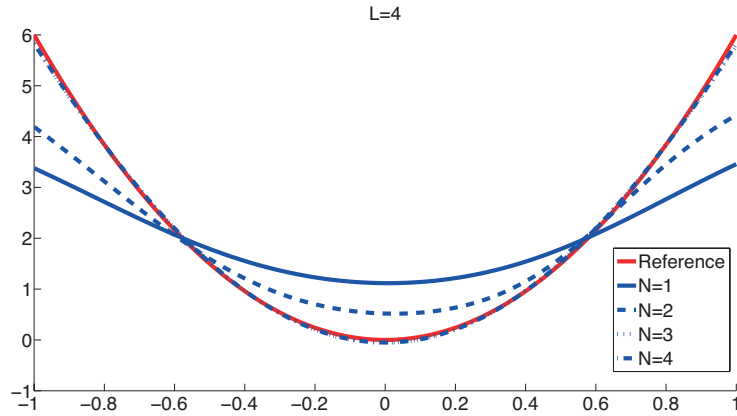


FIGURE 4.5 – Fonction $f^{(A)} = \sum_{i=1}^D x_i^2$, $D = 6$. Le paramètre $L = 4$ est fixé, N varie, le nombre de points d'échantillonnage est de $M = 10^5$; (a) Approximation pour $x_1 = x_2 \dots = x_D$; (b) Convergence de l'erreur par rapport au nombre de points échantillonnés.

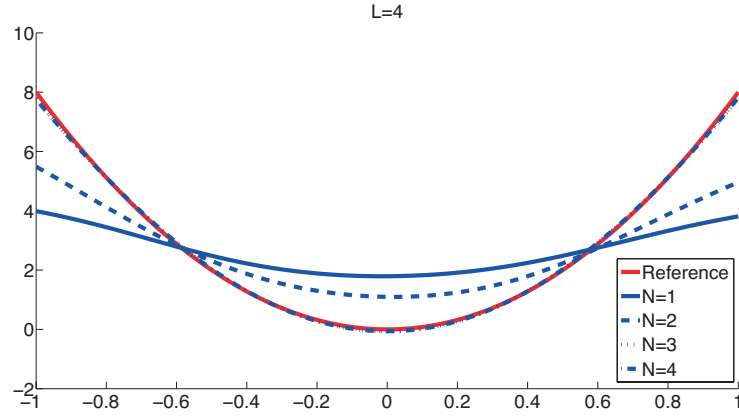


FIGURE 4.6 – Fonction $f^{(A)} = \sum_{i=1}^D x_i^2$, $D = 8$. Le paramètre $L = 4$ est fixé, N varie, le nombre de points d'échantillonnage est de $M = 10^5$; (a) Approximation pour $x_1 = x_2 \dots = x_D$; (b) Convergence de l'erreur par rapport au nombre de points échantillonnés.

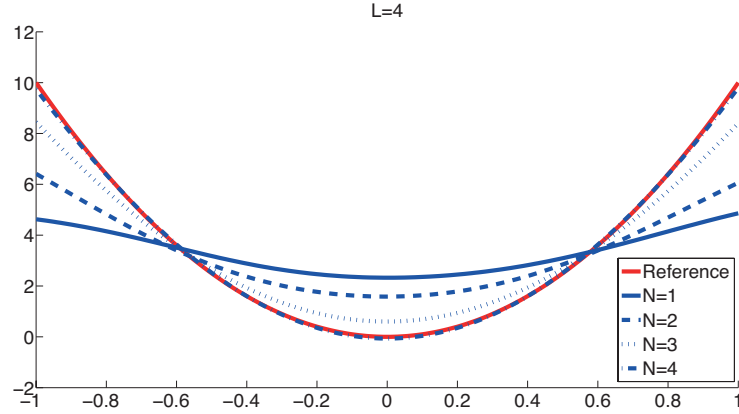


FIGURE 4.7 – Fonction $f^{(A)} = \sum_{i=1}^D x_i^2$, $D = 10$. Le paramètre $L = 4$ est fixé, N varie, le nombre de points d'échantillonnage est de $M = 10^5$; (a) Approximation pour $x_1 = x_2 \dots = x_D$; (b) Convergence de l'erreur par rapport au nombre de points échantillonnés.

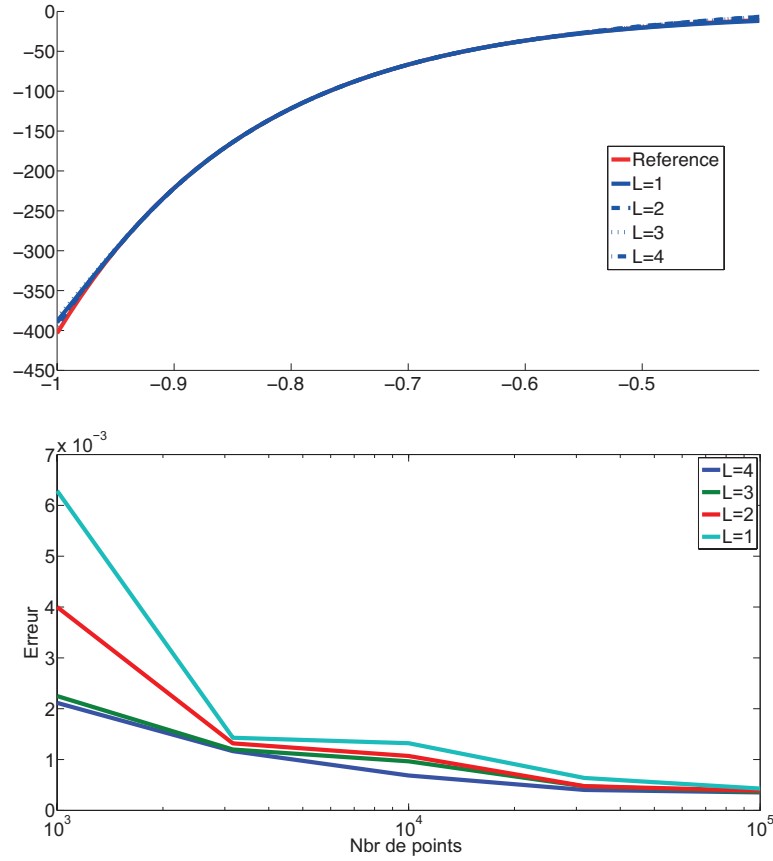


FIGURE 4.8 – Fonction $f^{(B)} = e^{-\sum_{i=1}^D x_i}$, $D = 6$. Le paramètre $N = 4$ est fixé, L varie, le nombre de points d'échantillonnage est de $M = 10^5$; (a) Approximation pour $x_1 = x_2 \dots = x_D$; (b) Convergence de l'erreur par rapport au nombre de points échantillonnés.

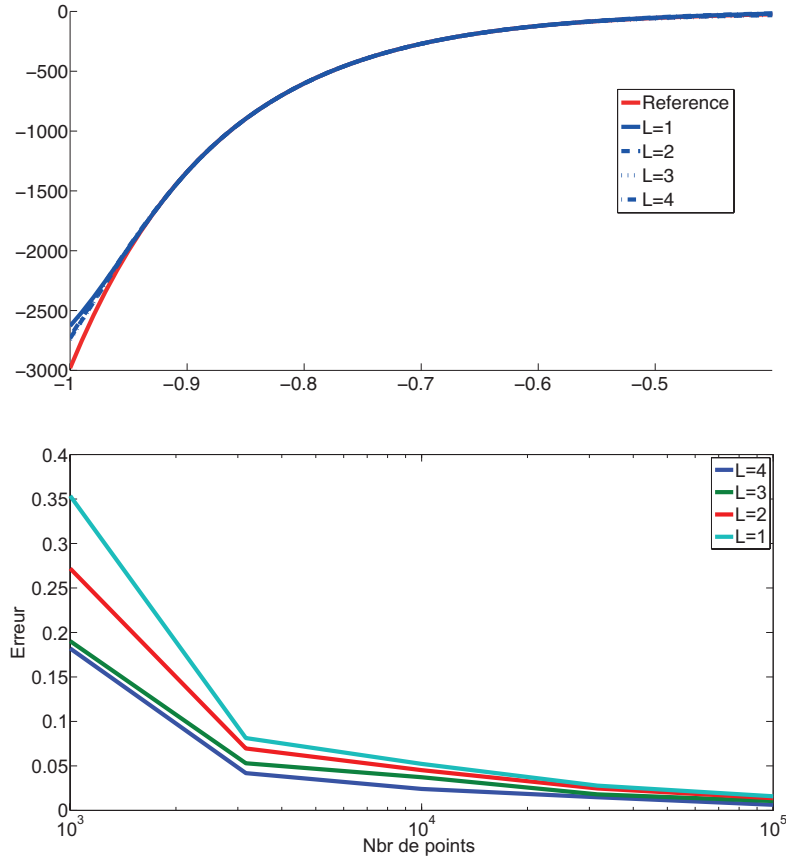


FIGURE 4.9 – Fonction $f^{(B)} = e^{-\sum_{i=1}^D x_i}$, $D = 8$. Le paramètre $N = 4$ est fixé, L varie, le nombre de points d'échantillonnage est de $M = 10^5$; (a) Approximation pour $x_1 = x_2 \dots = x_D$; (b) Convergence de l'erreur par rapport au nombre de points échantillonnés.

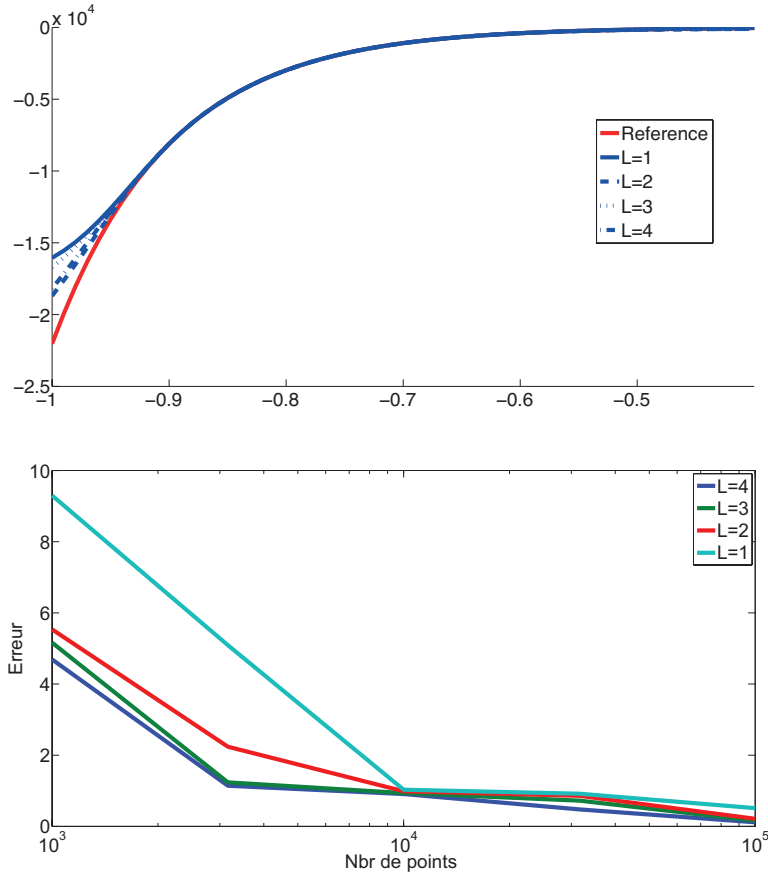


FIGURE 4.10 – Fonction $f^{(B)} = e^{-\sum_{i=1}^D x_i}$, $D = 10$. Le paramètre $N = 4$ est fixé, L varie, le nombre de points d'échantillonnage est de $M = 10^5$; (a) Approximation pour $x_1 = x_2 \dots = x_D$; (b) Convergence de l'erreur par rapport au nombre de points échantillonnés.

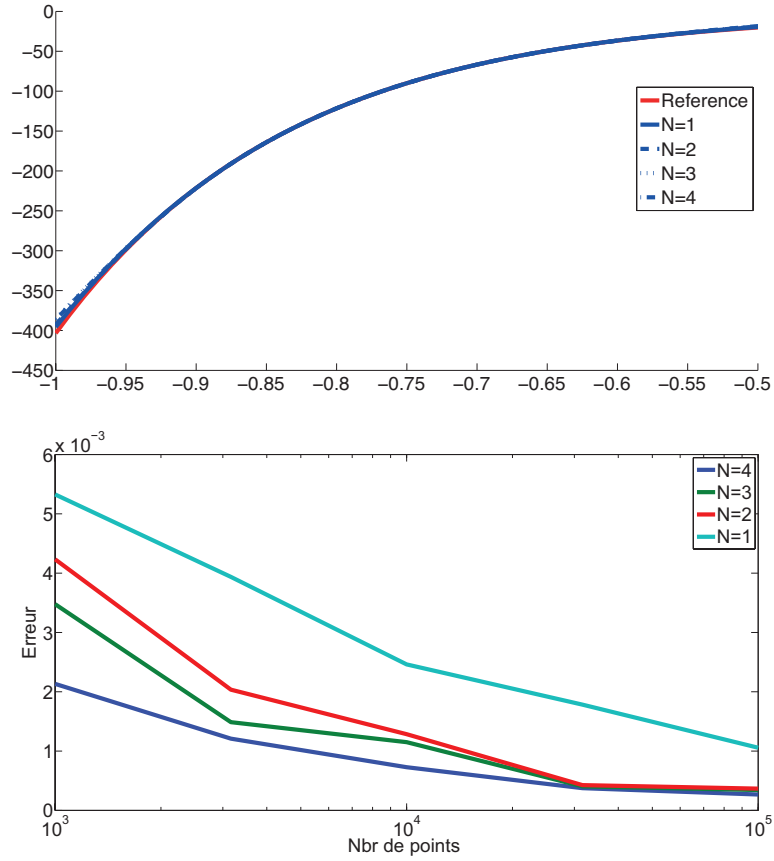


FIGURE 4.11 – Fonction $f^{(B)} = e^{-\sum_{i=1}^D x_i}$, $D = 6$. Le paramètre $L = 4$ est fixé, N varie, le nombre de points d'échantillonnage est de $M = 10^5$; (a) Approximation pour $x_1 = x_2 \dots = x_D$; (b) Convergence de l'erreur par rapport au nombre de points échantillonnés.

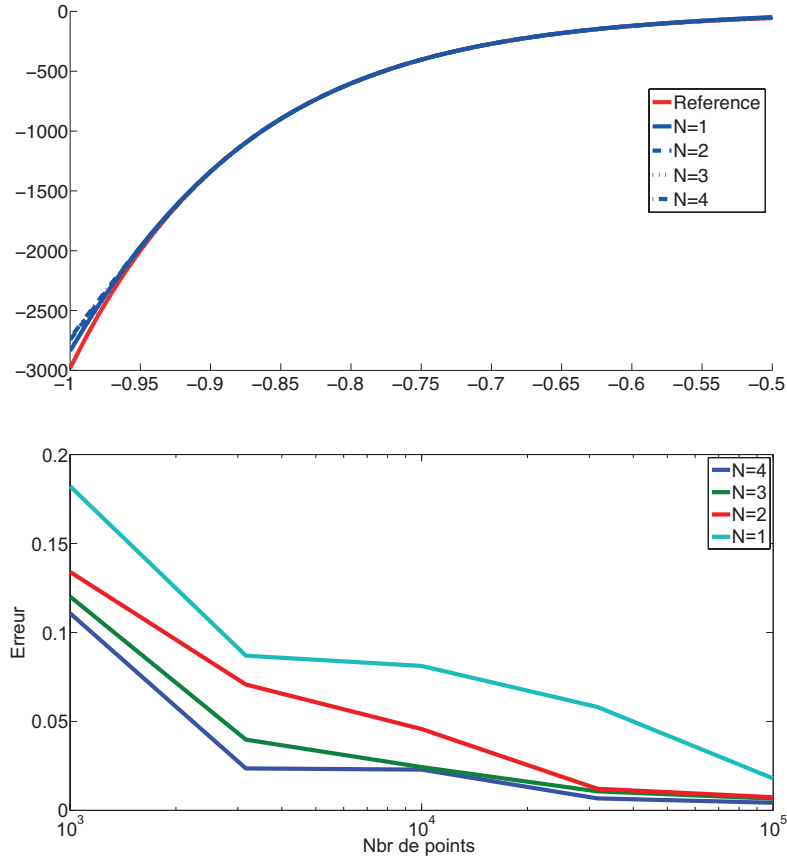


FIGURE 4.12 – Fonction $f^{(B)} = e^{-\sum_{i=1}^D x_i}$, $D = 8$. Le paramètre $L = 4$ est fixé, N varie, le nombre de points d'échantillonnage est de $M = 10^5$; (a) Approximation pour $x_1 = x_2 \dots = x_D$; (b) Convergence de l'erreur par rapport au nombre de points échantillonnés.

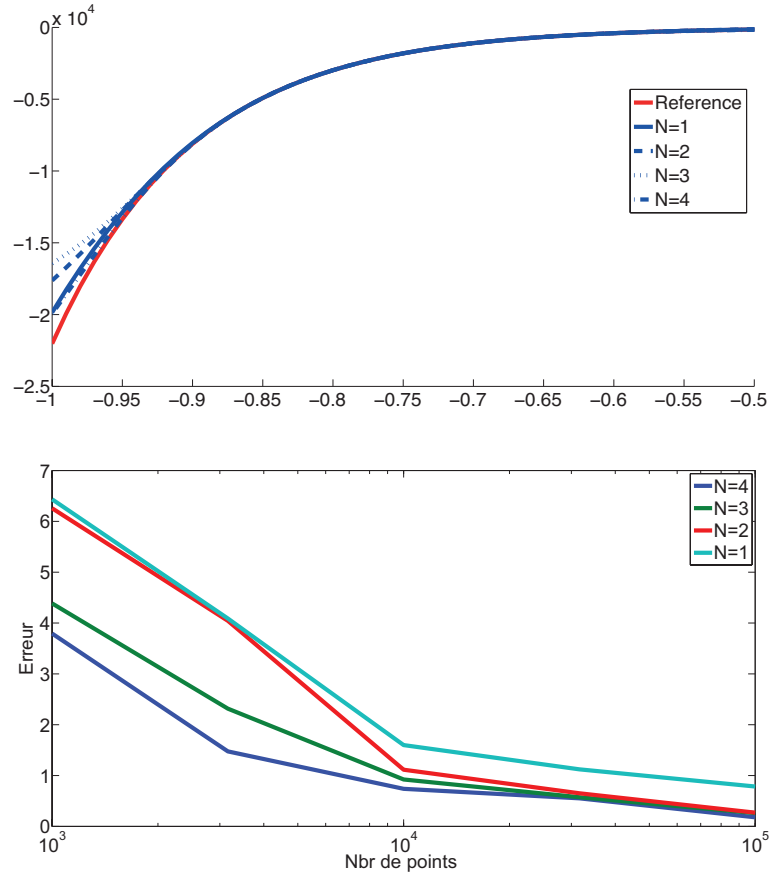


FIGURE 4.13 – Fonction $f^{(B)} = e^{-\sum_{i=1}^D x_i}$, $D = 10$. Le paramètre $L = 4$ est fixé, N varie, le nombre de points d'échantillonnage est de $M = 10^5$; (a) Approximation pour $x_1 = x_2 \dots = x_D$; (b) Convergence de l'erreur par rapport au nombre de points échantillonnés.

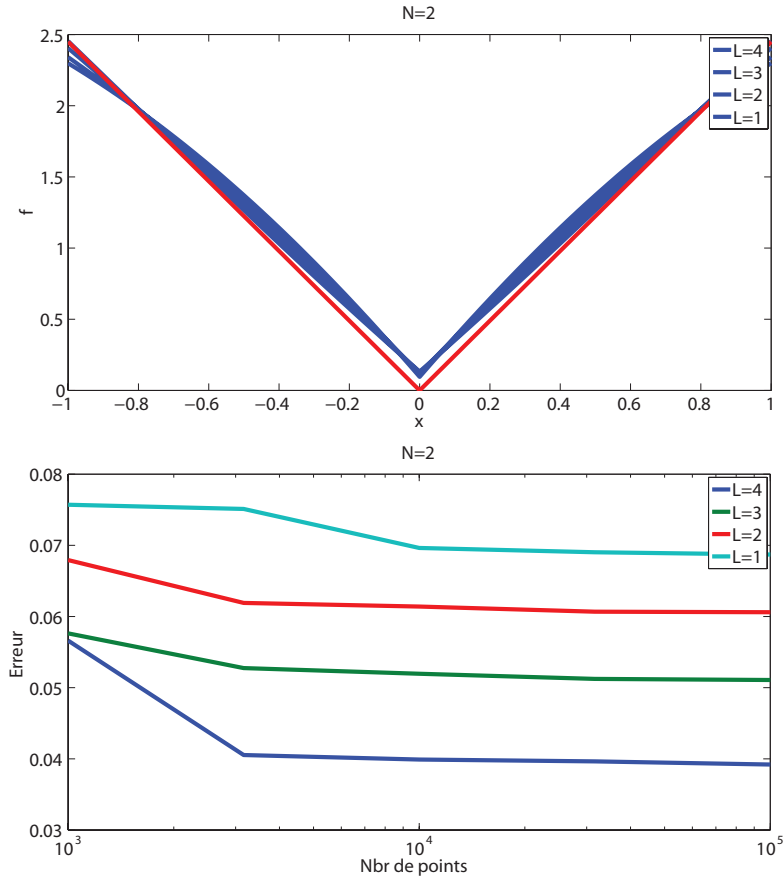


FIGURE 4.14 – Fonction $f^{(C)} = \sqrt{\sum_{i=1}^d x_i^2}$, $D = 6$. Le paramètre $N = 2$ est fixé, L varie, le nombre de points d'échantillonnage est de $M = 10^5$; (a) Approximation pour $x_1 = x_2 \dots = x_D$; (b) Convergence de l'erreur par rapport au nombre de points échantillonnés.

