



HAL
open science

Modélisation de l'endommagement et de la rupture de microcapsules en écoulement

Nicolas Grandmaison

► **To cite this version:**

Nicolas Grandmaison. Modélisation de l'endommagement et de la rupture de microcapsules en écoulement. Biomécanique [physics.med-ph]. Université de Technologie de Compiègne, 2021. Français. NNT : 2021COMP2657 . tel-03752283

HAL Id: tel-03752283

<https://theses.hal.science/tel-03752283>

Submitted on 16 Aug 2022

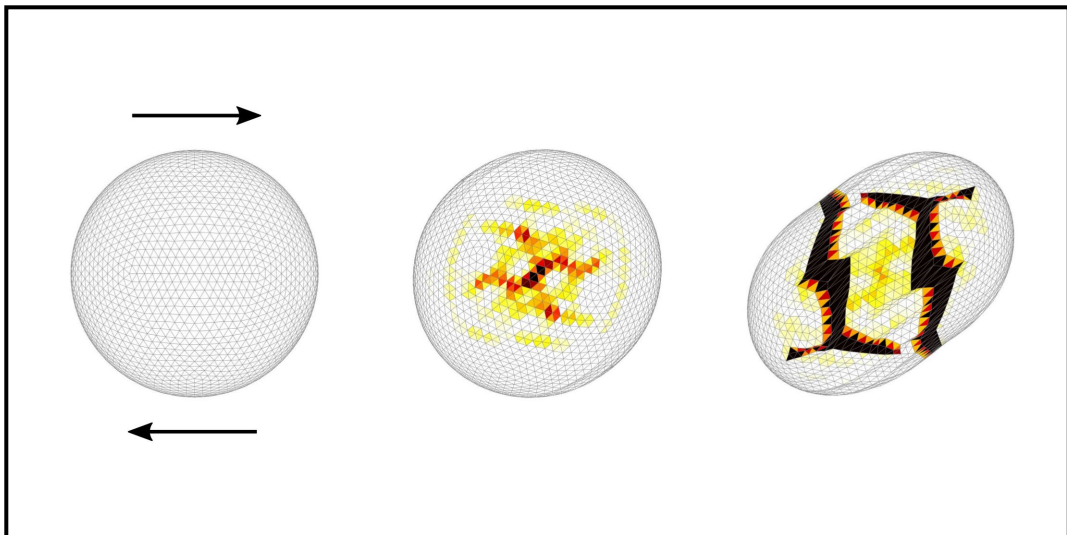
HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

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.

Par Nicolas GRANDMAISON

*Modélisation de l'endommagement et de la rupture
de microcapsules en écoulement*

Thèse présentée
pour l'obtention du grade
de Docteur de l'UTC



Soutenue le 20 décembre 2021

Spécialité : Biomécanique : Unité de Recherche en
Biomécanique et Bioingénierie (UMR-7338)

D2657

THÈSE

Présentée par

Nicolas GRANDMAISON

Pour l'obtention du grade de

Docteur de l'Université de Technologie de Compiègne

École doctorale n°71 : Sciences pour l'Ingénieur

Spécialité : Biomécanique

Modélisation de l'endommagement et de la rupture de microcapsules en écoulement

Thèse réalisée au sein du laboratoire Biomécanique et Bioingénierie (BMBI - UMR CNRS 7338), et co-dirigée par Anne-Virginie SALSAC et Delphine BRANCHERIE

Thèse soutenue le 20 décembre 2021, devant le jury composé de :

Delphine BRANCHERIE	Pr.	Directrice de thèse
Djimédo KONDO	Pr.	Examinateur
Anne LE GOFF	M.C.	Examinatrice
Patrick LE TALLEC	Pr.	Président du jury / Rapporteur
Franck NICOUD	Pr.	Rapporteur
Anne-Virginie SALSAC	D.R.	Directrice de thèse
Claude STOLZ	D.R.	Invité

À mes parents
À mon frère et ma sœur
À ma famille

Remerciements

À présent que ces quatre années de thèse se terminent, je tiens à remercier toutes les personnes qui, de près ou de loin, ont contribué à ce projet.