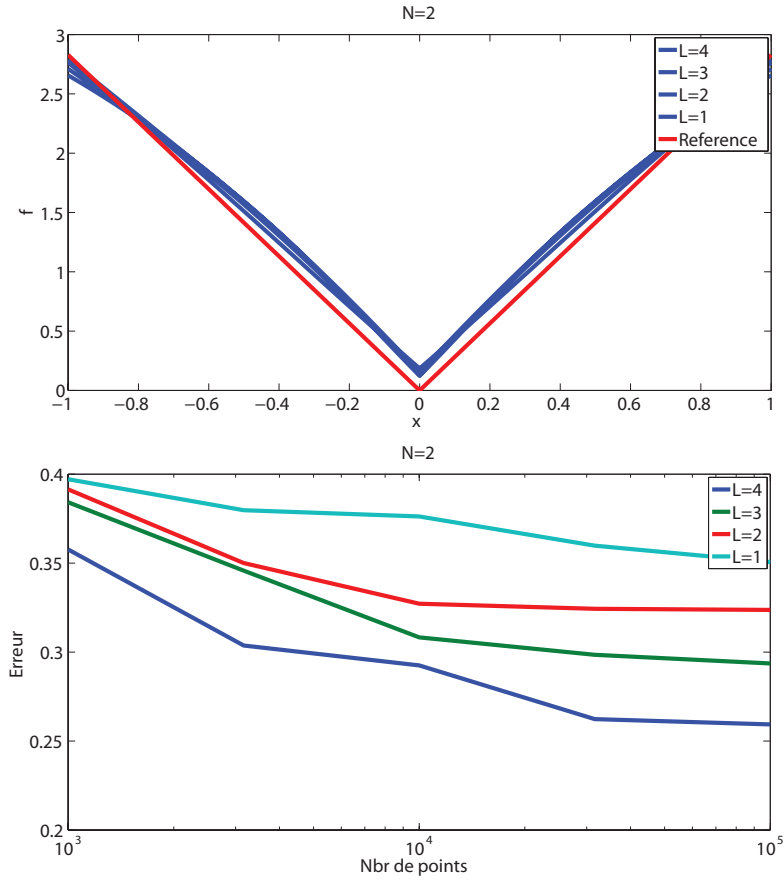


FIGURE 4.15 – Fonction $f^{(C)} = \sqrt{\sum_{i=1}^d x_i^2}$, $D = 8$. Le paramètre $N = 2$ est fixé, L varie, le nombre de points d'échantillonnage est de $M = 10^5$; (a) Approximation pour $x_1 = x_2 \dots = x_D$; (b) Convergence de l'erreur par rapport au nombre de points échantillonnés.

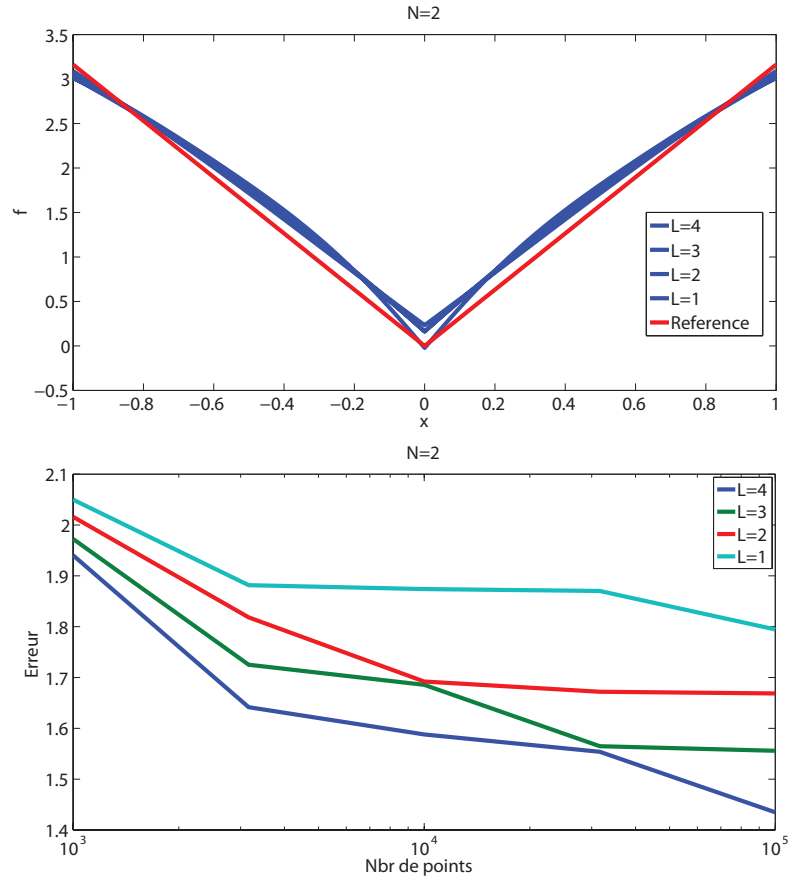


FIGURE 4.16 – Fonction $f^{(C)} = \sqrt{\sum_{i=1}^d x_i^2}$, $D = 10$. Le paramètre $N = 2$ est fixé, L varie, le nombre de points d'échantillonnage est de $M = 10^5$; (a) Approximation pour $x_1 = x_2 \dots = x_D$; (b) Convergence de l'erreur par rapport au nombre de points échantillonnés.

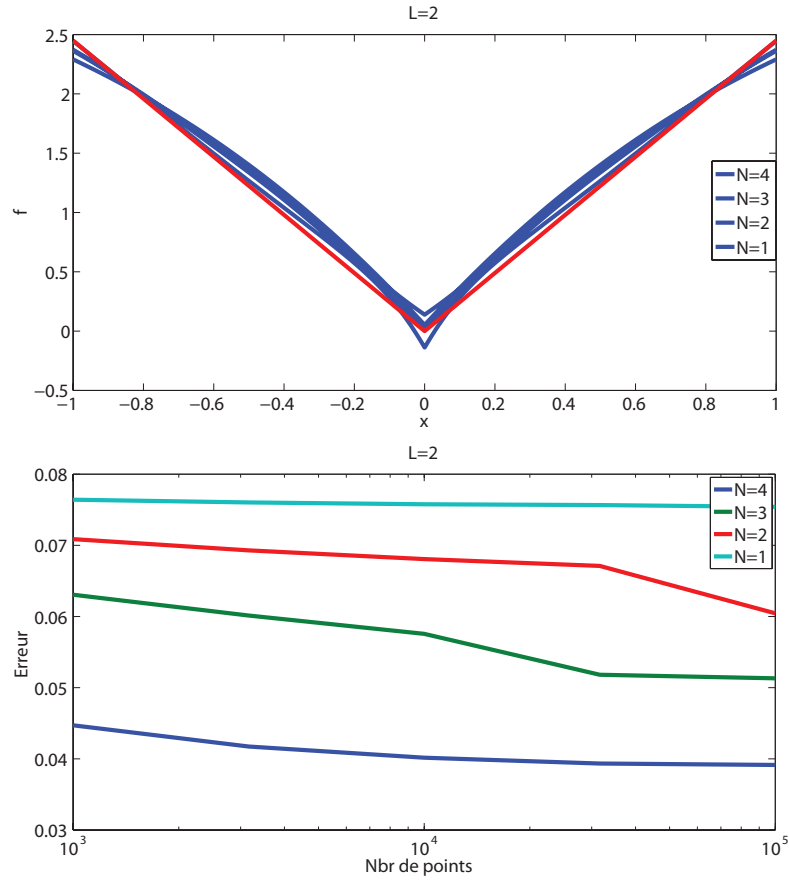


FIGURE 4.17 – Fonction $f^{(C)} = \sqrt{\sum_{i=1}^d x_i^2}$, $D = 6$. Le paramètre $L = 2$ est fixé, N varie, le nombre de points d'échantillonnage est de $M = 10^5$; (a) Approximation pour $x_1 = x_2 \dots = x_D$; (b) Convergence de l'erreur par rapport au nombre de points échantillonnés.

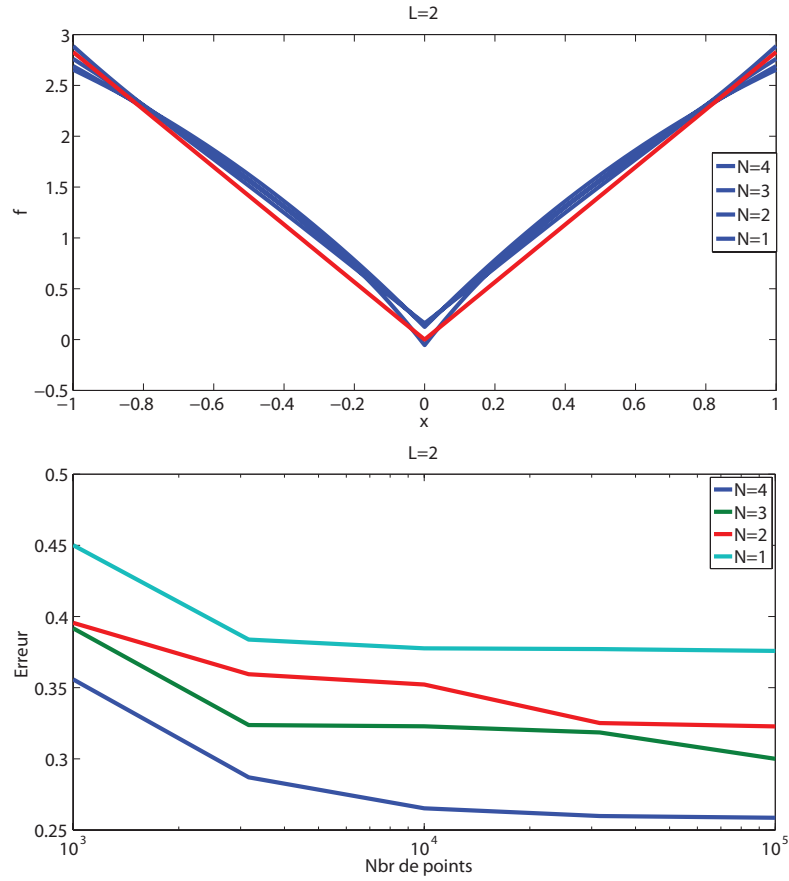


FIGURE 4.18 – Fonction $f^{(C)} = \sqrt{\sum_{i=1}^d x_i^2}$, $D = 8$. Le paramètre $L = 2$ est fixé, N varie, le nombre de points d'échantillonnage est de $M = 10^5$; (a) Approximation pour $x_1 = x_2 \dots = x_D$; (b) Convergence de l'erreur par rapport au nombre de points échantillonnés.

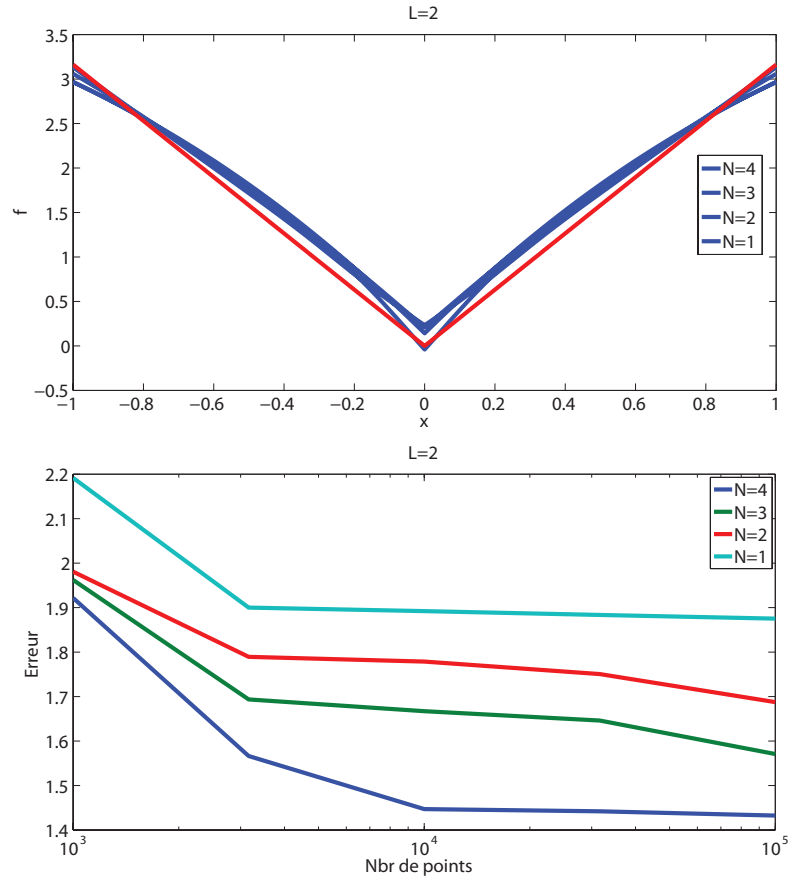


FIGURE 4.19 – Fonction $f^{(C)} = \sqrt{\sum_{i=1}^d x_i^2}$, $D = 10$. Le paramètre $L = 2$ est fixé, N varie, le nombre de points d'échantillonnage est de $M = 10^5$; (a) Approximation pour $x_1 = x_2 \dots = x_D$; (b) Convergence de l'erreur par rapport au nombre de points échantillonnés.

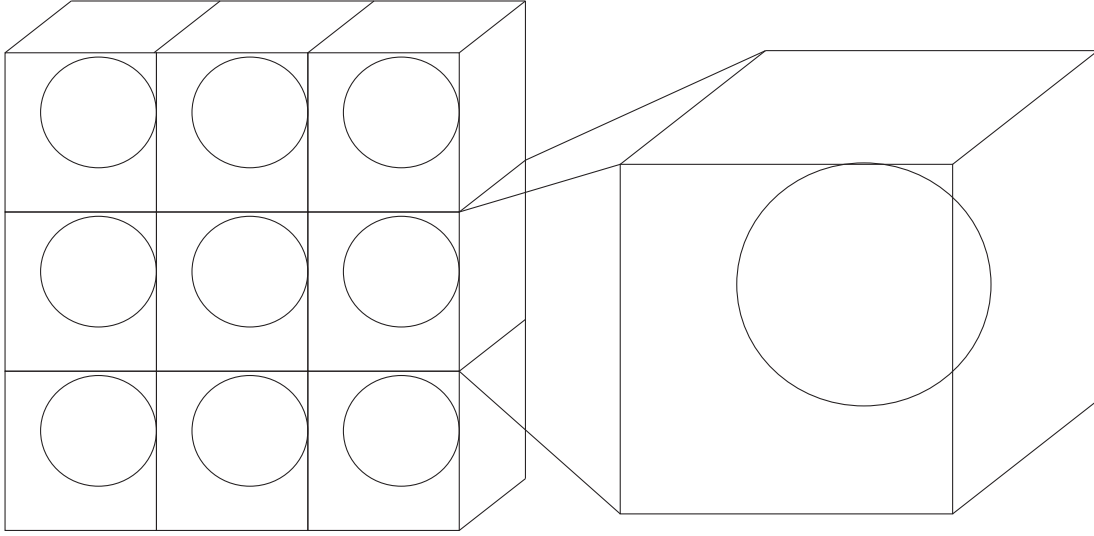


FIGURE 4.20 – Microstructure and VER du matériaux composites périodique

l'origine. Ce type d'approximation est difficile approximer avec des schémas d'interpolation continus tels que les splines multidimensionnelles qui possèdent une continuité C^2 . De plus, le nombre de points d'échantillonnage pouvant être réalisé aléatoirement dans l'espace paramétrique, et ce nombre n'augmentant pas exponentiellement avec la dimensionnalité, cette approximation permet de considérer des problèmes dans des espaces paramétriques de dimension de l'ordre de la dizaine, ce qui n'est pas concevable par les approximations basées sur des grilles régulières, comme présentées dans le paragraphe 4.3.2.

4.4.3 Homogénéisation d'un composite non linéaire compressible en petites déformations paramétré par des coefficients microscopiques

L'objectif de cet exemple est de construire un potentiel $\bar{w}$ associé à la loi de comportement effective d'un composite non linéaire. On considère un VER tri-dimensionnel comme représenté sur la figure 4.20. Des sphères périodiques sont réparties régulièrement sur un réseau cubique. Le comportement, supposé homogène dans chaque phase, est décrit par un potentiel de type loi puissance compressible de la forme :

$$w^{(r)} = \frac{9}{2} \kappa^{(r)} \varepsilon_m^2 + \frac{\varepsilon_0^{(r)} \sigma_0^{(r)}}{1 + m^{(r)}} \left(\frac{\varepsilon_{eq}}{\varepsilon_0^{(r)}} \right)^{1+m^{(r)}}. \quad (4.68)$$

Dans cette équation, $\varepsilon_m = \text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon})/3$; $\varepsilon_{eq} = \sqrt{2(\varepsilon_d : \varepsilon_d)/3}$ avec $\varepsilon_d = \boldsymbol{\varepsilon} - \varepsilon_m \mathbf{1}$ et $\mathbf{1}$ est le tenseur identité du second ordre. Les paramètres numériques sont choisis comme suit : $\sigma_0^1 = 1$ MPa, $\varepsilon_0^r = 1$, $m^r = 0.2$, $\kappa^r = 20$ MPa. La relation contrainte-déformation est donnée par :

$$\sigma = \frac{\partial w^{(r)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} = \kappa^{(r)} Tr(\varepsilon) \mathbf{1} + \frac{2}{3} \frac{\sigma_0^{(r)}}{\varepsilon_0^{(r)}} \left(\frac{\varepsilon_{eq}}{\varepsilon_0^{(r)}} \right)^{m^{(r)}-1} \varepsilon_d \quad (4.69)$$

En plus de décrire le potentiel dans l'espace des déformations macroscopiques $\bar{\varepsilon}_i$, $i = 1, \dots, 6$ (en notation de Voigt), nous proposons de décrire le comportement en fonctions de trois autres paramètres : la fraction volumique f , l'exposant m et le coefficient σ_0^2 associé à la matrice. Le potentiel construit est donc défini dans un espace de dimension $D = 9$. On pose :

$$\bar{\mathbf{x}} = \{\bar{x}_1, \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_9\} = \{\bar{\varepsilon}_1, \bar{\varepsilon}_2, \dots, \bar{\varepsilon}_6, f, m, \sigma_0^2\}. \quad (4.70)$$

Le potentiel effectif $\bar{\omega}$ est approximé par des fonctions de type réseaux de neurones :

$$\bar{\omega}(\bar{\varepsilon}_1, \bar{\varepsilon}_2, \dots, \bar{\varepsilon}_6, f, m, \sigma_0^2) = \sum_{i=1}^L f_i^{NN}(y_1^i, y_2^i, \dots, y_d^i). \quad (4.71)$$

La contrainte macroscopique est alors exprimée par :

$$\bar{\sigma}_i(\bar{\varepsilon}_1, \bar{\varepsilon}_2, \dots, \bar{\varepsilon}_6, f, m, \sigma_0^2) = \frac{\partial \bar{\omega}(\bar{\varepsilon}_1, \bar{\varepsilon}_2, \dots, \bar{\varepsilon}_6, f, m, \sigma_0^2)}{\partial \bar{\varepsilon}_i} \quad i = 1, \dots, 6. \quad (4.72)$$

Le module tangent effectif $\bar{\mathbb{M}}$ est exprimé par :

$$\bar{M}_{ij}(\bar{\varepsilon}_1, \bar{\varepsilon}_2, \dots, \bar{\varepsilon}_6, f, m, \sigma_0^2) = \frac{\partial^2 \bar{\omega}(\bar{\varepsilon}_1, \bar{\varepsilon}_2, \dots, \bar{\varepsilon}_6, f, m, \sigma_0^2)}{\partial \bar{\varepsilon}_i \partial \bar{\varepsilon}_j} \quad i, j = 1, \dots, 6. \quad (4.73)$$

En utilisant l'approximation (4.60), (4.62), nous pouvons exprimer les dérivées de l'approximation NN de la façon suivante. En posant :

$$h^n(\mathbf{y}^i) = c_n^i g(\mathbf{w}^n \cdot \mathbf{y}^i + d_n^i) \quad (4.74)$$

on a :

$$\frac{\partial \tilde{f}(\mathbf{x})}{\partial x_i} = \sum_{i=1}^L \sum_{n=1}^N \sum_k \frac{\partial h^n}{\partial y_k^i} \frac{\partial y_k^i}{\partial x_i}. \quad (4.75)$$

On aboutit à l'expression des contraintes :

$$\bar{\sigma}_i = \frac{\partial \tilde{f}(\mathbf{x})}{\partial x_i} = \sum_{i=1}^L \sum_{n=1}^N \sum_k 4c_n^i w_k^n A_{ki}^i \frac{e^{-2(\mathbf{w}^n \cdot \mathbf{y}^i + d_n^i)}}{(1 + e^{-2\mathbf{w}^n \cdot \mathbf{y}^i})^2}, \quad i = 1, \dots, 6 \quad (4.76)$$

De manière similaire, on obtient les composantes du tenseur élastique tangent comme les dérivées secondes de l'approximation :

$$\overline{M}_{ij} = \frac{\partial^2 \tilde{f}(\mathbf{x})}{\partial x_i \partial x_j} = \sum_{i=1}^L \sum_{n=1}^N \sum_k \sum_l \frac{\partial^2 h^n}{\partial y_l^j \partial y_k^i} c_n^i w_l^n w_k^n A_{ki}^i A_{lj}^j, \quad i = 1, 2, \dots, 6, \quad j = 1, 2, \dots, 6 \quad (4.77)$$

avec

$$\frac{\partial^2 h^n}{\partial y_l^j \partial y_k^i} = 16 \frac{e^{-4(\mathbf{w}^n \cdot \mathbf{y}^i + d_n^i)}}{(1 + e^{-2\mathbf{w}^n \cdot \mathbf{y}^i})^3} - 8 \frac{e^{-2(\mathbf{w}^n \cdot \mathbf{y}^i + d_n^i)}}{(1 + e^{-2\mathbf{w}^n \cdot \mathbf{y}^i})^2}. \quad (4.78)$$

Pour la construction du potentiel, nous avons choisi $d = 3$, $L = N = 6$ et $M = 7.10^6$ points aléatoires. Nous présentons dans la suite des comparaisons entre l'évaluation des composantes des contraintes effectives et de l'opérateur tangent effectif obtenues à l'aide du potentiel numérique construit par approximation NN et la solution de référence, produite par un calcul direct sur le VER. Dans un premier exemple, nous fixons : $\sigma_0^2/\sigma_0^1 = 10$; $m = 0.3$, $f = 0.035$. On impose un étirement uniaxial en faisant varier la composante $\bar{\varepsilon}_{11}$ seule. Les résultats, présentés dans la figure 4.21, montrent un très bon accord entre la solution évaluée et la solution de référence, à la fois pour les contraintes et les composantes de l'opérateur tangent effectif, ce qui est très important pour la convergence des calculs de structures associés au modèle homogénéisé dans un schéma de résolution de type Newton-Raphson.

Dans un deuxième cas, nous imposons un chargement plus complexe combinant étirement et cisaillement. Les paramètres σ_0^2/σ_0^1 ; m et $f = 0.035$ possèdent les mêmes valeurs que précédemment, mais nous faisons ici varier simultanément $\bar{\varepsilon}_{11}$ et $\bar{\varepsilon}_{12}$. Les résultats sont présentés dans la figure 4.22, montrant encore ici un très bon accord avec la solution de référence.

Par la suite, nous exploitons la description explicite du potentiel par rapport aux paramètres microstructuraux m , f et σ_0^2/σ_0^1 . Nous fixons $\bar{\varepsilon}_{11} = \bar{\varepsilon}_{12} = 10^{-3}$, toutes les autres composantes de déformations macroscopiques nulles, fixons $\sigma_0^2/\sigma_0^1 = 10$, $f = 0.035$ et faisons varier l'indice m . Les résultats sont présentés dans la figure 4.23, montrant ici encore un très bon accord avec la solution de référence.

Dans le cas suivant, nous fixons $m = 0.55$, $f = 0.035$ et gardons les mêmes valeurs que précédemment pour les autres paramètres, et faisons varier le paramètre de l'inclusion σ_0^2 . Les résultats sont présentés dans la figure 4.24.

4.4.4 Calcul de structure hétérogène non linéaire

Dans cet exemple, nous utilisons le potentiel construit précédemment pour réaliser un calcul de structure. Le matériau est supposé associé au modèle homogénéisé décrit par le potentiel précédent. La géométrie et les conditions aux limites du problème sont illustrés dans la figure 4.25 a). Les dimensions de la structure sont $H = 3$ m, $L = 2$ m, $w = 1$ m, $a = 1$ m. Lors du calcul non linéaire, les contraintes et composantes du tenseur élastiques nécessaires pour résoudre le problème dans l'algorithme de Newton-Raphson sont fournies par les relations (4.76) et (4.77). Les paramètres sont $\sigma_0^2/\sigma_0^1 = 10$; $m = 0.3$, $f = 0.035$. Les déformations de la structure sont indiquées dans la figure 4.27, démontrant la

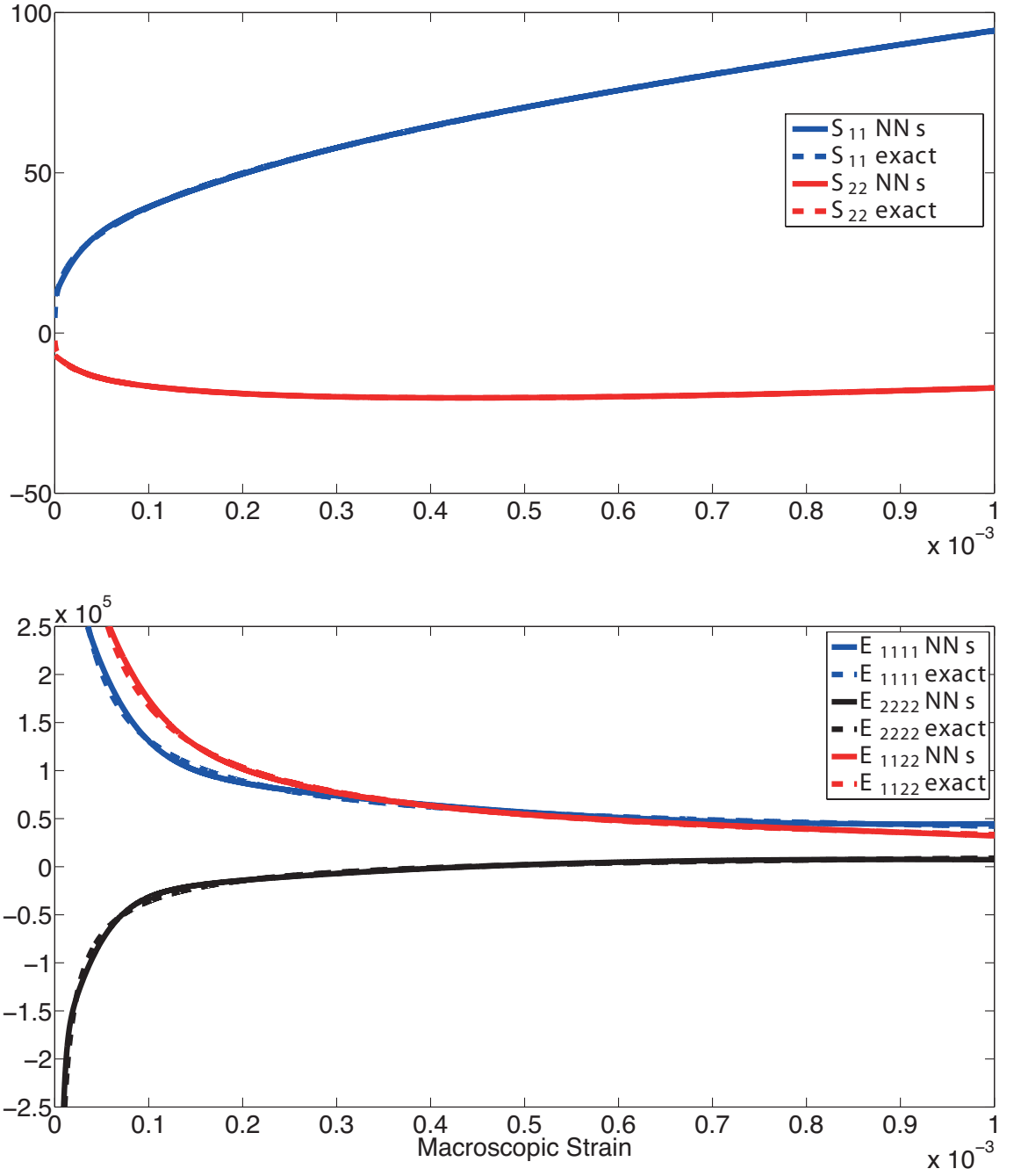


FIGURE 4.21 – Contraintes et composantes du tenseur élastique effectifs pour un étirement uniaxial ($\bar{\varepsilon}_{11}$ varie, $\sigma_0^2/\sigma_0^1 = 10$; $m = 0.3$, $f = 0.035$).

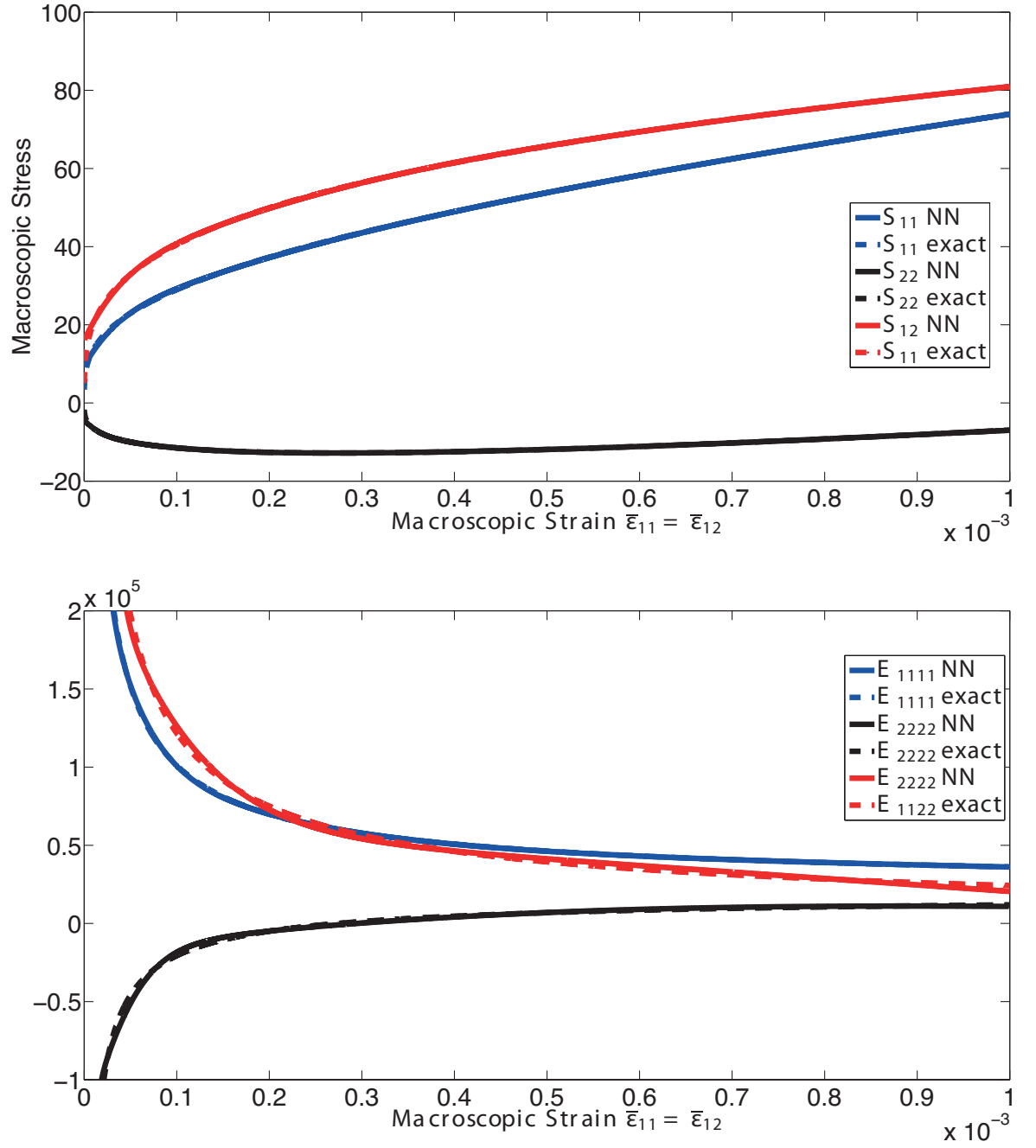


FIGURE 4.22 – Contraintes et composantes du tenseur élastique effectifs pour un chargement complexe ($\bar{\epsilon}_{11} = \bar{\epsilon}_{12}$ varie, $\sigma_0^2/\sigma_0^1 = 10$; $m = 0.3$, $f = 0.035$).

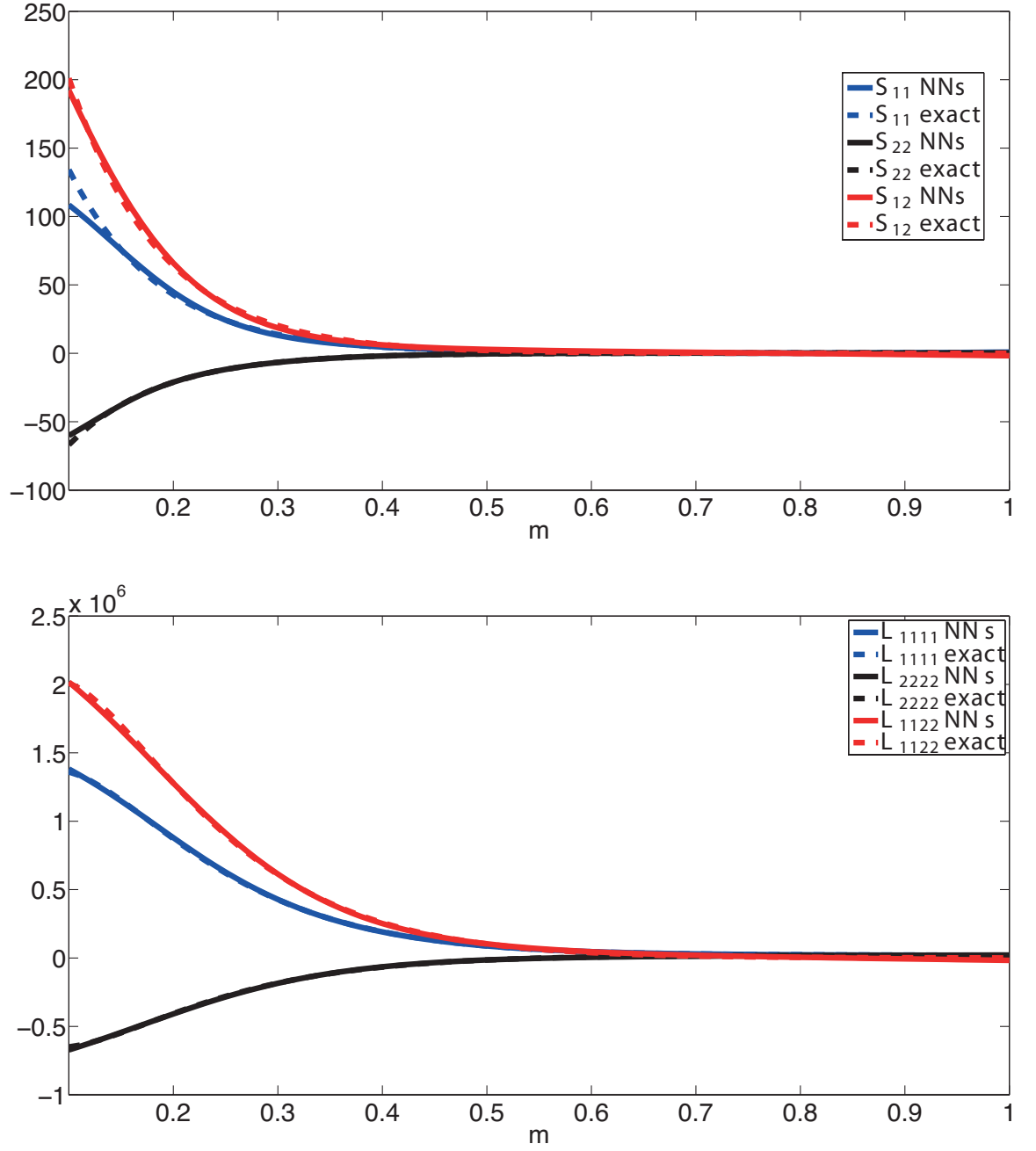


FIGURE 4.23 – Contraintes et composantes du tenseur élastique effectifs pour $\bar{\varepsilon}_{11} = \bar{\varepsilon}_{12} = 10^{-3}$, $\sigma_0^2/\sigma_0^1 = 10$, $f = 0.035$, pour une évolution de m .

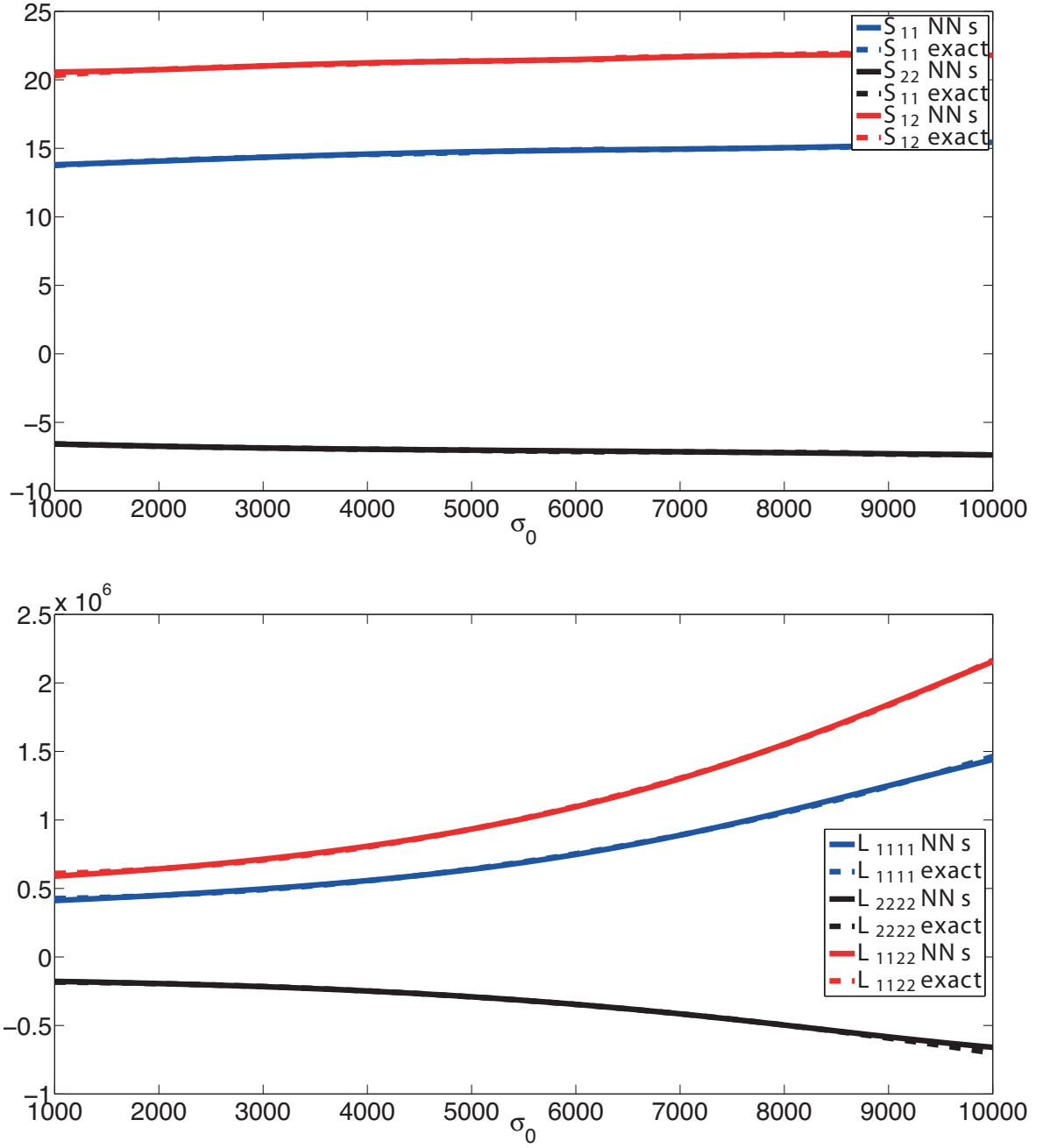


FIGURE 4.24 – Contraintes et composantes du tenseur élastique effectifs pour u $\bar{\varepsilon}_{11} = \bar{\varepsilon}_{12} = 10^{-3}$, $m = 0.55$, $f = 0.035$, et σ_0^2 varie.