Je tiens tout d'abord à remercier Patrick Le Tallec et Franck Nicoud d'avoir accepté d'être rapporteurs de ma thèse. Merci pour le temps que vous avez consacré à analyser mes travaux, et pour les améliorations importantes que vous m'avez permis d'y apporter. Je tiens aussi à vous remercier Patrick Le Tallec d'avoir présidé le jury de ma thèse. Je tiens également à remercier Djimédo Kondo, Anne Le Goff et Claude Stolz, d'avoir accepté d'examiner mes travaux. Merci à l'ensemble des membres du jury d'avoir engagé avec moi une discussion scientifique très riche sur mes travaux le jour de la soutenance.

Je voudrais aussi vous remercier Djimédo Kondo et Claude Stolz d'avoir accepté de faire partie du jury de mon comité de suivi scientifique (CSI) tout au long de ma thèse. Merci pour vos commentaires approfondis sur l'avancée de mes travaux à chaque rendez-vous annuel du CSI, et pour le recul que cela m'aura permis de prendre.

À vous, Anne-Virginie et Delphine, mes directrices, je dois beaucoup. Merci de m'avoir fait confiance pour commencer à explorer avec vous ce sujet fascinant. J'ai beaucoup apprécié de travailler avec vous. Merci pour ces discussions scientifiques riches, pour votre écoute, pour votre soutien, pour votre regard bienveillant, et pour toute l'expérience que vous m'avez transmis.

Merci à toute l'équipe IFSB du laboratoire BMBI de m'avoir accueilli pendant toutes ces années. Merci pour cette ambiance de travail conviviale et pour les moments sympathiques qu'on a partagés ensemble. Merci Xingyi et Clément d'avoir partagé le bureau et votre bonne humeur au quotidien avec moi ; Claire D. pour la gestion impeccable de la plateforme numérique, et pour ton soutien et ton aide jusqu'au jour J, qui m'auront évité bien du stress ; Badr, XuQu pour vos conseils précieux ; Dominique, Isabelle, Anne pour

toutes vos questions pertinentes et constructives pendant les réunions ; Rachid pour tes encouragements ; Adlan pour toutes ces discussions à confronter expériences et calculs ; Doriane, Thibaut, Audrey, Baptiste, Claire B., Emma, pour ces moments partagés. Il serait bien sûr trop long que j'énumère ici les noms de toutes les personnes qui ont été dans l'équipe depuis mon arrivée et avec qui j'ai eu des échanges captivants, dont j'ai bénéficié de l'aide et reçu des conseils, ou encore avec qui j'ai partagé de bons moments, mais sachez que je vous transmets à tous un grand merci.

Je tiens à remercier aussi Cécile Legallais, directrice du laboratoire BMBI, pour cette dynamique du laboratoire dont j'ai pu profiter, et toutes les "journées BMBI" qui ont été très formatrices. Merci aussi à Catherine et Alexandra pour mon suivi administratif au laboratoire.

Je tiens aussi à remercier tout le personnel administratif de l'École Doctorale, et en particulier Salima pour tout le suivi de mon dossier.

Ces années de thèse m'ont aussi donné la possibilité d'enseigner. Merci Delphine, Emmanuel, Anne et Cécile de m'avoir permis d'intervenir dans vos enseignements à l'UTC. J'y associe aussi mes remerciements aux membres des équipes pédagogiques qui m'ont donné de leur temps pour me transmettre leur expérience. Merci aussi aux étudiants motivés et pleins de bonne volonté qui ont rendu cette expérience particulièrement passionnante.

Je remercie aussi le Ministère de l'Enseignement Supérieur, de la Recherche et de l'Innovation, d'avoir financé mon contrat doctoral, et l'Université de Technologie de Compiègne, de m'avoir accueilli pendant ces quatre années et d'avoir financé mon contrat d'ATER en dernière année. Je remercie aussi le Conseil Européen de la Recherche (ERC) qui m'a donné les moyens de réaliser mes travaux, et d'assurer leur diffusion, à travers le projet MultiphysMicroCaps.