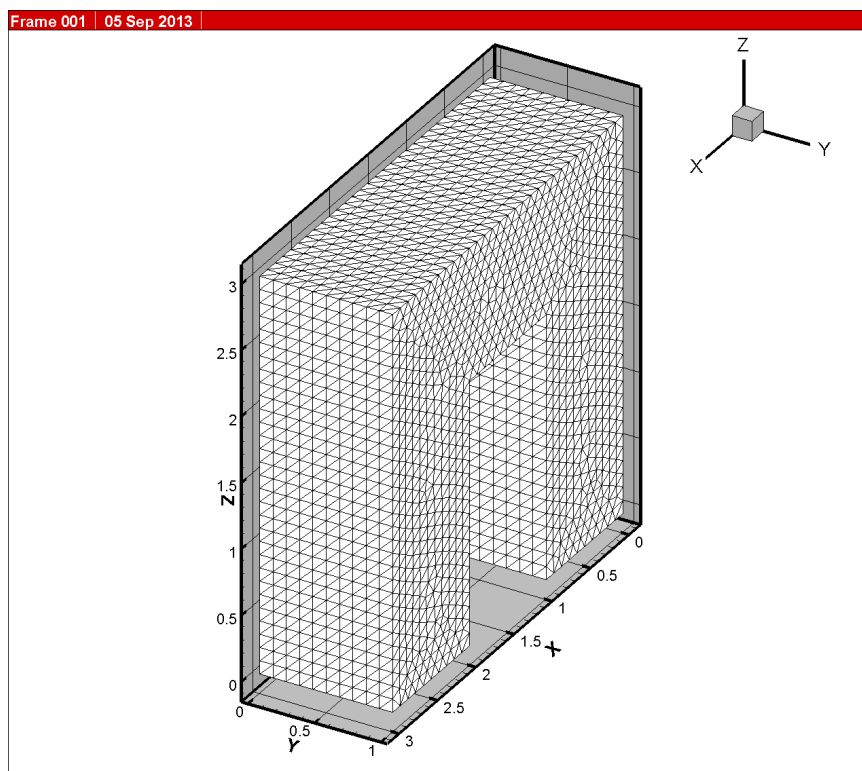
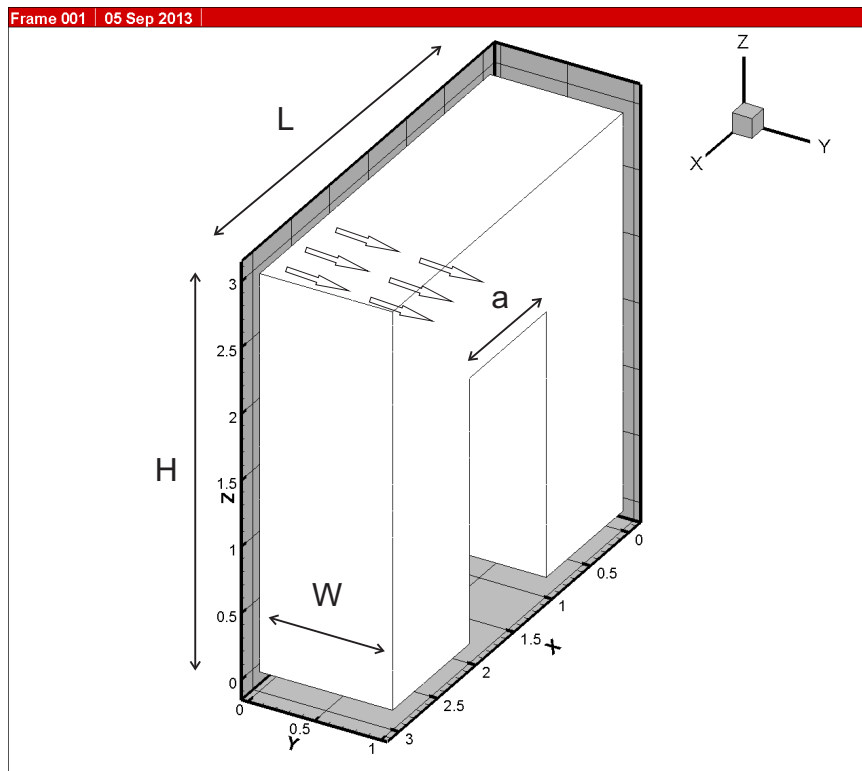


FIGURE 4.25 – Calcul de structure utilisant le modèle homogénéisé construit par potentiel numérique : géométrie, conditions aux limites et maillage.

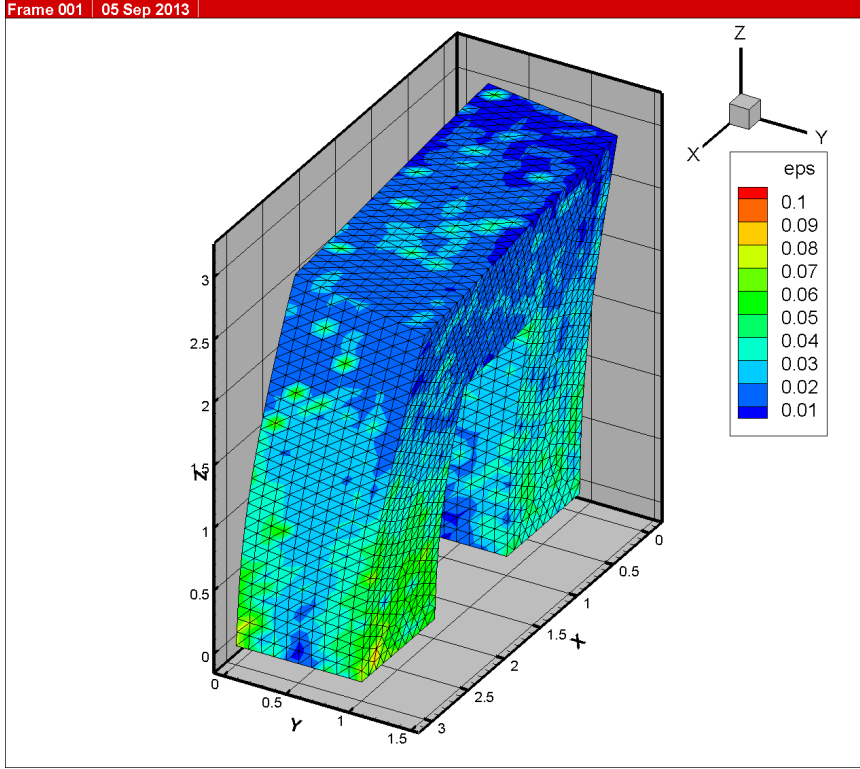


FIGURE 4.26 – Calcul de structure utilisant le modèle homogénéisé construit par potentiel numérique : déformée de la structure et champ de déformations.

faisabilité de cette méthode pour le calcul de structures hétérogènes non linéaires tridimensionnelles.

4.4.5 Exemples en grandes déformations

On considère finalement un exemple d'homogénéisation en grandes déformations hyperélastiques. Un VER tridimensionnel est considéré, dont la géométrie est identique à celle présentée dans la figure 4.20. Les lois de comportement locales sont supposées être de type Néo-Hookéen, décrite par un potentiel sous la forme

$$\Psi(\mathbf{C}) = \frac{1}{2}\lambda(\log(J))^2 - \mu\log(J) + \frac{1}{2}\mu(\text{Tr}(\mathbf{C}) - 1) \quad (4.79)$$

et conduisant à l'expression suivante pour les contraintes :

$$\mathbf{S} = \lambda\log(J)\mathbf{C}^{-1} + \mu(\mathbf{1} - \mathbf{C}^{-1}) \quad (4.80)$$

Les paramètres des phases sont les suivants : $E_m = 500$ MPa, $\nu_m = 0.4$, $E_i = 5000$ MPa, $\nu_i = 0.4$, les indices correspondant à la matrice et aux inclusions, respectivement. Nous construisons le potentiel effectif en utilisant une approximation par réseaux de neurones à partir de calculs préliminaires, en utilisant la procédure décrite précédemment. Pour chaque valeur des composantes de déformations macroscopiques $\bar{\mathbf{C}}$, les conditions aux limites (4.27) sont appliquées

et le problème (4.26) résolu par éléments finis. Le potentiel, ici défini en fonction des composantes de déformation macroscopiques $\bar{\mathbf{C}}$, est défini dans un espace de dimension $D = 6$. La valeur du potentiel effectif est déterminée par (4.24). Pour évaluer la qualité du modèle homogénéisé construit, nous évaluons le potentiel et les contraintes effectives pour plusieurs trajets de chargements. Pour le premier chargement, la seule composante $\bar{C}_1$ varie entre 0.8 et 1.2, $\bar{C}_2 = \bar{C}_3 = 1$, et toutes les autres composantes sont maintenues à zéro, correspondant à un étirement uniaxial. Les résultats sont présentés dans la figure 4.27, et montrent un très bon accord entre la solution obtenue par le modèle issu du potentiel numérique et la solution de référence, obtenue par un calcul direct.

Dans un second exemple, un étirement biaxial est étudié. Pour cela, $\bar{C}_1 = \bar{C}_2$ varient entre 0.8 et 1.2, $\bar{C}_3 = 1$ et toutes les autres composantes sont maintenues à zéro. Les résultats sont présentés dans la figure 4.28, et montrent à nouveau un très bon accord entre la solution obtenue par le modèle issu du potentiel numérique et la solution de référence..

4.5 Conclusion

Dans cette section, nous avons introduit une seconde contribution nouvelle, consistant en une méthode d'homogénéisation numérique pour les composites non linéaires élastiques, basée sur la construction de potentiels numériques associés au comportement effectif, en utilisant une approximation de type réseaux de neurones artificiels. Cette approximation possède les avantages suivants par rapport à des méthodes d'interpolation basées sur des grilles régulières multidimensionnelles : (a) les points d'échantillonnage peuvent être répartis aléatoirement dans l'espace paramétrique ; (b) pour une erreur fixée, le nombre de points d'échantillonnage n'augmente pas exponentiellement avec la dimension, et permet de traiter des problèmes paramétrés dans des espaces de dimensions de l'ordre de la dizaine. La forme de l'approximation obtenue est analytique et compacte, et son évaluation est d'un coût négligeable. Enfin, l'évaluation de ses dérivées se fait de manière analytique. Nous avons montré au travers d'un grand nombre d'exemples la qualité de cette méthode et ses potentialités. En particulier, nous avons appliqué la technique à la construction de potentiels associés à des VER 3D dont les comportements sont non linéaires élastiques, en petites et grandes déformations. Nous avons de plus construit des potentiels paramétrés par rapport aux valeurs des coefficients locaux matériaux (fractions volumiques et propriétés locales), permettant d'envisager des optimisations de microstructures par rapport à la réponse non linéaire de structures associées, ce qui à notre connaissance n'a encore jamais été réalisé. La méthodologie proposée constitue donc une réelle avancée dans le cadre des méthodes d'homogénéisation numériques.

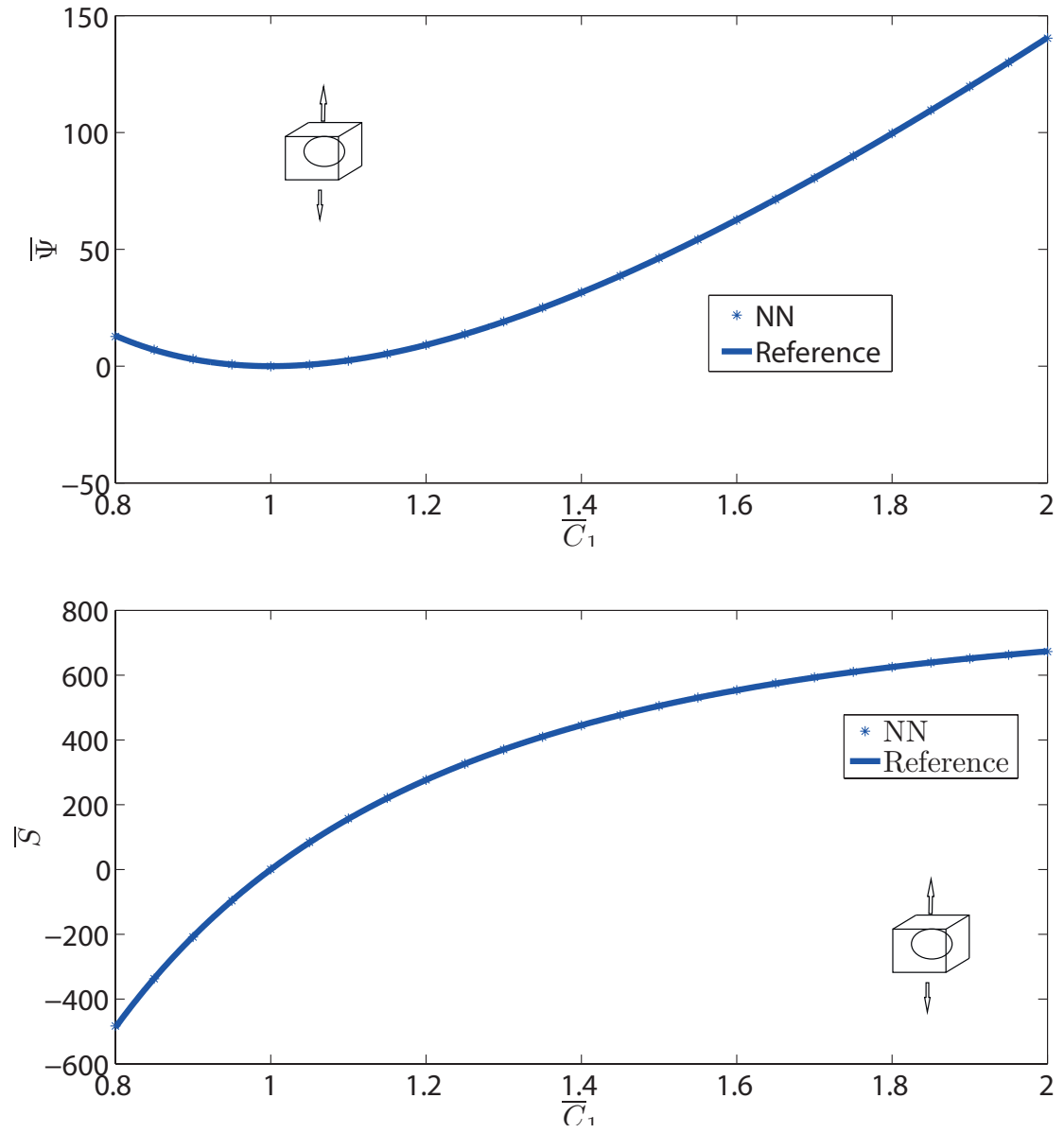


FIGURE 4.27 – Potentiel macroscopique et contraintes effectives pour le problème en grandes transformations, cas d'étirement uniaxial.

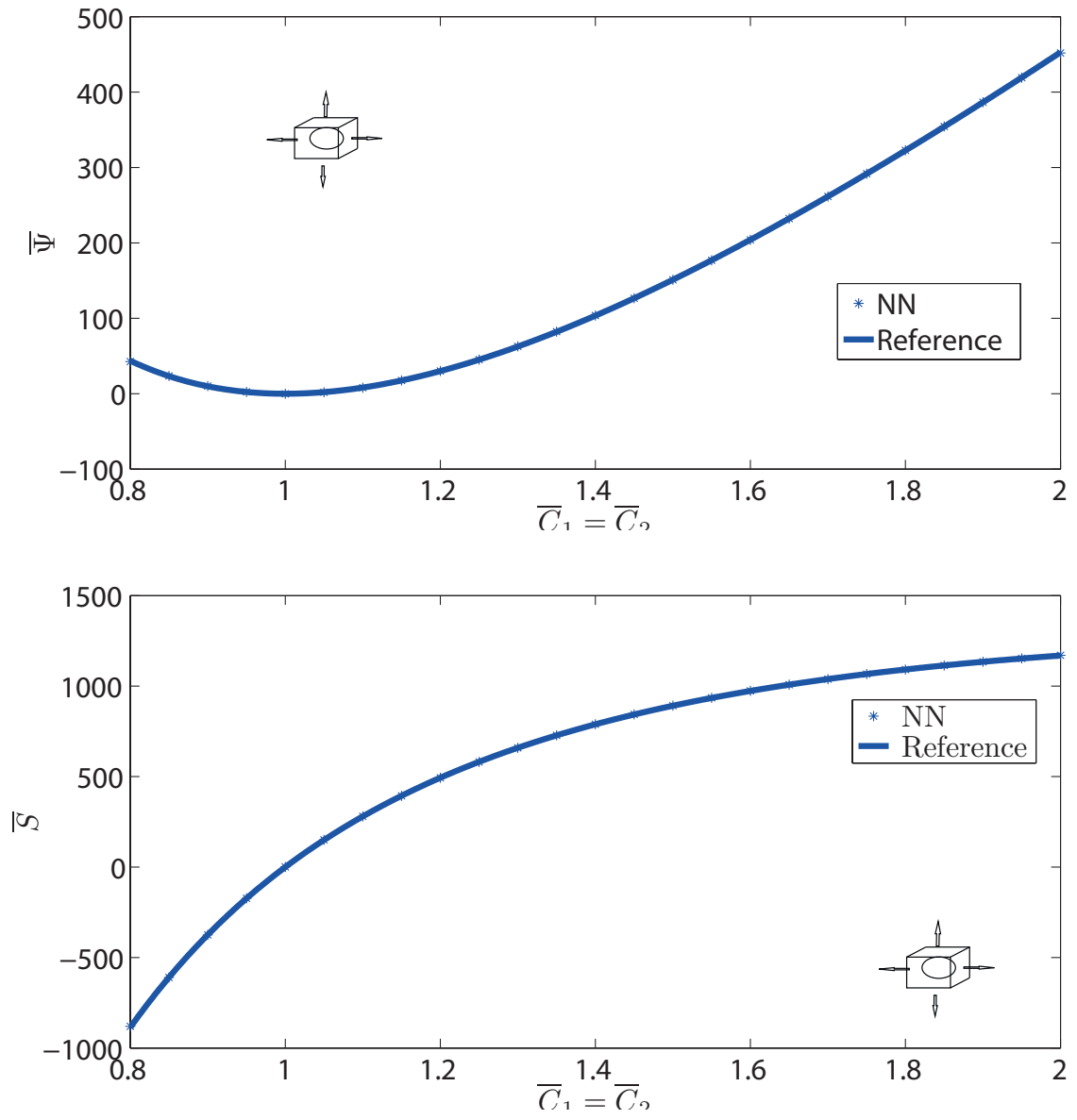


FIGURE 4.28 – Potentiel macroscopique en grande déformation

Conclusion et perspectives

4.5.1 Conclusion

Dans cette thèse, nous avons proposé principalement deux contributions aux méthodes numériques pour l'homogénéisation des matériaux hétérogènes non linéaires, dans les cas élastoplastiques et non linéaires élastiques en petites et grandes déformations.

La première contribution est une extension de la méthode NTFA au cas des matériaux hétérogènes avec des phases élastoplastiques parfaites. Nous avons proposé un nouveau schéma permettant l'actualisation des variables internes macroscopiques associées à des champs plastiques microscopiques représentatifs. Ce schéma est basé sur le principe de dissipation plastique maximum pour l'échelle macroscopique, où le problème de maximisation sous contrainte d'inégalité est remplacé par un schéma itératif mettant en jeu un problème de minimisation sous contrainte à chaque itération. Le schéma proposé, qui utilise des calculs éléments finis pour extraire les champs plastiques représentatifs par la méthode POD sur un VER associé à la microstructure, permet des approximations de qualité satisfaisante pour un faible nombre de modes, pour des microstructures périodiques dont la morphologie peut être complexe ou anisotrope. Nous avons testé la qualité de cette méthode au travers d'exemples mettant en jeu des microstructures périodiques avec inclusions rigides ou des pores, et pour des microstructures anisotropes. Une technique de représentation de la fonction d'écoulement macroscopique a été introduite pour éviter de réévaluer celle-ci par post-traitement sur le modèle élément fini associé au VER au cours du calcul macroscopique. Bien que les résultats soient satisfaisants en terme de qualité pour certains cas, des problèmes d'instabilité du schéma numérique proposé subsistent. Des analyses complémentaires seront nécessaires pour déterminer la cause de ces instabilités et déterminer une solution. Nous avons constaté que l'utilisation de la fonction d'écoulement en représentation atténuait ces problèmes. Par rapport à une méthode de type éléments finis multi-niveaux (FE^2), il n'est plus nécessaire de résoudre dans chaque point d'intégration du maillage macroscopique un problème non linéaire, ni de stocker toutes les variables internes associées à chaque élément de tous les maillages microscopiques des VERs. Dans la méthode proposée, seules les variables internes associées aux champs de déformations plastiques représentatifs extraits par POD doivent être stockées dans les points d'intégration (de l'ordre de 2 ou 3), et tous les opérateurs nécessaires pour évaluer le comportement macroscopique peuvent être évalués lors de calculs préliminaires. Bien que des études soient encore nécessaires pour déterminer la cause de certains problèmes de divergence des calculs, la méthode semble donc prometteuse.

La seconde contribution de cette thèse est le développement d'une technique de représentation de fonctions en grandes dimensions en utilisant des approximations

basées sur des réseaux de neurones artificiels, pour l'homogénéisation des composites non linéaires élastiques. Ces approximations utilisent un changement de coordonnées couplé avec un développement sous forme de fonctions particulières pouvant décrire dans certaines applications les fonctions d'activation présentes dans la description des réseaux de neurones. Nous introduisons cette approximation dans le but de décrire numériquement des potentiels dans le cadre de l'homogénéisation numérique des matériaux élastiques non linéaires en petites et grandes déformations. En effet, cette représentation a permis, à partir d'un ensemble de valeurs discrètes associées à la solution du potentiel ou des contraintes homogénéisées, d'évaluer une représentation continue de celles-ci, pour à la fois fournir une loi de comportement "numérique" à l'échelle macroscopique sans retour nécessaires à l'échelle microscopique, mais également pour pouvoir évaluer l'opérateur tangent macroscopique pour le calcul de structure associé. La représentation par réseaux de neurones introduite dans ce travail de thèse permet de décrire des fonctions dans des espaces paramétriques allant jusqu'à des dimensions de l'ordre de 10 avec seulement des centaines de milliers de points d'échantillonnage de valeurs discrètes aléatoirement disposés dans l'espace paramétrique, constituant un gain considérable par rapport à des approches où les points sont échantillonnés dans des grilles régulières, pour lesquels le nombre de calculs locaux croît avec la puissance de la dimension. Nous avons ainsi pu construire des potentiels tridimensionnels pour des matériaux hétérogènes non linéaires élastiques, et où une dépendance explicite à différents paramètres microscopiques tels que la fraction volumique, ou des paramètres matériels de la matrice sont incorporés. La technique a été testée au travers d'un grand nombre d'exemples et un calcul de structure a pu être mené avec cette technique. La méthode a également été appliquée au cadre des grandes déformations hyperélastiques.

4.5.2 Perspectives

Les méthodes développées dans cette thèse et les résultats obtenus permettent d'envisager de nombreuses perspectives, dont les suivantes :

La méthode d'homogénéisation non linéaire pour le cas des matériaux élastoplastiques parfait pourrait être étendue à un cadre plus général d'écrouissage isotrope et cinématique pour les phases, ainsi qu'à la plasticité polycristalline. L'extension de cette approche aux grandes déformations pourrait faire l'objet de travaux, qui pourraient être menés en couplant cette technique avec les méthodes de potentiels également développés dans ce mémoire. Enfin, l'application de cette technique à des calculs de structure est directe, et sa mise en œuvre permettrait des applications à des cas industriels plus complexes.

La technique d'approximation en grandes dimensions permettant de traiter des fonctions paramétrées dans des espaces de dimensions de l'ordre de 10, l'introduction de paramètres liés à la microstructure dans la loi de comportement pourrait permettre l'optimisation de ces paramètres en vue de concevoir des matériaux optimisant une fonction objectif associée à la réponse de la structure faite du matériau composite non linéaire. D'autres applications à des microstructures évolutives, où des paramètres associés à cette évolution (décrivant par exemple l'anisotropie) pourraient être introduits, pour des applications telles que les procédés de mise en forme par exemple, où la microstructure évolue au cours du procédé. Enfin, de nouvelles approches à deux potentiels pour les milieux standards généralisés pourraient être envisagées dans ce cadre, pour lesquelles les deux

potentiels pourraient être décrits par des fonctions numériques de type réseaux de neurones.

Annexe A

Résolution par éléments finis des problèmes locaux non linéaires

Dans cette annexe, nous rappelons les principales formulations permettant la mise en œuvre des calculs éléments finis locaux effectués sur le VER, notamment pour l'élasticité non linéaire en petites déformations et en élastoplasticité. Les dérivations permettant d'aboutir aux opérateurs tangents sont fournis ainsi que les formes faibles et les discrétisations éléments finis.

A.1 Elasticité en petites déformations non linéaire, loi puissance

A.1.1 Comportement compressible

Les matériaux non linéaires en petites déformations compressibles, caractérisés par une loi en puissance sont décrits par un potentiel de la forme :

$$w^{(r)}(\boldsymbol{\varepsilon}) = \frac{9}{2}\kappa^{(r)}\varepsilon_m^2 + \frac{\varepsilon_0^{(r)}\sigma_0^{(r)}}{1+m^{(r)}} \left(\frac{\varepsilon_{eq}}{\varepsilon_0^{(r)}} \right)^{1+m^{(r)}}. \quad (\text{A.1})$$

Dans cette équation, $\kappa^{(r)}$ est le module de compressibilité de la phase r ; $\varepsilon_m = Tr(\boldsymbol{\varepsilon})/3$ est la partie hydrostatique des déformations; ε_{eq} est la déformation équivalente définie par $\varepsilon_{eq} = \sqrt{2\boldsymbol{\varepsilon}_d : \boldsymbol{\varepsilon}_d/3}$ avec $\boldsymbol{\varepsilon}_d = \boldsymbol{\varepsilon} - \varepsilon_m \mathbf{1}$ et $\mathbf{1}$ est le tenseur identité du second ordre. Dans l'Eq. (A.1) $m^{(r)}$ est un paramètre d'écrouissage de la phase r tel que $0 \leq m \leq 1$; $\sigma_0^{(r)}$ et $\varepsilon_0^{(r)}$ sont les contraintes d'écoulement et déformations de référence pour la phase r , respectivement. Ce modèle permet de représenter un nombre important de comportements non linéaires mécaniques. En particulier, $m^{(r)} = 0$ et $m^{(r)} = 1$ correspondent à des comportements rigides parfaitement plastiques et linéaires élastiques.

La loi de comportement est donnée par (4.2). On a :

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}(\varepsilon_m^2) = 2 \frac{\partial \varepsilon_m}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} \varepsilon_m \quad (\text{A.2})$$

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}(\varepsilon_m^2) = \frac{2}{3} \frac{\partial Tr(\boldsymbol{\varepsilon})}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} \varepsilon_m. \quad (\text{A.3})$$

En utilisant la propriété :

$$\boxed{\frac{\partial Tr(\mathbf{A})}{\partial \mathbf{A}} = \mathbf{1}}, \quad (\text{A.4})$$

$\mathbf{A}$ étant un tenseur du second ordre, on obtient :

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} (\varepsilon_m^2) = \frac{2}{3} \varepsilon_m \mathbf{1} = \frac{2}{9} (Tr(\boldsymbol{\varepsilon})) \mathbf{1}. \quad (\text{A.5})$$

A présent nous dérivons le second terme de (A.1) :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} \left[\frac{\varepsilon_0 \sigma_0}{1+m} \left(\frac{\varepsilon_{eq}}{\varepsilon_0} \right)^{1+m} \right] &= \frac{\varepsilon_0 \sigma_0}{1+m} \frac{1}{\varepsilon_0^{1+m}} \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} [\varepsilon_{eq}^{1+m}] \\ &= \frac{\sigma_0}{(1+m) \varepsilon_0^m} \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} [\varepsilon_{eq}^{1+m}]. \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

Calculons le terme :

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} [\varepsilon_{eq}^{1+m}] = (1+m) \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} (\varepsilon_{eq}) \varepsilon_{eq}^m.$$

On a :

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} (\varepsilon_{eq}) = \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} \left\{ \left(\frac{2}{3} \boldsymbol{\varepsilon}_d : \boldsymbol{\varepsilon}_d \right)^{1/2} \right\} = \frac{2}{3} \frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_d}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} : \boldsymbol{\varepsilon}_d \left(\frac{2}{3} \boldsymbol{\varepsilon}_d : \boldsymbol{\varepsilon}_d \right)^{-1/2},$$

d'où

$$\frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_d}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} = \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} \left(\boldsymbol{\varepsilon} - \frac{1}{3} Tr(\boldsymbol{\varepsilon}) \mathbf{1} \right).$$

On obtient alors :

$$\boxed{\frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_d}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbb{I} - \frac{1}{3} \mathbf{1} \otimes \mathbf{1}}, \quad (\text{A.7})$$

avec $\mathbb{I}$ est le tenseur identité du quatrième ordre. On a :

$$\frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_d}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} : \partial \boldsymbol{\varepsilon}_d = \boldsymbol{\varepsilon}_d - \frac{1}{3} Tr(\partial \boldsymbol{\varepsilon}_d) \mathbf{1} = \boldsymbol{\varepsilon}_d,$$

Comme par définition $Tr(\boldsymbol{\varepsilon}_d) = 0$. Alors :

$$\boxed{\frac{\partial \varepsilon_{eq}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} = \frac{2}{3} \boldsymbol{\varepsilon}_d \varepsilon_{eq}^{-1}}. \quad (\text{A.8})$$

Nous obtenons :

$$\boxed{\boldsymbol{\sigma} = \kappa Tr(\boldsymbol{\varepsilon}) \mathbf{1} + \frac{2}{3} \frac{\sigma_0^{(r)}}{\varepsilon_0^{(r)}} \left(\frac{\varepsilon_{eq}}{\varepsilon_0^{(r)}} \right)^{m^{(r)}-1} \boldsymbol{\varepsilon}_d}. \quad (\text{A.9})$$

Le problème étant non linéaire, la résolution par éléments finis nécessite d'évaluer le tenseur élastique tangent, défini par :

$$\boxed{\mathbb{M}(\boldsymbol{\varepsilon}) = \frac{\partial^2 \omega(\boldsymbol{\varepsilon})}{\partial \boldsymbol{\varepsilon} \partial \boldsymbol{\varepsilon}}}. \quad (\text{A.10})$$

En utilisant la propriété

$$\boxed{\frac{\partial (a\mathbf{A})}{\partial \mathbf{B}} = \frac{\partial a}{\mathbf{B}} \otimes \mathbf{A} + a \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial \mathbf{B}}}. \quad (\text{A.11})$$

nous obtenons :

$$\frac{\partial (\kappa \text{Tr}(\boldsymbol{\varepsilon}) \mathbf{1})}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} = \kappa \frac{\partial (\text{Tr}(\boldsymbol{\varepsilon}))}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} \otimes \mathbf{1} = \kappa \mathbf{1} \otimes \mathbf{1}. \quad (\text{A.12})$$

A présent calculons :

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} \left[\frac{2}{3} \frac{\sigma_0}{\varepsilon_0} \left(\frac{\varepsilon_{eq}}{\varepsilon_0} \right)^{m-1} \boldsymbol{\varepsilon}_d \right] = \frac{2}{3} \frac{\sigma_0}{\varepsilon_0^m} \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} [\varepsilon_{eq}^{m-1} \boldsymbol{\varepsilon}_d]. \quad (\text{A.13})$$

On a :

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} [\varepsilon_{eq}^{m-1} \boldsymbol{\varepsilon}_d] = \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} [\varepsilon_{eq}^{m-1}] \otimes \boldsymbol{\varepsilon}_d + \varepsilon_{eq}^{m-1} \frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_d}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}. \quad (\text{A.14})$$

Le terme

$$\frac{\partial \varepsilon_{eq}^{m-1}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} = (m-1) \frac{\partial \varepsilon_{eq}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} \varepsilon_{eq}^{m-2} = (m-1) \frac{2}{3} \boldsymbol{\varepsilon}_d \varepsilon_{eq}^{-1} \varepsilon_{eq}^{m-2} \quad (\text{A.15})$$

donne

$$\boxed{\frac{\partial \varepsilon_{eq}^{m-1}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} = \frac{2}{3} (m-1) \varepsilon_{eq}^{m-3} \boldsymbol{\varepsilon}_d}. \quad (\text{A.16})$$

On a alors :

$$\frac{\partial [\varepsilon_{eq}^{m-1} \boldsymbol{\varepsilon}_d]}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} = (m-1) \frac{2}{3} \varepsilon_{eq}^{m-3} \boldsymbol{\varepsilon}_d \otimes \boldsymbol{\varepsilon}_d + \varepsilon_{eq}^{m-1} \left(\mathbb{I} - \frac{1}{3} \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} \right). \quad (\text{A.17})$$

On obtient finalement :

$$\boxed{\mathbb{M} = \kappa \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} + \frac{4}{9} \frac{\sigma_0}{\varepsilon_0^m} (m-1) \varepsilon_{eq}^{m-1} \left\{ \left(\mathbb{I} - \frac{1}{3} \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} \right) + \boldsymbol{\varepsilon}_d \otimes \boldsymbol{\varepsilon}_d \varepsilon_{eq}^{-2} \right\}}. \quad (\text{A.18})$$

A.1.1.1 Forme faible et discrétisation éléments finis

On suppose ici que les conditions sont des conditions de type Dirichlet (4.4). La forme faible est donnée comme suit.

Trouver $\mathbf{u}(\mathbf{x}) \in \mathcal{D}(\Omega)$, $\mathcal{D}(\Omega) = \{\mathbf{u} | \mathbf{u} = \mathbf{u}^d \text{ on } \partial\Omega, \mathbf{u} \in H^1(\Omega)\}$, tel que

$$\int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})) : \boldsymbol{\varepsilon}(\delta\mathbf{u}) d\Omega = 0 = R(\mathbf{u}) \quad \forall \delta\mathbf{u} \in H_0^1(\Omega) \quad (\text{A.19})$$

avec $H_0^1(\Omega) = \{\mathbf{u} | \mathbf{u} = \mathbf{0} \text{ on } \partial\Omega, \mathbf{u} \in H^1(\Omega)\}$ où $\mathbf{u}^d$ est le champ des déplacements vérifiant les conditions aux limites de Dirichlet. Pour résoudre ce problème non linéaire, il est nécessaire d'appliquer une procédure itérative telle que la méthode de Newton-Raphson qui nécessite une linéarisation des équations. Un développement de Taylor au premier ordre du résidu $\mathbf{R}$ par rapport à l'incrément de déplacement $\Delta\mathbf{u}^k$, k indiquant l'indice de l'itération, conduit à :

$$\mathbf{R}(\mathbf{u}^k + \Delta\mathbf{u}^{k+1}) \approx \mathbf{R}(\mathbf{u}^k) + D_{\Delta\mathbf{u}^{k+1}}\mathbf{R}(\mathbf{u}^k). \quad (\text{A.20})$$

où D indique la dérivée de Gâteaux. Comme on cherche à annuler $\mathbf{R}(\mathbf{u}^k + \Delta\mathbf{u}^{k+1})$ à chaque itération k on obtient le problème linéaire :

$$D_{\Delta\mathbf{u}^{k+1}}\mathbf{R}(\mathbf{u}^k) = -\mathbf{R}(\mathbf{u}^k). \quad (\text{A.21})$$

Par la suite on pose $\Delta\mathbf{u}^{k+1} = \Delta\mathbf{u}$ par souci de clarté. On obtient :

$$D_{\Delta\mathbf{u}} \left(\int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})) : \boldsymbol{\varepsilon}(\delta\mathbf{u}) d\Omega \right) = \int_{\Omega} D_{\Delta\mathbf{u}}\boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\varepsilon}(\delta\mathbf{u}) d\Omega \quad (\text{A.22})$$

$$= \int_{\Omega} \frac{\partial\boldsymbol{\sigma}}{\partial\boldsymbol{\varepsilon}} : D_{\Delta\mathbf{u}}(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})) : \boldsymbol{\varepsilon}(\delta\mathbf{u}) d\Omega \quad (\text{A.23})$$

$$= \int_{\Omega} \boldsymbol{\varepsilon}(\delta\mathbf{u}) : \mathbb{L} : \boldsymbol{\varepsilon}(\Delta\mathbf{u}) d\Omega. \quad (\text{A.24})$$

La forme faible associée au problème linéarisé est donnée par :

$$\int_{\Omega} \boldsymbol{\varepsilon}(\delta\mathbf{u}) : \mathbb{L}(\mathbf{u}^k) : \boldsymbol{\varepsilon}(\Delta\mathbf{u}^{k+1}) d\Omega = - \int_{\Omega} \boldsymbol{\varepsilon}(\delta\mathbf{u}) : \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}^k) d\Omega. \quad (\text{A.25})$$

En utilisant une discrétisation par EF, on obtient le système linéaire d'équations :

$$\mathbf{K}_T \Delta\mathbf{u}^{k+1} = -\mathbf{R}(\mathbf{u}^k), \quad (\text{A.26})$$

où

$$\mathbf{K}_T = \int_{\Omega} \mathbf{B}^T \mathbf{L}(\mathbf{u}^k) \mathbf{B} d\Omega \quad (\text{A.27})$$

est la matrice tangente, $\mathbf{B}$ est une matrice de dérivées de fonctions de forme éléments finis, $\mathbf{M}(\mathbf{u}^k)$ est la forme matricielle du tenseur du quatrième ordre $\mathbb{L}(\mathbf{u}^k)$ et

$$\mathbf{R}(\mathbf{u}^k) = \int_{\Omega} \mathbf{B}^T [\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}^k)] d\Omega \quad (\text{A.28})$$

où $[\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}^k)]$ est la forme vectorielle associée à $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}^k)$. L'algorithme itératif est donné par :

Pour chaque incrément de déformation macroscopique :

TANT QUE $|\mathbf{R}(\mathbf{u}^k)| > TOL$: Connaissant $\mathbf{u}^k$

1. Calculer et assembler $\mathbf{K}(\mathbf{u}^k)$, $\mathbf{R}(\mathbf{u}^k)$
2. Résoudre le système d'équations linéaires (A.26), calculer $\Delta\mathbf{u}^{k+1}$
3. Actualiser les déplacements : $\mathbf{u}^{k+1} = \mathbf{u}^k + \Delta\mathbf{u}^{k+1}$ and set $\mathbf{u}^k = \mathbf{u}^{k+1}$
4. ALLER EN (1)

A.1.2 Comportement incompressible

Pour les matériaux incompressibles, le potentiel est donné par :

$$\omega^{(r)}(\boldsymbol{\varepsilon}) = \frac{\varepsilon_0^{(r)} \sigma_0^{(r)}}{1 + m^{(r)}} \left(\frac{\varepsilon_{eq}}{\varepsilon_0^{(r)}} \right)^{1+m^{(r)}}. \quad (\text{A.29})$$

avec la contrainte :

$$Tr((\boldsymbol{\varepsilon})) = 0. \quad (\text{A.30})$$

La forme faible est obtenue en formulant le problème de minimisation sous contraintes suivant :

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \underset{s.c.Tr(\boldsymbol{\varepsilon})=0}{\text{Argmin}} \int_{\Omega} \omega^{(r)} d\Omega. \quad (\text{A.31})$$

En utilisant la méthode des multiplicateurs de Lagrange, On peut exprimer le Lagrangien associé au problème comme :

$$\mathcal{L} = \int_{\Omega} \omega^{(r)}(\boldsymbol{\varepsilon}) d\Omega + \int_{\Omega} p Tr(\boldsymbol{\varepsilon}) d\Omega, \quad (\text{A.32})$$

où p est le multiplicateur de Lagrange, qui peut être interprété comme une pression hydrostatique. La stationnarité de $\mathcal{L}$ donne :

$$\begin{cases} D_{\delta\mathbf{u}}\mathcal{L} = 0, \\ D_{\delta p}\mathcal{L} = 0. \end{cases} \quad (\text{A.33})$$

Exprimons tout d'abord (A.33₁) :

$$D_{\delta\mathbf{u}}\mathcal{L} = D_{\delta\mathbf{u}} \left\{ \int_{\Omega} \omega^{(r)}(\boldsymbol{\varepsilon}) d\Omega + \int_{\Omega} p Tr(\boldsymbol{\varepsilon}) d\Omega \right\} \quad (\text{A.34})$$

$$= \int_{\Omega} \frac{\partial \omega^{(r)}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} : D_{\delta\mathbf{u}}(\boldsymbol{\varepsilon}) d\Omega + \int_{\Omega} p D_{\delta\mathbf{u}}(Tr(\boldsymbol{\varepsilon})) d\Omega.$$

Comme $Tr(\cdot)$ est un opérateur linéaire, on obtient :

$$D_{\delta\mathbf{u}}(Tr(\boldsymbol{\varepsilon})) = Tr(\boldsymbol{\varepsilon}(\delta\mathbf{u})).$$

D'où :

$$D_{\delta \mathbf{u}} \mathcal{L} = \int_{\Omega} \tilde{\boldsymbol{\sigma}} : \boldsymbol{\varepsilon}(\delta \mathbf{u}) d\Omega + \int_{\Omega} p \text{Tr}(\boldsymbol{\varepsilon}(\delta \mathbf{u})) d\Omega = R_1(\mathbf{u}, p), \quad (\text{A.35})$$

avec

$$\tilde{\boldsymbol{\sigma}} = \frac{2}{3} \frac{\sigma_0^{(r)}}{\varepsilon_0^{(r)}} \left(\frac{\varepsilon_{eq}}{\varepsilon_0^{(r)}} \right)^{m^{(r)}-1} \boldsymbol{\varepsilon}_d. \quad (\text{A.36})$$

(voir le paragraphe précédent). A présent exprimons (A.33₂) :

$$\begin{aligned} D_{\delta p} \mathcal{L} &= D_{\delta p} \left\{ \int_{\Omega} \omega^{(r)}(\boldsymbol{\varepsilon}) d\Omega + \int_{\Omega} p \text{Tr}(\boldsymbol{\varepsilon}) d\Omega \right\} \\ &= \int_{\Omega} \delta p \text{Tr}(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})) d\Omega = 0 = R_2(\mathbf{u}). \end{aligned} \quad (\text{A.37})$$

Finalement la forme faible est donnée par :

$$\begin{cases} \int_{\Omega} \tilde{\boldsymbol{\sigma}} : \boldsymbol{\varepsilon}(\delta \mathbf{u}) d\Omega + \int_{\Omega} p \text{Tr}(\boldsymbol{\varepsilon}(\delta \mathbf{u})) d\Omega = 0, \\ \int_{\Omega} \delta p \text{Tr}(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})) d\Omega = 0. \end{cases} \quad (\text{A.38})$$

Comme précédemment, une procédure itérative est nécessaire pour résoudre le problème, impliquant une linéarisation des équations. En exprimant le développement de Taylor au premier ordre des résidus $\mathbf{R}_1(\mathbf{u}^k, p^k)$ et $\mathbf{R}_2(\mathbf{u}^k, p^k)$ connus à l'itération k par rapport à la perturbation $(\Delta \mathbf{u}^{k+1}, \Delta p^{k+1}) = (\Delta \mathbf{u}, \Delta p)$ on aboutit à :

$$R_1(\mathbf{u}^k + \Delta \mathbf{u}, p^k + \Delta p) \approx R_1(\mathbf{u}^k, p^k) + D_{\Delta \mathbf{u}^{k+1}} R_1(\mathbf{u}^k, p^k) + D_{\Delta p^{k+1}} R_1(\mathbf{u}^k, p^k), \quad (\text{A.39})$$

$$R_2(\mathbf{u}^k + \Delta \mathbf{u}, p^k + \Delta p) \approx R_2(\mathbf{u}^k, p^k) + D_{\Delta \mathbf{u}^{k+1}} R_2(\mathbf{u}^k, p^k) + D_{\Delta p^{k+1}} R_2(\mathbf{u}^k, p^k). \quad (\text{A.40})$$

En cherchant $\mathbf{R}_1(\mathbf{u}^k, p^k) = 0$ et $\mathbf{R}_2(\mathbf{u}^k, p^k) = 0$ à l'itération k on aboutit au problème linéaire suivant :

$$\begin{cases} D_{\Delta \mathbf{u}} R_1(\mathbf{u}^k, p^k) + D_{\Delta p} R_1(\mathbf{u}^k, p^k) = -R_1(\mathbf{u}^k, p^k), \\ D_{\Delta \mathbf{u}} R_2(\mathbf{u}^k, p^k) + D_{\Delta p} R_2(\mathbf{u}^k, p^k) = -R_2(\mathbf{u}^k, p^k). \end{cases} \quad (\text{A.41})$$

On a :

$$D_{\Delta p} R_1(\mathbf{u}^k, p^k) = \int_{\Omega} \text{Tr}(\boldsymbol{\varepsilon}(\delta \mathbf{u})) \Delta p d\Omega, \quad (\text{A.42})$$

$$D_{\Delta p} R_2(\mathbf{u}^k, p^k) = 0, \quad (\text{A.43})$$

$$D_{\Delta \mathbf{u}} R_2(\mathbf{u}^k, p^k) = \int_{\Omega} \delta p \text{Tr}(\boldsymbol{\varepsilon}(\Delta \mathbf{u})) d\Omega, \quad (\text{A.44})$$

$$D_{\Delta \mathbf{u}} R_1(\mathbf{u}^k, p^k) = \int_{\Omega} \frac{\partial \tilde{\boldsymbol{\sigma}}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} : \boldsymbol{\varepsilon}(\Delta \mathbf{u}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\delta \mathbf{u}) d\Omega$$

$$= \int_{\Omega} \boldsymbol{\varepsilon}(\delta \mathbf{u}) : \tilde{\mathbb{L}} : \boldsymbol{\varepsilon}(\Delta \mathbf{u}) d\Omega, \quad (\text{A.45})$$

avec

$$\tilde{\mathbb{L}} = \mathbb{L} - \kappa \mathbf{1} \otimes \mathbf{1}. \quad (\text{A.46})$$

A.1.3 Discrétisation Eléments Finis

En utilisant une discrétisation éléments finis appropriée (satisfaisant les conditions Inf-Sup [9]), nous obtenons un système linéaire d'équations sous la forme :

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K} & \mathbf{G}^T \\ \mathbf{G} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} [\Delta \mathbf{u}^{k+1}] \\ [\Delta p^{k+1}] \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix} \quad (\text{A.47})$$

avec

$$\mathbf{K} = \int_{\Omega} \mathbf{B}^T \tilde{\mathbb{L}} \mathbf{B} d\Omega, \quad (\text{A.48})$$

et

$$\mathbf{G} = \int_{\Omega} \tilde{\mathbf{N}}^p \mathbf{B}^u d\Omega. \quad (\text{A.49})$$

Le problème doit être complété par des conditions de Dirichlet pour aboutir à un système modifié où le terme de droite dans (A.47) est non nul.