Enfin, tout ce chemin, je ne l'aurais pas fait sans le soutien de mes proches et de ma famille. Merci pour votre soutien infaillible jusqu'au bout et dans les moments difficiles.

Résumé

Les microcapsules sont des particules composées d'une goutte liquide entourée d'une fine membrane élastique déformable. Elles permettent d'éviter la dissémination et la dégradation de la substance encapsulée, et de contrôler son relargage. Dans la plupart de leurs applications, les capsules sont en suspension dans un liquide en écoulement. Sous les contraintes visqueuses hydrodynamiques, elles peuvent s'endommager jusqu'à se rompre. Afin de contrôler le relargage, il est donc crucial de contrôler l'endommagement des capsules en écoulement, que ce soit pour l'empêcher, ou au contraire, le stimuler. Il existe cependant peu d'études sur la rupture des capsules en écoulement et l'approche a été essentiellement expérimentale : il n'existe aucun modèle permettant de décrire les mécanismes d'endommagement.

Dans ces travaux, on propose, pour la première fois, des approches numériques avancées pour modéliser les mécanismes d'endommagement d'une capsule en écoulement, jusqu'à sa rupture.

Dans une première partie, on développe les bases du modèle d'interaction fluide-structure (IFS) de l'endommagement d'une capsule en écoulement de Stokes. Dans le cadre de la mécanique de l'endommagement continu, on décrit un endommagement diffus dans la membrane à partir d'un modèle de comportement quasi-fragile. Le problème d'IFS est résolu en couplant la méthode des éléments finis, pour résoudre la déformation de la membrane, avec la méthode des intégrales de frontière, pour résoudre l'écoulement des fluides interne et externe. On étudie le cas d'une capsule sphérique en écoulement de cisaillement simple. En fonction de la force de l'écoulement, on détermine les conditions dans lesquelles la capsule atteint un état d'endommagement stable, et les conditions dans lesquelles s'initie la rupture. Quel que soit l'état d'endommagement atteint, il est toujours localisé dans la région où les tensions sont les plus importantes, en

bon accord avec les observations expérimentales. On propose alors une méthode pour calibrer le modèle.

On étudie ensuite plus spécifiquement le mode d'initiation de la rupture observé par Chang & Olbricht (1993a) sur des capsules en polyamide en écoulement de cisaillement simple, où la rupture s'initie à l'endroit où l'épaisseur de la membrane est la plus faible. On montre qu'en conservant le même modèle d'endommagement, et en adaptant simplement le critère d'endommagement de manière à rendre l'endommagement sensible aux dilatations surfaciques de la membrane, il est possible de prédire l'initiation de la rupture à l'endroit où l'ont observé Chang *et al.*

Dans la dernière partie, on étend le modèle d'IFS pour prendre en compte la phase de localisation de l'endommagement, lorsque l'endommagement se concentre dans des zones de faible épaisseur (les zones de localisation). On adopte une approche multi-échelle. Ainsi, dans le cadre de la méthode des discontinuités fortes, on considère qu'il coexiste une dissipation volumique associée à l'endommagement diffus, et une dissipation surfacique associée aux mécanismes dissipatifs localisés au niveau des zones de localisation. Une zone de localisation est alors vue comme une interface au niveau de laquelle il y a un saut de déplacement, et son comportement est décrit dans le cadre de la thermodynamique des interfaces par une loi cohésive rigide-endommageable qui relie le vecteur traction au saut de déplacement. La nouvelle version du code éléments finis-intégrales de frontières est validée dans le cas d'une capsule sphérique dans un écoulement hyperbolique plan. Les zones de localisation étant le siège de la rupture, le modèle permet de prédire l'endroit où va s'initier une fissure, et la direction selon laquelle elle va se propager.

Table des matières

Remerciements	5
Résumé	7
Notations	13
1 Introduction	17
1 Capsules en écoulement	17
1.1 Encapsulation et applications	17
1.2 Problématique de la rupture et cadre de la thèse	19
2 Comportement mécanique d'une capsule dans un écoulement	20
2.1 Observations expérimentales	21
2.2 Modèles analytiques et numériques	27
3 Objectifs et plan de l'étude	34
2 Prise en compte de l'endommagement	37
1 Modélisation de l'endommagement d'une microcapsule en écoulement jusqu'à rupture	37
2 Complément sur le problème de localisation	60
2.1 Mise en évidence de la localisation pour les matériaux adoucissants	60
2.2 Condition de localisation pour le modèle d'endommagement (cas 1D en petites déformations)	63
2.3 Aspects numériques du problème de localisation	66
2.4 Localisation pour une capsule en écoulement	69

3	Évolution des critères d'endommagement	75
1	Introduction	75
2	Contexte	76
3	Évolution du modèle d'endommagement	77
4	Modèle d'endommagement sensible aux dilatations surfaciques en petites déformations	80
4.1	Tenseur d'élasticité	80
4.2	Modèles d'endommagements en petites déformations	83
5	Modèle d'endommagement sensible aux dilatations surfaciques en grandes déformations	87
5.1	Méthode	88
5.2	Applications	90
6	Application au cas d'une capsule en écoulement de cisaillement simple	98
6.1	Définition du problème	99
6.2	Résultats	99
7	Conclusion	102
4	Vers la prise en compte de la fissuration : Régularisation du modèle d'endommagement par l'approche des discontinuités fortes	107
1	Introduction	107
1.1	Le phénomène de localisation	109
1.2	Les méthodes de régularisation	110
1.3	Comportement d'une discontinuité forte	117
2	Formulation théorique du modèle de la rupture d'une capsule en écoulement	119
2.1	Déformation de la membrane en présence d'une discontinuité forte	120
2.2	Comportement de la membrane	127
2.3	Équilibre de la membrane	138
3	Discrétisation du modèle de la membrane	140
3.1	Choix des interpolations	141
3.2	Détermination de la base tangente à \bar{S}	144
3.3	Discrétisation des équations d'équilibre	144
3.4	Bilan	145
4	Étude de la stabilité de l'équilibre local et régularisation	146
4.1	Unicité des solutions du problème d'équilibre local	147
4.2	Problème d'instabilité de la nucléation des fissures cohésives	158
4.3	Justification du besoin de régularisation	160

4.4	Régularisation du problème d'équilibre local	168
5	Résolution du modèle de rupture d'une microcapsule en écoulement . . .	169
5.1	Résolution du problème d'interaction fluide-structure	169
5.2	Résolution du problème de la membrane	170
5.3	Résolution du problème local de l'équilibre d'une discontinuité . .	172
5.4	Intégration locale des lois de comportement	174
5.5	Bilan	178
6	Validation et premiers résultats	182
6.1	Remarque préliminaire	182
6.2	Validation de la régularisation visqueuse	183
6.3	Validation de l'invariance au maillage	184
6.4	Modélisation de la rupture de microcapsules en écoulement : pre- miers résultats	189
7	Conclusion	213
5	Conclusion et Perspectives	215
1	Conclusion	215
2	Perspectives	217
2.1	Résolution de problèmes numériques	217
2.2	Prise en compte de la rigidité de flexion	218
2.3	Description des fluides	219
2.4	Dialogue essais-calcul	222
A	Linéarisation des équations d'équilibre des discontinuités	225
B	Calcul des modules tangents cohérents des lois locales continue et discrète	233
0.1	Module continu	233
0.2	Modules discrets	236
C	Algorithme implémenté dans le code FORTRAN pour résoudre le modèle de la membrane avec des discontinuités fortes	241
D	Résultats complémentaires sur la rupture d'une membrane en traction	245
E	Résultats complémentaires sur la rupture d'une microcapsule en écoulement hyperbolique plan pour $G_c = 0.05$	247
	Bibliographie	255

Notations

Règles de notation

Dans ce document, on utilise les règles de notation suivantes :

— Les tenseurs sont désignés par un caractère souligné avec le nombre de traits correspondant à leur ordre.

Exemple : x désigne un scalaire, et $\underline{\underline{T}}$ désigne un tenseur d'ordre deux.

— Les matrices sont désignées par un caractère gras.