L'algorithme itératif est donné comme suit.

Pour chaque incrément de déformation macroscopique :

TANT QUE $|\mathbf{R}(\mathbf{u}^k)| > TOL$: Connaissant $\mathbf{u}^k$

1. Calculer et assembler la matrice du système (A.47)
2. Résoudre le système linéaire (A.47), trouver $\Delta \mathbf{u}^{k+1}$, Δp^{k+1}
3. Actualiser les déplacements et les pressions $\mathbf{u}^{k+1} = \mathbf{u}^k + \Delta \mathbf{u}^{k+1}$, $p^{k+1} = p^k + \Delta p^{k+1}$ et poser $\mathbf{u}^k = \mathbf{u}^{k+1}$, $p^k = p^{k+1}$
4. ALLER EN (1)

A.2 Problèmes élastoplastiques

Dans le cas de matériaux élastoplastiques, le problème permettant de déterminer la loi de comportement et d'actualiser les variables internes peut être résolu par un algorithme général de type prédiction-correction (return-mapping) [85]. Le problème à résoudre est, connaissant la déformation $\boldsymbol{\varepsilon}$, de déterminer la contrainte $\boldsymbol{\sigma}$ telle que $f(\boldsymbol{\sigma}) \leq 0$, f étant la fonction d'écoulement. Pour une prédiction de contrainte élastique, si $f^* > 0$, alors la correction doit être calculée telle que

$$f = 0 \quad (\text{A.50})$$

et la loi d'écoulement pour une loi de plasticité associative donne :

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p = \lambda \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\sigma}}. \quad (\text{A.51})$$

Dans la suite, nous supposons une loi d'écoulement normale (associative). Premièrement, une discrétisation en temps est appliquée. Les deux conditions sont alors résolues itérativement au temps $(n+1)$. Les deux équations sont exprimées au temps $n+1$ par

$$f_{n+1} = f(\boldsymbol{\sigma}_{n+1}), \quad (\text{A.52})$$

$$\mathbf{R}_{n+1} = \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^p - \boldsymbol{\varepsilon}_n^p - \Delta\gamma \frac{\partial f_{n+1}}{\partial \boldsymbol{\sigma}}. \quad (\text{A.53})$$

Ces équations étant non linéaires en général, celles-ci sont résolues encore une fois par une procédure de Newton-Raphson. La linéarisation des équations est fournie ci-dessous.

Nous avons les relations :

$$\boldsymbol{\sigma}_{n+1} = \mathbb{C} : (\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1} - \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^p), \quad (\text{A.54})$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^p = \boldsymbol{\varepsilon}_n^p + \Delta\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^p. \quad (\text{A.55})$$

La linéarisation des équations (A.53)-(A.52) est obtenue par un développement de Taylor au premier ordre de chaque équation :

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_{n+1}(\Delta\gamma + \delta\gamma, \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^p + \Delta\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^p) &\simeq \\ \mathbf{R}_{n+1}(\Delta\gamma, \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^p) + \frac{\partial \mathbf{R}_{n+1}}{\partial \Delta\gamma} \delta\gamma + \frac{\partial \mathbf{R}_{n+1}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^p} : \Delta\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^p, \end{aligned} \quad (\text{A.56})$$

$$\begin{aligned} f_{n+1}(\Delta\gamma + \delta\gamma, \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^p + \Delta\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^p) &\simeq \\ f_{n+1}(\Delta\gamma, \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^p) + \frac{\partial f_{n+1}}{\partial \Delta\gamma} \delta\gamma + \frac{\partial f_{n+1}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^p} : \Delta\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^p. \end{aligned} \quad (\text{A.57})$$

Le terme $\Delta\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^p$ est lié à $\Delta\boldsymbol{\sigma}_{n+1}$ par :

$$\Delta\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^p = -\mathbb{C}^{-1} : \Delta\boldsymbol{\sigma}_{n+1}. \quad (\text{A.58})$$

Le système linéaire résolu pour $\delta\gamma$ et $\Delta\boldsymbol{\sigma}_{n+1}$ peut être exprimée par :

$$\frac{\partial \mathbf{R}_{n+1}}{\partial \Delta\gamma} \delta\gamma - \frac{\partial \mathbf{R}_{n+1}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^p} : \mathbb{C}^{-1} : \Delta\boldsymbol{\sigma}_{n+1} = -\mathbf{R}_{n+1} \quad (\text{A.59})$$

$$\frac{\partial f_{n+1}}{\partial \Delta\gamma} \delta\gamma - \frac{\partial f_{n+1}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^p} : \mathbb{C}^{-1} : \Delta\boldsymbol{\sigma}_{n+1} = -f_{n+1}. \quad (\text{A.60})$$

Comme $\frac{\partial f_{n+1}}{\partial \Delta\gamma} = 0$ on a pour le second terme de (A.60) :

$$\frac{\partial f_{n+1}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^p} = \frac{\partial f_{n+1}}{\partial \boldsymbol{\sigma}_{n+1}} : \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}_{n+1}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^p} = \frac{\partial f_{n+1}}{\partial \boldsymbol{\sigma}_{n+1}} : \mathbb{C} \quad (\text{A.61})$$

L'Eq. (A.60) devient :

$$\frac{\partial f_{n+1}}{\partial \boldsymbol{\sigma}_{n+1}} : \Delta \boldsymbol{\sigma}_{n+1} = -f_{n+1} \quad (\text{A.62})$$

En utilisant :

$$\frac{\partial \mathbf{R}_{n+1}}{\partial \Delta \gamma} = \frac{\partial f_{n+1}}{\partial \boldsymbol{\sigma}_{n+1}} \quad (\text{A.63})$$

et :

$$\frac{\partial \mathbf{R}_{n+1}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^p} = -\mathbb{I} + \Delta \gamma \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\sigma}_{n+1}} \left\{ \frac{\partial f_{n+1}}{\partial \boldsymbol{\sigma}_{n+1}} \right\} \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}_{n+1}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^p} \quad (\text{A.64})$$

$$= -\mathbb{I} + \Delta \gamma \frac{\partial^2 f_{n+1}}{\partial \boldsymbol{\sigma}_{n+1} \partial \boldsymbol{\sigma}_{n+1}} : \mathbb{C} \quad (\text{A.65})$$

nous pouvons écrire :

$$\begin{aligned} & -\frac{\partial \mathbf{R}_{n+1}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^p} : \mathbb{C}^{-1} : \Delta \boldsymbol{\sigma}_{n+1} = \\ & = \left(\mathbb{I} - \Delta \gamma \frac{\partial^2 f_{n+1}}{\partial \boldsymbol{\sigma}_{n+1} \partial \boldsymbol{\sigma}_{n+1}} : \mathbb{C} \right) : \mathbb{C}^{-1} : \Delta \boldsymbol{\sigma}_{n+1} \\ & = \left[\mathbb{C}^{-1} - \Delta \gamma \frac{\partial^2 f_{n+1}}{\partial \boldsymbol{\sigma}_{n+1} \partial \boldsymbol{\sigma}_{n+1}} \right] : \Delta \boldsymbol{\sigma}_{n+1}. \end{aligned} \quad (\text{A.66})$$

Dans la suite, on pose $\Xi = \mathbb{C}^{-1} - \Delta \gamma \frac{\partial^2 f_{n+1}}{\partial \boldsymbol{\sigma} \partial \boldsymbol{\sigma}}$. Finalement le système d'équations linéarisé est donné par :

$$\boxed{\frac{\partial f_{n+1}}{\partial \boldsymbol{\sigma}_{n+1}} \delta \gamma + \Xi : \Delta \boldsymbol{\sigma}_{n+1} = -\mathbf{R}_{n+1}}, \quad (\text{A.67})$$

$$\boxed{\frac{\partial f_{n+1}}{\partial \boldsymbol{\sigma}_{n+1}} \Delta \boldsymbol{\sigma}_{n+1} = -f_{n+1}}. \quad (\text{A.68})$$

A chaque itération $k + 1$, on résout le système (A.67)- (A.68) pour trouver $\delta \gamma$ et $\Delta \boldsymbol{\sigma}_{n+1}$. L'incrément de déformation plastique est donnée par

$$\Delta \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^p = -\mathbb{C}^{-1} : \Delta \boldsymbol{\sigma}_{n+1}. \quad (\text{A.69})$$

Les différentes quantités sont actualisées par :

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^{p(k+1)} = \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^{p(k)} + \Delta \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^p, \quad (\text{A.70})$$

$$\Delta \gamma_{n+1}^{(k+1)} = \Delta \gamma_{n+1}^{(k)} + \delta \gamma. \quad (\text{A.71})$$

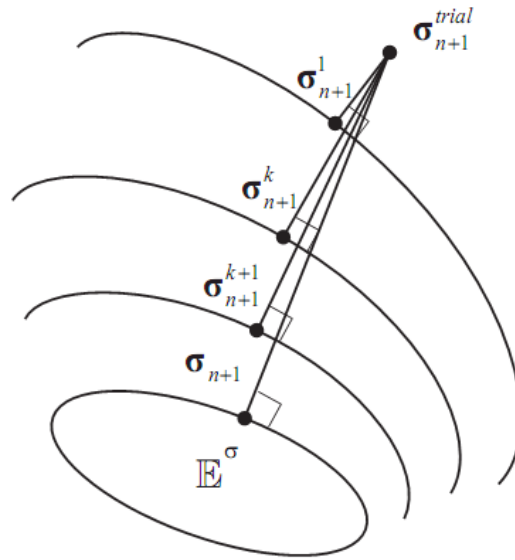


FIGURE A.1 – Vue schématique de l’algorithme de prédiction-correction (return-mapping) avec projection normale sur le domaine élastique.

Annexe B

Solution analytique : fibre cylindrique revêtue avec un matériau élastoplastique

Dans cette annexe, nous présentons la solution analytique associée à la réponse d'une fibre cylindrique élastique isotrope revêtue par une couche de matériau isotrope élastoplastique satisfaisant le critère de Tresca, fournie dans [70] et dont la géométrie est fournie dans la figure B.4. On considère un système de coordonnées polaires cylindriques (r, θ, z) . A l'instant t , la fibre occupe une région $r < a(t)$, et la couche une région $a(t) < r < b(t)$.

B.1 Formulation du problème

Les composantes des déplacements radiaux et axiaux sont désignés par u , w respectivement. Nous considérons une extension uniforme du système, dans lequel u ne dépend que de r et t , w étant donné par :

$$w = \alpha z; \quad (\text{B.1})$$

où α ne dépend que du temps. Dans ces conditions, les seules composantes de contraintes non nulles sont les composantes normales à la surface de coordonnées

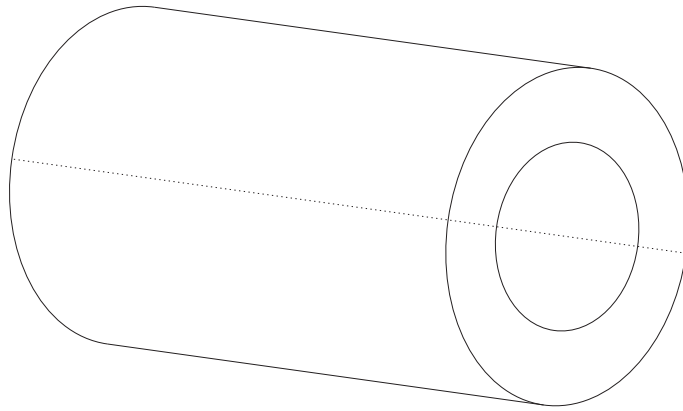


FIGURE B.1 – Fibre revêtue par une couche élastoplastique.

(r, θ, z) ; celles-ci sont désignées par $\sigma_r, \sigma_\theta, \sigma_z$. Les déformations associées ne dépendent que de r et t . On suppose les forces de volume négligeables. Dans ce cas, l'équation d'équilibre est donnée par :

$$\frac{\partial \sigma_r}{\partial r} + \frac{\sigma_r - \sigma_\theta}{r} = 0. \quad (\text{B.2})$$

On suppose que la surface $r = b$ est libre, d'où :

$$\sigma_r = 0 \text{ quand } r = b. \quad (\text{B.3})$$

On considère la continuité de u et σ_r à travers l'interface $r = a$. Considérant une loi élastique isotrope pour la fibre, on a :

$$\begin{cases} \sigma_r = (\lambda' + 2\mu') \frac{\partial u}{\partial r} + \lambda' \left(\frac{u}{r} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) \\ \sigma_\theta = (\lambda' + 2\mu') \frac{u}{r} + \lambda' \left(\frac{\partial u}{\partial r} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) \\ \sigma_z = (\lambda' + 2\mu') \frac{\partial w}{\partial z} + \lambda' \left(\frac{\partial u}{\partial r} + \frac{u}{r} \right) \end{cases} \quad (\text{B.4})$$

où λ' et μ' sont les constantes de Lamé de la fibre. En considérant le critère de Tresca dans la fibre, on a :

$$\sigma_1 - \sigma_3 \leq 2k \quad (\text{B.5})$$

où σ_1 et σ_3 sont les valeurs la plus grande et la plus petite des contraintes principales, et k est la limite d'élasticité du matériau. En considérant l'absence d'écrouissage, k est constante. Pour $\sigma_1 - \sigma_3 < 2k$, la matériau est élastique. Les trois composantes de déformation non nulles sont notées $\varepsilon_r, \varepsilon_\theta, \varepsilon_z$, avec les exposants e et p indiquant les parties élastiques et plastiques.

$$\begin{cases} \varepsilon_r = \varepsilon_r^e + \varepsilon_r^p = \frac{\partial u}{\partial r} \\ \varepsilon_\theta = \varepsilon_\theta^e + \varepsilon_\theta^p = \frac{u}{r} \\ \varepsilon_z = \varepsilon_z^e + \varepsilon_z^p = \frac{\partial w}{\partial z} = \alpha \end{cases} \quad (\text{B.6})$$

Les contraintes sont liées aux déformations élastiques par :

$$\begin{cases} \sigma_r = (\lambda + 2\mu) \varepsilon_r^e + \lambda(\varepsilon_\theta^e + \varepsilon_z^e) \\ \sigma_\theta = (\lambda + 2\mu) \varepsilon_\theta^e + \lambda(\varepsilon_r^e + \varepsilon_z^e) \\ \sigma_z = (\lambda + 2\mu) \varepsilon_z^e + \lambda(\varepsilon_\theta^e + \varepsilon_r^e) \end{cases} \quad (\text{B.7})$$

où λ et μ sont les constantes de Lamé de la couche. L'état plastique est supposé incompressible, d'où

$$\varepsilon_r^p + \varepsilon_\theta^p + \varepsilon_z^p = 0 \quad (\text{B.8})$$

Dans ce problème, l'analyse est considérablement simplifiée en tenant compte du fait que $\sigma_r, \sigma_\theta, \sigma_z$ sont les composantes principales de la contrainte et que $\varepsilon_r, \varepsilon_\theta, \varepsilon_z$ sont les composantes principales de la déformation. Un certain nombre

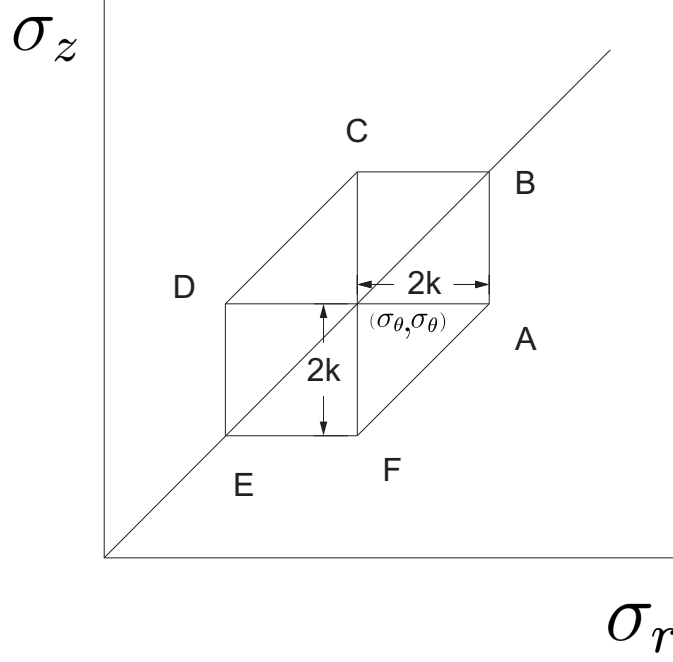


FIGURE B.2 – Critère de Tresca.

de cas peuvent se présenter en fonction des grandeurs relatives des composants des contraintes principales. Ces cas sont illustrés dans la figure B.4, qui représente une section de la surface de Tresca dans l'espace $(\sigma_r, \sigma_\theta, \sigma_z)$ dans le plan σ_θ . On a les relations suivantes : Côté AF

$$\sigma_r - \sigma_z = 2k, \quad \sigma_r > \sigma_\theta > \sigma_z \quad (\text{B.9})$$

$$\dot{\varepsilon}_r^p = -\dot{\varepsilon}_z^p > 0, \quad \dot{\varepsilon}_\theta^p = 0 \quad (\text{B.10})$$

Coté CD

$$\sigma_z - \sigma_r = 2k, \quad \sigma_z > \sigma_\theta > \sigma_r \quad (\text{B.11})$$

$$\dot{\varepsilon}_r^p = -\dot{\varepsilon}_z^p > 0, \quad \dot{\varepsilon}_\theta^p = 0 \quad (\text{B.12})$$

Sommet F

$$\sigma_r = \sigma_\theta = \sigma_z + 2k \quad (\text{B.13})$$

$$\dot{\varepsilon}_r^p > 0, \quad \dot{\varepsilon}_\theta^p > 0, \quad \dot{\varepsilon}_r^p + \dot{\varepsilon}_\theta^p + \dot{\varepsilon}_z^p = 0 \quad (\text{B.14})$$

Sommet C

$$\sigma_r = \sigma_\theta = \sigma_z - 2k \quad (\text{B.15})$$

$$\dot{\varepsilon}_r^p < 0, \quad \dot{\varepsilon}_\theta^p < 0, \quad \dot{\varepsilon}_r^p + \dot{\varepsilon}_\theta^p + \dot{\varepsilon}_z^p = 0 \quad (\text{B.16})$$

B.2 Phase élastique

Pour des valeurs suffisamment petites de α , définies dans (B.1), la fibre et la couche sont dans un état élastique. Dans ce cas, la solution qui satisfait