— Les indices écrits avec des lettres latines prennent leurs valeurs dans $\{1, 2, 3\}$, et ceux écrits avec des lettres grecques sont dans $\{1, 2\}$.

— On adopte la convention de sommation des indices répétés.

Dans le chapitre 4, on applique les règles de notation suivantes :

— Les quantités associées au milieu continu hors de la discontinuité sont surmontées d'une barre.

— Les quantités associées à la discontinuité sont surmontées de deux barres.

Il peut y avoir des exceptions à ces règles, elles sont alors précisées.

Principales notations

		Lettres latines		
a	Rayon de la capsule			40
$(\underline{A}_1, \underline{A}_2)$	Base tangente covariante sur la configuration de référence			41
$(\underline{\underline{a}}_1, \underline{\underline{a}}_2)$	Base tangente covariante sur la configuration courante S			41

A^{ES}	Paramètre de la loi d'Evans-Skalak	96
(\bar{a}_1, \bar{a}_2)	Base tangente covariante associée à \bar{S}	144
C	Paramètre de la loi de Skalak	91
Ca	Nombre capillaire	40
$\underline{\underline{C}}$	Tenseur des dilatations de Cauchy	79
Ca_C	Nombre capillaire critique	50
Ca_ℓ	Nombre capillaire limite	50
d	Variable d'endommagement	42
D_c	Valeur de d correspondant au seuil d'instabilité matérielle	66
d_c	Valeur critique de d lorsque Γ_0 est introduite	137
$\mathcal{D}(\square)$	Opérateur de dérivée directionnelle	173
D_{12}	Paramètre de Taylor dans le plan de cisaillement	52
d_{max}	Maximum spatial de d	51
\hat{d}_a	Valeurs nodales de \hat{u}	141
\underline{e}	Tenseur des déformations de Green-Lagrange	42
$\underline{\underline{e}}$	Déformations de Green-Lagrange associées à $\underline{\underline{F}}$	128
$(\underline{e}_x, \underline{e}_y, \underline{e}_z)$	Base cartésienne liée aux fluides	40
\underline{F}	Gradient de la transformation de S	42
f	Fonction seuil d'endommagement	44
\hat{f}	Gradient de transformation associé à \hat{u}	126
\mathbf{F}^{int}	Matrice colonne des efforts internes	145
\bar{F}	Partie régulière de \underline{F}	124
$\underline{\underline{F}}$	Partie singulière de \underline{F}	124
G_c	Densité linéique d'énergie de fissuration (modes I/II)	133
G_s	Module de cisaillement surfacique	40
h	Taille caractéristique d'une maille	147
\mathcal{H}^+	Fonction de Heaviside définie sur S_d	124
\mathbf{h}^e	Résidu de l'équation d'équilibre locale	145
$\mathbf{h}^{*,e}$	Résidu de l'équation d'équilibre locale régularisée	169
I_1, I_2	Invariants du tenseur des dilatations de Cauchy	43
J_s	Jacobien de la transformation de S	43
K_s	Module de dilatation surfacique	85
$\mathbf{K}_{h\alpha}^e$	Opérateur tangent cohérent associé à \mathbf{h}^e	173
$\mathbf{K}_{h\alpha}^{*,e}$	Opérateur tangent cohérent associé à $\mathbf{h}^{*,e}$	173
N_e	Nombre total d'éléments du maillage	47
$(\underline{n}^b, \underline{m}^b)$	Base tangente correspondant au transport de $(\underline{N}, \underline{M})$ par $\underline{\underline{F}}^{-T}$	136