(B.2),(B.4),et (B.7) les conditions de continuité à $r = a$, et la condition $u \rightarrow 0$ lorsque $r \rightarrow 0$ est donnée par :

$$\begin{cases} \sigma_r = \sigma_\theta = \alpha\lambda' - 2\beta'(\lambda' + \mu') \\ \sigma_z = \alpha(\lambda' + 2mu') - 2\beta'\lambda' \\ u = -\beta'r \end{cases} \quad 0 \leq r < a \quad (\text{B.17})$$

$$\begin{cases} \sigma_r = \alpha\lambda - 2\beta(\lambda + \mu) - 2\gamma\mu/r^2 \\ \sigma_\theta = \alpha\lambda - 2\beta(\lambda + \mu) + 2\gamma\mu/r^2 \\ \sigma_z = \alpha(\lambda + 2mu) - 2\beta\lambda \\ u = -\beta r + \gamma/r \end{cases} \quad a < r < b \quad (\text{B.18})$$

d'où

$$\begin{cases} \beta' = \frac{\alpha(\lambda'(\lambda+\mu)+\lambda\mu+\rho^2(\lambda'-\lambda)\mu)}{2((\lambda'+\mu'+mu)(\lambda+\mu)+\rho^2(\lambda'-\lambda+\mu'-\mu)\mu)} \\ \beta = \frac{\alpha(\lambda(\lambda'+\mu'+\mu)+\rho^2(\lambda'-\lambda)\mu)}{2((\lambda'+\mu'+mu)(\lambda+\mu)+\rho^2(\lambda'-\lambda+\mu'-\mu)\mu)} \\ \gamma = \frac{\alpha(\lambda\mu'-\lambda'\mu)a^2}{2((\lambda'+\mu'+mu)(\lambda+\mu)+\rho^2(\lambda'-\lambda+\mu'-\mu)\mu)} \end{cases} \quad (\text{B.19})$$

et $\rho = a/b$. Nous notons que lorsque $0 < \rho < 1$, β' et β sont toujours positifs si $\lambda, \lambda', \mu, \mu'$ et α sont positifs. Ensuite, il résulte de (B.18) et (B.19) que $\sigma_z > \sigma_\theta > \sigma_r$ dans la couche pour $\alpha > 0$, donc le matériau atteint l'état plastique quand $\sigma_z - \sigma_r = 2k$. A partir de (B.18), on a :

$$\sigma_z - \sigma_r = 2\mu(\alpha + \beta + \gamma/r^2) \quad (\text{B.20})$$

Pour α donné, $\sigma_r - \sigma_z$ atteint son maximum en $r = a$, à l'interface entre la fibre et le revêtement. Donc le revêtement devient plastique lorsque $\alpha + \beta + \gamma/a^2 = k/mu$, ou, utilisant (B.18), quand $\alpha = \alpha_0$,

$$\alpha_0$$

$$= \frac{2k((\lambda + \mu)(\lambda' + \mu' + \mu) - \mu\rho^2(\lambda + \mu - \lambda' - \mu'))}{\mu((3\lambda + 2\mu)(\lambda' + \mu' + \mu) + (\lambda\mu' - \lambda'\mu) - \mu\rho^2(3\lambda + 2\mu - 3\lambda' - 2\mu'))} \quad (\text{B.21})$$

B.3 Premier régime plastique

Comme $\sigma_z > \sigma_\theta > \sigma_r$, quand le revêtement devient plastique, il est naturel pour un état suivant de la déformation de chercher des solutions dans lesquelles un état plastique correspondant au côté CD de l'hexagone de Tresca se forme dans le revêtement adjacent à la fibre. Nous avons supposé que pour une valeur de $\alpha > \alpha_0$, une région plastifiée correspondant au côté CD occupe une région $a < r < c$, d'où c depends de α . Dans ce cas, la région $c < r < b$ reste élastique. Donc, dans le fibre et dans partie du revêtement restée élastique, les solutions sont encore sous la forme (B.17) et (B.18), mais β', β, γ ne sont plus données par (B.19). Dans la zone plastifiée les équations sont (B.2) et (B.11). Comme il n'y

a pas de déformations plastiques quand $\alpha = \alpha_0$, on a les relations suivantes dans la région ($a < r < c$) :

$$\varepsilon_z^p = -\varepsilon_r^p > 0, \quad \varepsilon_\theta^p = 0. \quad (\text{B.22})$$

A partir des équations (B.6), (B.7), (B.8), on a :

$$\sigma_r + \sigma_\theta + \sigma_z = (3\lambda + 2\mu) \left(\frac{\partial u}{\partial r} + \frac{u}{r} + \alpha \right). \quad (\text{B.23})$$

La solution des équations (B.2), (B.11) et (B.23) est donnée par :

$$\begin{cases} \sigma_r = \alpha(3\lambda + 2\mu) - 2k(\lambda + \mu)/\mu + \delta r^p + \varepsilon r^q \\ \sigma_\theta = \alpha(3\lambda + 2\mu) - 2k(\lambda + \mu)/\mu + (p+1)\delta r^p + (q+1)\varepsilon r^q \\ \sigma_z = \sigma_r + 2k \end{cases} \quad (\text{B.24})$$

d'où

$$p = -1 + x; \quad q = -1 - x; \quad x = \sqrt{\frac{\lambda + 2\mu}{\lambda + \mu}} \quad (\text{B.25})$$

et δ, ε sont constantes. Pour déterminer les constantes $\beta', \beta, \gamma, \delta, \varepsilon, c$, on utilise les conditions de continuité de σ_r et de u en $r = a$ et $r = c$, et les conditions $\sigma_r = 0$ en $r = b$. En exprimant les conditions aux limites, on obtient les différentes constantes.

$$\alpha = \frac{a_4(d_2 c^{-p} + d_3 c^{-q}) - d_4(a_2 + a_3 c^2)}{a_1(d_2 c^{-p} + d_3 c^{-q}) - d_1(a_2 + a_3 c^2)} \quad (\text{B.26})$$

$$\begin{cases} \beta = \frac{\alpha(\lambda b^2 + 2\mu c^2) - 2kc^2}{2((\lambda + \mu)b^2 - \mu c^2)} \\ \gamma = \frac{-\alpha b^2 c^2 (3\lambda + 2\mu) + 2kb^2 c^2 (\lambda + \mu)/\mu}{2((\lambda + \mu)b^2 - \mu c^2)} \\ \delta = (2\mu - q\lambda)c^{-p-2}\gamma/x \\ \varepsilon = -(2\mu - p\lambda)c^{-q-2}\gamma/x \\ \beta' = -\alpha + \frac{k}{\mu} - \frac{(\mu + p(\lambda + \mu))a^p \delta + (\mu + q(\lambda + \mu))a^q \varepsilon}{\mu(3\lambda + 2\mu)} \end{cases} \quad (\text{B.27})$$

Cette phase de déformation se termine lorsque l'interface $r = c$ atteint la surface extérieure $r = b$. La valeur correspondante α_1 de α est obtenue par la substitution $c = b$ dans (B.26).

B.4 Deuxième régime plastique

Dans cette partie, on fournit les solutions pour lesquelles tout le revêtement est plastifié et dans un état de contrainte correspondant au côté CD du polygone de Tresca. Les équations restent inchangées dans la fibre et on considère à présent les équations (B.2), (B.11) (B.23) dans le revêtement. La solution est à nouveau exprimée par (B.17) dans la fibre et par (B.24) dans le revêtement. Les constantes $\beta', \delta, \varepsilon$ sont à présent déterminées par les conditions de continuité de u et σ_r en

$r = a$ par les conditions $\sigma_r = 0$ en $r = b$. En appliquant les conditions aux limites, on trouve que β' est toujours exprimée par (B.27), mais que δ , ε sont à présent donnés par :

$$\begin{cases} \delta = -\frac{(e_3 a_1 + b^q d_1)\alpha - (e_3 a_4 + b^q d_4)}{e_3 b^p + e_2 b^q} \\ \varepsilon = -\frac{(e_2 a_1 + b^q d_1)\alpha - (e_2 a_4 + b^q d_4)}{e_3 b^p + e_2 b^q} \end{cases} \quad (\text{B.28})$$

B.5 Troisième régime plastique

Le cas $\sigma_r = \sigma_\theta$ se produisant pour $r = b$ à la fin de l'étape précédente correspond au sommet C de l'hexagone de Tresca. Dans cette nouvelle étape, nous fournissons les solutions pour lesquelles il existe deux régions plastifiées séparées par une surface $r = d$, où d est supposé diminuer de b à a . La région plastifiée intérieure $a < r < d$ est dans un état de contraintes correspondant au côté CD de l'hexagone de Tresca, et la région externe $d < r < b$ à l'état qui correspond au sommet C de l'hexagone de Tresca. La forme de la solution dans la fibre est à nouveau donnée par (B.17), et la solution dans la région intérieure plastifiée est une fois de plus de la forme B.24. Les valeurs des coefficients diffèrent bien sûr de leurs valeurs précédentes. Dans la région plastifiée extérieure, la contrainte est déterminée par l'équation d'équilibre, avec les conditions (B.2) et (B.15). On obtient :

$$\sigma_z = 2k \quad (\text{B.29})$$

$$\sigma_r = \sigma_\theta = 0 \quad (\text{B.30})$$

quand $d < r < b$. Le déplacement dans la région extérieure est donné par (B.23), avec (B.29), on obtient :

$$u = -\frac{1}{2}\alpha r + \frac{kr}{3\lambda + 2\mu} + \frac{f}{r} \quad (\text{B.31})$$

d'où la coefficient f peut être déterminé par la condition de continuité de u en $r = d$. A partir de (B.24) et (B.31), on a :

$$f = d^2 \left\{ \frac{3\alpha}{2} - \frac{3k(\lambda + \mu)}{\mu(3\lambda + 2\mu)} + \frac{\mu + p(\lambda + \mu)}{\mu(3\lambda + 2\mu)} \delta d^p + \frac{\mu + q(\lambda + \mu)}{\mu(3\lambda + 2\mu)} \varepsilon d^q \right\} \quad (\text{B.32})$$

Le coefficient β' est déterminé par la condition de continuité de u en $r = a$, β' et la fonction δ et ε , donnée par l'(B.27). Pour déterminer δ , ε et d , on utilise d'abord la condition de continuité de σ_r en $r = a$ et $r = b$. A partir de (B.29), on a $\sigma_r = 0$ quand $r = d - 0$. De plus, le matériau sur à proximité de la surface $r = d$ va devenir une partie de la région plastifiée extérieure. En posant $r = d$ et $\sigma_r = \sigma_\theta = 0$ dans (B.24), δ et ε sont déterminés comme suit :

$$\begin{cases} \delta = \frac{1}{2}qd^{-p}(\alpha(3\lambda + 2\mu) - 2k(\lambda + \mu)/\mu)/x \\ \varepsilon = -\frac{1}{2}pd^{-q}(\alpha(3\lambda + 2\mu) - 2k(\lambda + \mu)/\mu)/x \end{cases} \quad (\text{B.33})$$

Avec ce résultat, l'(B.32) devient :

$$f = d^2 \left\{ \frac{\alpha}{2} - \frac{k(\lambda + \mu)}{\mu(3\lambda + 2\mu)} \right\} \quad (\text{B.34})$$

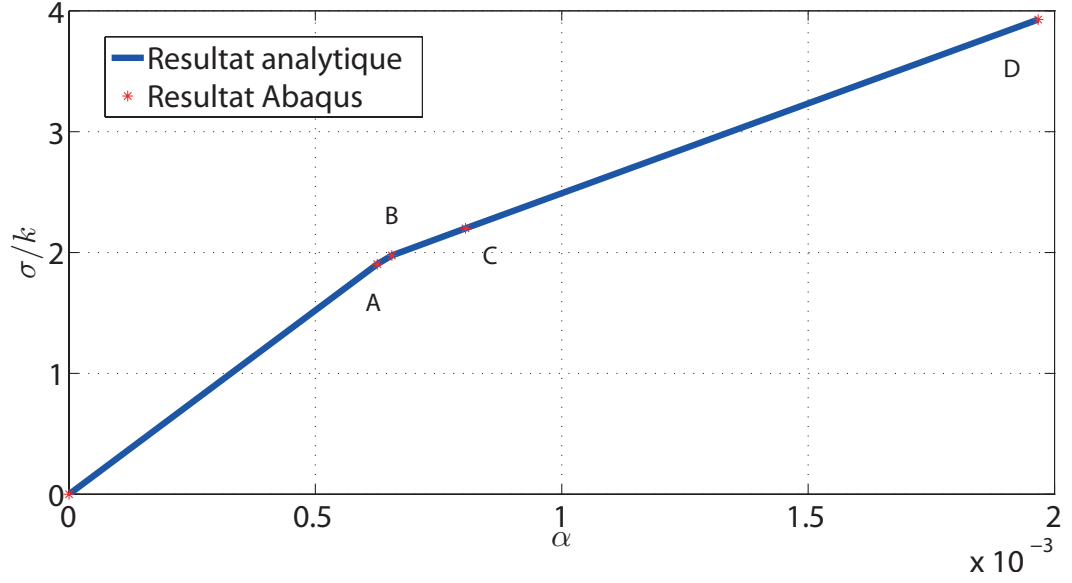


FIGURE B.3 – Réponse de la fibre revêtue. Les points A , B , C et D indiquent la fin du régime élastique, des premier, deuxième et troisième régime plastique.

La formation de cet état se termine lorsque $d = a$. La valeur correspondante de α est alors :

$$\alpha_3 = \frac{2k\lambda(\lambda' + \mu')}{\mu\lambda'(3\lambda + 2\mu)}. \quad (\text{B.35})$$

Quand $\alpha = \alpha_3$, l'état de contrainte dans le composite est très simple, la seule composante de contrainte non nulle étant σ_z qui prend une valeur constante $\alpha\mu'(3\lambda' + 2\mu')/(\lambda' + \mu')$ dans la fibre et $2k$ dans le revêtement.

B.6 Calculs numériques

Nous illustrons ici la solution analytique pour une extension de la fibre et comparons cette solution avec un calcul numérique obtenu à partir d'un modèle 3D par éléments finis du système fibre/revêtement. Une fibre d'aluminium revêtue de silice est considérée. Les coefficients correspondants sont, pour la fibre : $\lambda' = 1.7.10^2 \text{ GPa}$, $\mu' = 3.1.10^2 \text{ GPa}$. On suppose que :

$$f(\alpha) = E_0\left(\frac{\alpha}{1-\alpha}\right) + E_1\left(\frac{\alpha}{1-\alpha}\right)^2; g(\alpha) = \frac{\alpha\nu'}{1-\alpha(1+\nu')} \quad (\text{B.36})$$

d'où $E_0 = 7.3.10^2$, $E_1 = 43.6.10^2 \text{ GPa}$, $\nu' = 0.177$. Pour le revêtement, les coefficients sont : $\lambda = 5.85.10^2 \text{ GPa}$, $\mu = 2.62 \times 10^2 \text{ GPa}$ et $b/a = 3/2$.

Dans la figure B.3, nous présentons la réponse de la fibre revêtue calculée par la solution analytique. Nous fournissons, pour comparaison, la réponse obtenue par un calcul numérique, montrant le très bon accord entre la solution analytique et le calcul numérique.

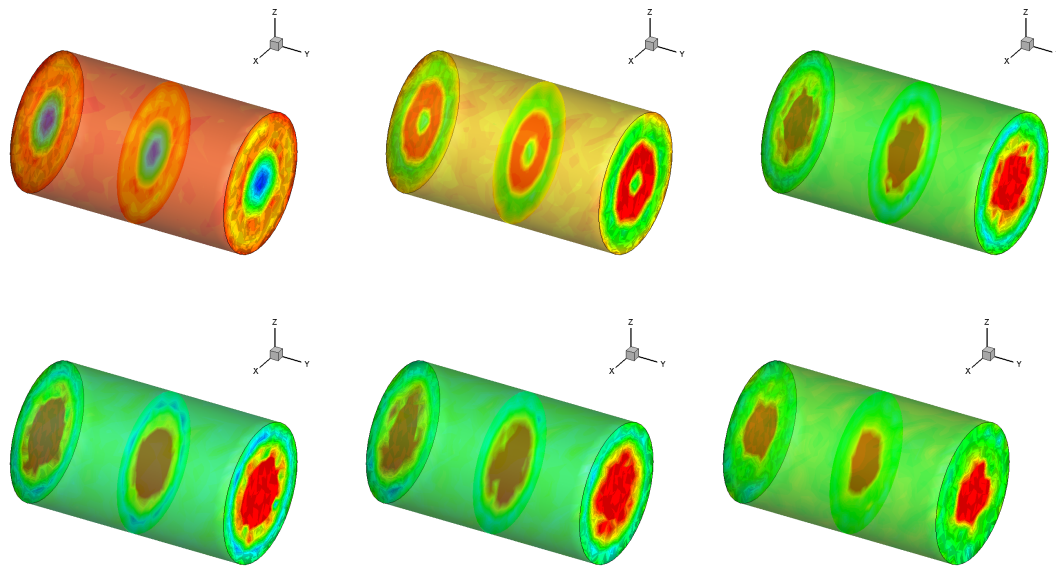


FIGURE B.4 – Modes POD associés au modèle fibre.

Pour illustration, nous avons calculé les modes POD associés aux champs de déformation élastoplastiques dans le système pour ce même chargement et les avons reporté dans la figure B.4.

Annexe C

Interpolation de type spline cubique

Soit un ensemble de n points $\{\xi_0, \xi_1, \dots, \xi_n\}$ dans $\mathbb{R}$ tels que $a = \xi_0 < \xi_1 < \dots < \xi_n < b$ et $\xi_1 - \xi_0 = \xi_2 - \xi_1 = \dots = \xi_n - \xi_{n-1} = h$. Nous notons $\Delta \subset \mathbb{R}$ un domaine unidimensionnel. Les coordonnées des points sont données par $\xi_i = a + ih$. Soit y_i des données discrètes, $y_i \in \mathbb{R}$, $i = 0, \dots, n$. Pour une distribution arbitraire de nœuds, une spline cubique est un polynôme cubique par morceaux, qui peut être déterminé par une formule récursive [27]. Pour des nœuds équidistants, les fonctions d'interpolation $s(\xi) \in \mathcal{S}_3(\Delta)$ peuvent être écrites comme

$$s(\xi) = \sum_{k=1}^{n+3} c_k u_k(\xi) \quad (\text{C.1})$$

où $\mathcal{S}_3(\Delta)$ est l'espace de degré trois et de continuité C^2 sur la grille $\Delta(a, b)$. Dans l'Eq. (C.1), c_k sont des coefficients et $u_k \in \mathcal{S}_3(\Delta)$ une fonction de base. Un choix possible pour u_k est

$$u_k(\xi) = \Phi\left(\frac{\xi - a}{h} + 2 - k\right), \quad k = 1, \dots, n+3 \quad (\text{C.2})$$

avec $\Phi(t)$ donné par l'Eq. (4.44). Dans la figure C.1, l'ensemble des fonctions de base $\mathbf{U} = \{u_1, u_2, \dots, u_{n+3}\}$ est représenté.

Il est nécessaire d'avoir $n+3$ conditions d'interpolation pour déterminer les fonctions splines de manière unique. Cependant, les conditions $s(\xi_i) = y_i$, $i = 0, \dots, n$ n'en spécifient que $n+1$. Il est donc nécessaire d'ajouter deux conditions qu'il est possible d'appliquer soit sur les dérivées premières soit sur les dérivées secondes. L'écriture des $n+3$ conditions définit le système linéaire d'équations :

$$s(\xi_i) = \sum_{k=l}^m c_k u_k(\xi_i) = y_i, \quad l = \left\lfloor \frac{\xi_i - a}{h} \right\rfloor + 1, \quad i = 0, \dots, n \quad (\text{C.3})$$

$$s'(\xi_\alpha) = \sum_{k=l}^m c_k u'_k(\xi_\alpha) = y'_\alpha, \quad l = \left\lfloor \frac{\xi_\alpha - a}{h} \right\rfloor + 1, \quad (\text{C.4})$$

$$s'(\xi_\beta) = \sum_{k=l}^m c_k u'_k(\xi_\beta) = y'_\beta, \quad l = \left\lfloor \frac{\xi_\beta - a}{h} \right\rfloor + 1, \quad (\text{C.5})$$

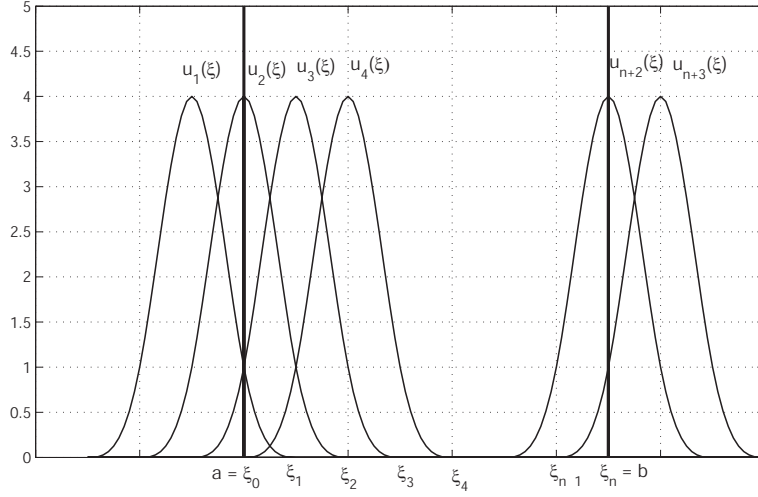


FIGURE C.1 – Base de $\mathcal{S}_3(\Delta)$. Fonctions de base $u_1, u_2, \dots, u_{n+3}$ de l'espace des fonctions splines $\mathcal{S}_3(\Delta)$ sur l'intervalle $[a, b]$ pour des nœuds équidistants.

avec $m = \min(l + 3, n + 3)$ et où $[\cdot]$ représente la fonction seuil. Le système linéaire peut être ré-écrit comme :

$$\mathbf{A}\mathbf{c} = \mathbf{y} \quad (\text{C.6})$$

où la matrice $\mathbf{A}$ est symétrique et tridiagonale et $\mathbf{c}$ est le vecteur des coefficients inconnus.

Bibliographie

- [1] J. Aboudi. Finite strain micromechanical modeling of multiphase composites. *Int. J. Multiscale Comput. Eng.*, 6(5) :411–434, 2008.
- [2] A. Ammar, B. Mokdad, F. Chinesta, and R. Keunings. A new family of solvers for some classes of multidimensional partial differential equations encountered in kinetic theory modeling of complex fluids. *J. Non-Newton. Fluid Mech.*, 139(3) :153–176, 2006.
- [3] W.L. Azoti, A. Tchalla, Y. Koutsawa, A. Makradi, G. Rauchs, S. Bellouetar, and H. Zahrouni. Mean-field constitutive modeling of elasto-plastic composites using two (2) incremental formulations. *Compos. Struct.*, 105 :256–262, 2013.
- [4] B.W. Bader and T.G. Kolda. Matlab tensor toolbox version 2.2, <http://csmr.ca.sandia.gov/tgkolda/tensortoolbox/>, 2007.
- [5] R.K. Beatson. On the convergence of some cubic spline interpolation schemes. *SIAM J. Numer. Anal.*, 23(4) :903–912, 1986.
- [6] G. Beylkin and J. Mohlenkamp. Algorithms for analysis in high dimensions. *SIAM J. Sci. Comput.*, pages 2133–2159, 2005.
- [7] V. Bouchart, M. Brieu, D. Kondo, and M.N. Abdelaziz. Implementation and numerical verification of a non-linear homogenization method applied to hyperelastic composites. *Comput. Mat. Sci.*, 43 :670–680, 2004.
- [8] J.M. Bowman, T. Carrington, and H.-D. Meyer. Quantum approaches for computing vibrational spectra of polyatomic molecules. *Mol. Phys.*, 106 :2145–2182, 2008.
- [9] F. Brezzi and M. Fortin. *Mixed and Hybrid Finite Element Methods*. Springer-Verlag, New-York, 1991.
- [10] J.D. Carol and J.J. Chang. Analysis of individual differences in multidimensional scaling via an n-way generalization of 'Eckart-Young' decomposition. *Psychometrika*, 35 :283–319, 1970.
- [11] S. Carter, S.J. Culik, and J.M. Bowman. Vibrational self-consistent field method for manymode systems : a new approach and application to the vibrations of co adsorbed on cu(100). *J. Chem. Phys.*, 107 :10458, 1997.

- [12] S. Carter and N.C. Handy. On the representation of potential energy surfaces of polyatomic molecules in normal coordinates. *Chem. Phys. Lett.*, 352 :1–7, 2002.
- [13] F. Chinesta, A. Leygue, F. Bordeu, J.V. Aguado, and E. Cueto. PGD-based computational vademecum for efficient design optimization and control. *Arch. Comput. Method Eng.*, 20(1) :31–59, 2013.
- [14] A. Clément, C. Soize, and J. Yvonnet. Computational nonlinear stochastic homogenization using a non-concurrent multiscale approach for hyperelastic heterogeneous microstructures analysis. *Int. J. Numer. Methods Eng.*, 91(8) :799–824, 2012.
- [15] A. Clément, C. Soize, and J. Yvonnet. Uncertainty quantification in computational stochastic multiscale analysis of nonlinear elastic materials. *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.*, 254 :61–82, 2013.
- [16] G. Cybenko. Approximations by superpositions of sigmoidal functions. *Math. Control Signal Syst.*, 2(4) :303–314, 1989.
- [17] R. Dawes, D.L. Thompson, A.F. Wagner, and M. Minkoff. Interpolating moving least-squares methods for fitting potential energy surfaces : A strategy for efficient automatic data point placement in high dimensions. *J. Chem. Phys.*, 128(8) :084107, 2008.
- [18] G. deBotton and G. Shmuel. Mechanics of composites with two families of finitely extensible fibers undergoing large deformations. *J. Mech. Phys. Solids*, 57 :1165–1181, 2009.
- [19] G. Dvorak. *Micromechanics of Composites Materials*. Springer, New-York, 2013.
- [20] G.J. Dvorak. Transformation field analysis of inelastic composite materials. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 437 :311–327, 1992.
- [21] B.F. Feeny and R. Kappagantu. On the physical interpretation of proper orthogonal modes in vibrations. *J. Sound Vibr.*, 219 :189–192, 1998.
- [22] F. Feyel. Multiscale FE² elastoviscoplastic analysis of composite structure. *Comput. Mater. Sci.*, 16(1-4) :433–454, 1999.
- [23] F. Fritzen and T. Boehlke. Reduced basis homogenization of viscoelastic composites. *Compos. Sci. Technol.*, 76 :84–91, 2013.
- [24] P. Germain. Continuum thermodynamics. *J. Appl. Mech.*, 50 :1010–1020, 1983.
- [25] S. Ghosh, K. Lee, and P. Raghavan. A multilevel computational model for multi-scale damage analysis in composite and porous media. *Int. J. Solids Struct.*, 38 :2335–2385, 2001.
- [26] G.H. Golub and C.F. Van Loan. *Matrix Computations*. North Oxford Academic, Oxford, 1983.

- [27] C. Habermann and F. Kindermann. Multidimensional spline interpolation : theory and applications. *Comput. Econ.*, 30 :153–169, 2007.
- [28] B. Halphen and Q. Nguyen. Sur les matériaux standards généralisés. *J. Mécanique*, 14 :39–63, 1975.
- [29] H. Harman. *Modern Factor Analysis*. University of Chicago Press, 1960.
- [30] A. Harshman. Foundations of the PARAFAC procedure : Models and conditions for an "explanatory" multi-modal factor analysis. *UCLA working papers in phonetics*, 16, 1970.
- [31] Q.C. He and Z.Q. Feng. Homogenization of layered elastoplastic composites : theoretical results. *Int. J. Non-Linear Mech.*, 47 :367–376, 2012.
- [32] Q.C. He, H. Le Quang, and Z.Q. Feng. Exact results for the homogenization of elastic fiber-reinforced solids at finite strain. *J. Elast.*, 83 :153–177, 2006.
- [33] C. Heyberger, P.-A. Boucard, and D. Neron. Multiparametric analysis within the proper generalized decomposition framework. *Comput. Mech.*, 49(3) :277–289, 2012.
- [34] C. Heyberger, P.-A. Boucard, and D. Neron. A rational strategy for the resolution of parametrized problems in the pgd framework. *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.*, 259 :40–49, 2013.
- [35] R. Hill. Elastic properties of reinforced solids : some theoretical principles. *J. Mech. Phys. Solids*, 11 :357–372, 1963.
- [36] R. Hill. A self-consistent mechanics of composites materials. *J. Mech. Phys. Solids*, 13 :213–222, 1965.
- [37] R. Hill. On macroscopic effects of heterogeneity in elastoplastic media at finite strain. *Math. Proc. Camb. Philos. Soc.*, 98 :579–590, 1984.
- [38] F.L. Hitchcock. The expression of a tensor or a polyadic as a sum of prducts. *J. Math. Phys.*, 6 :164–189, 1927.
- [39] P. Holmes, J.L. Lumley, and G. Berkooz. *Turbulence, Coherent Structures, Dynamical Systems and Symmetry*. Cambridge University Press, Cambridge, 1996.
- [40] H. Hotelling. Analysis of complex statistical variables in principal components. *J. Exp. Psy.*, 24 :417, 1953.
- [41] G.K. Hu. A method of plasticity for general aligned spheroidal void or fiber-reinforced composites. *Int. J. Plasticity*, 12 :439–449, 1996.
- [42] A. Ouavar I. Doghri. Homogenization of two-phase elasto-plastic composite materials and structures, study of tangent operators, cyclic plasticity and numerical algorithms. *Int. J. Sol. Struct.*, 40 :1681–1712, 2003.

- [43] M. Idiart and P. Ponte Castañeda. Second-order estimates for nonlinear isotropic composites with spherical pores and rigid particles. *C. R. Mec.*, 333 :147–154, 2005.
- [44] K. Karhunen. Zur spektraltheorie stochastischer prozesse. *Ann. Acad. Sci. Fennicae*, 37, 1946.
- [45] H.A.L. Kiers. Toward a standardized notation and terminology in multiway analysis. *J. Chemometr.*, 14 :105–122, 2000.
- [46] V. Kouznetsova, M.G.D. Geers, and W.A.M. Brekelmans. Multi-scale constitutive modeling of heterogeneous materials with gradient enhanced computational homogenization scheme. *Int. J. Num. Meth. Eng.*, 54 :1235–1260, 2002.
- [47] V.G. Kouznetsova, M.G.D. Geers, and W.A.M. Brekelmans. Multi-scale second order computational homogenization of multi-phase materials : a nested finite element solution strategy. *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.*, 193 :5525–5550, 2004.
- [48] N. Lahellec, F. Mazerolle, and J.C. Michel. Second-order estimates for the macroscopic behavior of periodic hyperelastic composites : theory and experimental validation. *J. Mech. Phys. Solids*, 52 :27–49, 2004.
- [49] L. De Lathauwer, B. De Moor, and J. Vandewalle. A multilinear singular value decomposition. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 21 :1253–1278, 2000.
- [50] O. Lopez-Pamies and P. Ponte Castañeda. Second-order estimates for the macroscopic response and loss of ellipticity in porous rubbers at large deformations. *J. Elast.*, 76(3) :247–287, 2004.
- [51] E.N. Lorenz. Empirical orthogonal eigenfunctions and statistical weather prediction. Technical Report, MIT, Department of Meteorology, Statistical Forecasting Project, 1956.
- [52] M.M. Loève. *Probability Theory*. Van Nostrand, NJ, 1955.
- [53] J.L. Lumley. The structure of inhomogeneous turbulent flows. In *in : A.M. Yaglom, V.I. Tataski (Eds.), Atmospheric Turbulence and Radio Wave Propagation*, pages 166–178. Nauka, Moscow, 1967.
- [54] M. Malshe, A. Pukritayakamee, L.M. Hagan, S. Sukapatnam, and R. Komanduri. Accurate prediction of higher-level electronic structure energies for large databases using neural networks, hartree-fock energies, and small subsets of the database. *J. Chem. Phys.*, 131 :124127, 2009.
- [55] J. Mandel. Contribution théorique à l’étude de lécrouissage et des lois de l’écoulement plastique. In *In : H.G. Hörtler (Ed.), Proceedings of Eleventh International Congress of Applied Mechanics (Munich 1964)*, volume 97, pages 502–509, Springer, Berlin, 1966.
- [56] J. Mandel. Plasticité classique et viscolasticité. In *CISM Udine Courses and Lectures*, volume 97, Springer-Verlag, Berlin, 1971.

- [57] S. Manzhos and T. Carrington. A random-sampling high dimensional model representation neural network for building potential energy surfaces. *J. Chem. Phys.*, 125 :084109, 2006.
- [58] S. Manzhos and T. Carrington. Using neural networks to represent potential surfaces as sums of products. *Journal of Chemical Physics ABR. ISO*, 125 :194105, 2006.
- [59] S. Manzhos and T. Carrington. Using redundant coordinates to represent potential energy surfaces with lower-dimensional functions. *J. Chem. Phys.*, 127 :014103, 2007.
- [60] S. Manzhos and T. Carrington. Using neural networks, optimized coordinates, and high-dimensional model representations to obtain a vinyl bromide potential surface. *J. Chem. Phys.*, 129 :224104, 2008.
- [61] S. Manzhos, X. Wang, R. Dawes, and T. Carrington. A nested molecule-independent neural network approach for high-quality potential fits. *J. Phys. Chem. A*, 110 :5295–5304, 2006.
- [62] S. Manzhos and K. Yamashita. A model for the dissociative adsorption of n_2o on $\text{cu}(1\ 0\ 0)$ using a continuous potential energy surface. *Surf. Sci.*, 604 :554–560, 2010.
- [63] S. Manzhos, Koichi Yamashita, and T. Carrington. Fitting sparse multi-dimensional data with low-dimensional terms. *Comput. Phys. Commun.*, 180 :2002–2012, 2009.
- [64] J.-C. Michel, H. Moulinec, and P. Suquet. Effective properties of composite materials with periodic microstructure : a computational approach. *Comput. Meth. Appl. Mech. Engrg.*, pages 109–143, 1999, 172.
- [65] J.-C. Michel and P. Suquet. Nonuniform transformation field analysis. *Int. J. Sol. Struct.*, 40(25) :6937–6955, 2003.
- [66] G.W. Milton. *Theory of Composites*. Cambridge University Press, 2002.
- [67] G.W. Milton and S.K. Serkov. Bounding the current in nonlinear conducting composites. *J. Mech. Phys. Solids*, 48 :1295–1324, 2000.
- [68] E. Monteiro, J. Yvonnet, and Q.-C. He. Computational homogenization for nonlinear conduction in heterogeneous materials using model reduction. *Comput. Mater. Sci.*, 42 :704–712, 2008.
- [69] N. Moës, J. Dolbow, and T. Belytschko. A finite element method for crack growth without remeshing. *Int. J. Numer. Methods Eng.*, 46(1) :131–156, 1999.
- [70] J.F. Mulhern, T.G. Rogers, and A.S.M. Spencer. Cyclic extension of an elastic fibre with an elastic-plastic coating. *J. Inst. Maths Applies.*, 3 :21–40, 1967.
- [71] D. Muti and S. Bourennane. Multidimensional filtering based on a tensor approach. *Signal Process.*, 85 :2338–2353, 2005.

- [72] S. Nemat-Nasser. *Micromechanics : Overall Properties of Heterogeneous Solids*. Elsevier, 1993.
- [73] K. Pearson. On lines and planes of closest fit to systems of points in space. *Philos. Mag.*, 6 :559, 1901.
- [74] P. Ponte-Castañeda. On the overall properties of nonlinearly viscous composites. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 416 :217–244, 1988.
- [75] P. Ponte-Castañeda. The effective mechanical properties of nonlinear isotropic composites. *J. Mech. Phys. Solids*, 39 :45–71, 1991.
- [76] P. Ponte-Castañeda. Second-order homogenization estimates for nonlinear composites incorporating field fluctuations : I-theory. *J. Mech. Phys. Solids*, 50 :737–757, 2002.
- [77] P. Ponte-Castañeda and E. Tiberio. Second-order homogenization method in finite elasticity and applications to black-filled elastomers. *J. Mech. Phys. Solids*, 48(6-7) :1389–1411, 2000.
- [78] Y.P. Qiu and G.J. Weng. A theory of plasticity for porous materials and particle-reinforced composites. *Int. J. Plasticity*, 59 :261–268, 1992.
- [79] J. Qu and M. Cherkaoui. *Fundamentals of Micromechanics of Solids*. John Wiley and Sons, Hoboken, New Jersey, 2006.
- [80] H. Rabitz and O.F. Alis. General foundations of high-dimensional model representations. *J. Math. Chem.*, 25 :197–233, 1999.
- [81] J. Renard and M.F. Marmonier. Etude de l’initiation de l’endommagement dans la matrice d’un matériau composite par une méthode d’homogénéisation. *Aerospace Science and Technology*, 9 :36–51, 1987.
- [82] S. Roussette, J.C. Michel, and P. Suquet. Non uniform transformation field analysis of elastic-viscoplastic composites. *Compos. Sci. Technol.*, 69 :22–27, 2009.
- [83] R. Sampaio and C. Soize. Remarks on the efficiency of pod for model reduction in non-linear dynamics of continuous elastic systems. *Int. J. Numer. Methods Eng.*, 71 :22–45, 2007.
- [84] E. Schmidt. Zur theorie der linearen und nichtlinearen integralgleichungen. i teil : Entwicklung willkürlicher funktion nach systemen vorgeschriebener. *Math. Ann.*, 63 :433–476, 1907.
- [85] J.C. Simo and T.J.R. Hugues. *Computational Inelasticity*. Springer-Verlag, 1998.
- [86] R. Smit, W. Brekelmans, and H. Meijer. Prediction of the mechanical behavior of nonlinear heterogeneous systems by multi-level finite element modeling. *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.*, 155 :181–192, 1998.
- [87] I.M. Sobol. Sensitivity analysis for non-linear mathematical models. *Math. Model. Comput.*, 1 :407–414, 1993.

- [88] B.G. Sumpter, C. Getino, and D.W. Noid. Theory and applications of neural computing in chemical science. *Annu. Rev. Phys. Chem.*, 45 :439–481, 1994.
- [89] P. Suquet. Effective properties for nonlinear composites. *In : CISM Lecture Notes*, 377 :197–264, 1997.
- [90] P. Suquet. Elements of homogenization for liner elastic solid mechanics. *In Lecture Notes in Physics*, pages 23–44. Springer-Verlag, Berlin, 2007.
- [91] N. Takano, M. Zako, and Y. Ohnishi. Macro-micro uncoupled homogenization procedure for microscopic nonlinear behavior analysis of composites. *Mater. Sci. Res. Int.*, 2(2) :81–86, 1996.
- [92] A. Tchalla, S. Bellouetar, A. Makradi, and H. Zahrouni. An abaqus toolbox for multiscale finite element computation. *Compos. Pt. B-Eng.*, 52 :323–333, 2013.
- [93] I. Temizer and P. Wriggers. An adaptive method for homogenization in orthotropic nonlinear elasticity. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 35-36 :3409–3423, 2007.
- [94] I. Temizer and T. I. Zohdi. A numerical method for homogenization in non-linear elasticity. *Comput. Mech.*, 40(2) :281–298, 2007.
- [95] K. Terada and N. Kikuchi. Nonlinear homogenization method for practical applications, in S. Ghosh, M. Ostoja-Starzewski (Eds.), *Computational Methods in Micromechanics. Proceedings of the ASME International Mechanical Engineering Congress and Exposition*, AMD-Vol.212/MD-vol.62 :1–6, 1995.
- [96] K. Terada and N. Kikuchi. A class of general algorithms for multi-scale analysis of heterogeneous media. *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.*, 190 :5427–5464, 2001.
- [97] S. Torquato. *Random Heterogeneous Materials : Microstructure and Macroscopic Properties*. Springer, 2001.
- [98] A. B. Tran, J. Yvonnet, Q-C. He, C. Toulemonde, and J. Sanahuja. A simple computational homogenization method for structures made of heterogeneous linear viscoelastic materials. *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.*, 200(45-46) :2956–2970, 2011.
- [99] L.R. Tucker. Some mathematical notes on three-mode factor analysis. *Psychometrika*, 31 :279–311, 1966.
- [100] J.R. Willis. The overall response of composite materials. *ASME J. Appl. Mech.*, 50 :1202–1209, 1983.
- [101] J. Yvonnet, D. Gonzalez, and Q.-C. He. Numerically explicit potentials for the homogenization of nonlinear elastic heterogeneous materials. *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.*, 198 :2723–2737, 2009.

- [102] J. Yvonnet and Q.-C. He. The reduced model multiscale method (R3M) for the non-linear homogenization of hyperelastic media at finite strains. *J. Comput. Phys.*, 223 :341–368, 2007.
- [103] J. Yvonnet, E. monteiro, and Q.-C. He. Computational homogenization method and reduced database model for hyperelastic heterogeneous structures. *Int. J. Multiscale Comput. Eng.*, 11(3) :201–225, 2013.
- [104] T. Zhang and G.H. Golub. Rank-one approximation to high order tensor. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 23(2) :534–550, 2013.

Résumé

Les méthodes d'homogénéisation numériques permettent de lever les limitations associées aux approches analytiques ou semi-analytiques pour prédire le comportement des matériaux hétérogènes dont les phases sont décrites par un comportement non linéaire, en particulier pour des morphologies de géométries complexes, ou des comportements dépendant de l'histoire, ou en grandes déformations. Dans ce travail, plusieurs contributions aux méthodes d'homogénéisation numériques pour traiter les problèmes non linéaires sont proposées. Dans une première partie, nous introduisons une méthode permettant de réaliser l'homogénéisation des matériaux dont les phases sont élastoplastiques parfaites. La technique est une extension de la méthode Non Uniform Transformation Field Analysis (NTFA) dans laquelle un algorithme de type prédiction-correction est introduit pour actualiser les variables internes. Dans une seconde partie, une méthode pour réaliser l'homogénéisation des composites non linéaires élastiques en petites et grandes déformations est proposée. Celle-ci se base sur la construction de potentiels associés au comportement effectif sous forme d'une base de donnée composée de valeurs discrètes interpolées à partir de valeurs discrètes obtenus par calculs éléments finis réalisés sur un Volume Elementaire Représentatif (VER). Un schéma original d'interpolation est introduit, utilisant la notion de réseaux de neurones artificiels pour limiter le nombre de valeurs pré-calculées et choisir les points aléatoirement dans l'espace du chargement et des paramètres. Il est possible d'introduire des paramètres associés à la microstructure dans le comportement tels que la fraction volumique ou des paramètres de comportement des phases, en vue de possible optimisation de la réponse associée des structures non linéaires.

Abstract

Computational homogenization methods allow circumventing issues associated to analytical or semi-analytical approaches, for predicting the effective behavior of heterogeneous materials whose phase are described by a nonlinear behavior, more precisely when microstructures have complex morphologies or a history-dependent behavior, or when considering finite strains. In this work, several contributions to computational homogenization methods for modeling nonlinear heterogeneous materials are proposed. In a first part, we introduce a method for homogenizing materials whose phases are perfectly elastoplastic. The technique extends the Non Uniform Transformation Field Analysis (NTFA) method by developing a return-mapping algorithm to update macroscopic internal variables. In a second part, a method is introduced for the homogenization of nonlinear composites whose phases are nonlinearly elastic, at both small and finite strains. The approach is based on the construction of potentials associated to the effective behavior in the form of a database whose discrete values are computed through Finite Element Computations realized on a Representative Volume Element (RVE). An original interpolation scheme is introduced, which is based on artificial Neural Networks to reduce the number of computed values which can be distributed randomly in the parameter space. It is then possible to introduce parameters associated to the microstructure in the constitutive law, such as volume fraction or constitutive parameters of local phases, for optimization of the related non linear structure response.