N^+	Fonction de forme associée au noeud isolé	143
$\underline{N}, \underline{M}$	Vecteurs normal et tangent à Γ_0 sur S_0 (resp.)	124
N_n	Nombre total de nœuds du maillage	47
N_p	Fonction de forme associée au nœud p	47
$(\underline{n}^\#, \underline{m}^\#)$	Base tangente correspondant au transport de $(\underline{N}, \underline{M})$ par $\underline{\underline{F}}$	136
$\underline{\underline{P}}$	Premier tenseur des tensions de Piola-Kirchhoff	128
\underline{q}	Chargement surfacique sur la membrane	41
Q_N, Q_M	Modules de souplesse associés aux directions \underline{N} et \underline{M} (resp.)	133
S	Configuration courante de la membrane	40
S_0	Configuration initiale de la membrane	40
\hat{S}	Configuration de la membrane associée à $\underline{\underline{F}}$	122
\bar{S}	Configuration de la membrane associée à $\underline{\underline{F}}$	127
S_d	Voisinage d'une discontinuité Γ_0	120
$\underline{\underline{T}}$	Tensions de Cauchy dans la membrane	41
t_c	Tension nominale maximum de la loi cohésive (modes I/II)	133
\underline{t}_{Γ_0}	Vecteur traction nominal sur Γ_0	128
t_ℓ	Instant d'initiation de la rupture	53
\underline{T}_{Γ_0}	Vecteur traction matériel sur Γ_0	132
t_N, t_M	Composantes de \underline{T}_{Γ_0} (resp. \underline{t}_{Γ_0}) dans la base $(\underline{N}, \underline{M})$ (resp. $(\underline{n}^b, \underline{m}^b)$)	133
$\underline{T}_{\Gamma_0}^*$	Vecteur traction matériel sur Γ_0 avec la régularisation visqueuse	169
t_N^*, t_M^*	Composantes de $\underline{T}_{\Gamma_0}^*$ dans la base $(\underline{N}, \underline{M})$	169
\mathbf{t}^*	Matrice des composantes t_N^* et t_M^*	169
$\hat{\underline{u}}$	Champ de déplacement macroscopique	122
$\underline{\underline{u}}^{fic}$	Champ de déplacement fictif discontinu sur Γ_0	123
$\underline{\underline{u}}$	Saut de déplacement sur Γ_0	124
$\underline{\underline{U}}$	Saut de déplacement matériel sur Γ_0	131
\underline{v}	Vitesse dans le fluide	40
\underline{v}^∞	Vitesse dans le fluide non perturbé	40
\underline{X}	Position sur la membrane dans la configuration initiale	40
\underline{x}	Position sur la membrane dans la configuration courante	40
Y	Densité surfacique de taux de restitution d'énergie élastique	43
Y_C	Module d'écroutissage	46
Y_D	Seuil d'endommagement initial	46
Y^{max}	Maximum temporel de Y	46

Lettres grecques

α_N^e, α_M^e	Valeurs des composantes α_N, α_M dans un élément localisé	142
--------------------------	---	-----

α_N, α_M	Composantes de $\overline{\underline{U}}$ (resp. $\overline{\underline{u}}$) dans la base $(\underline{N}, \underline{M})$ (resp. $(\underline{n}^\#, \underline{m}^\#)$)	133
δ_{Γ_0}	Fonction de Dirac distribuée sur Γ_0	124
Γ_0	Ligne de discontinuité dans la configuration initiale	123
γ	Coefficient de viscosité de la loi cohésive régularisée	169
$\dot{\gamma}$	Taux de cisaillement caractéristique de l'écoulement	40
Γ_0^e	Discontinuité dans un élément localisé	142
κ	Seuil d'endommagement	46
λ_I, λ_{II}	Allongements principaux	79
μ	Viscosité des fluides	40
ν_s	Coefficient de Poisson surfacique	83
ξ_1, ξ_2	Coordonnées d'un point de la membrane	40
ϕ	Densité surfacique d'énergie libre d'Helmholtz	42
ϕ_e	Densité ϕ pour un matériau hyperélastique	78
$\underline{\underline{\pi}}$	Second tenseur des tensions de Piola-Kirchhoff	43
ψ	Paramètre de la loi de Mooney-Rivlin	76
φ	Fonction d'enrichissement de \underline{u}^{fic}	124
$\underline{\underline{\sigma}}$	Contraintes de Cauchy dans le fluide ou la membrane (3D)	40
$\llbracket \underline{\underline{\sigma}} \rrbracket \cdot \underline{n}$	Saut de traction à l'interface entre les fluides	40
$\underline{\underline{\tau}}$	Tenseur des tensions de Kirchhoff	140
$\underline{\underline{\xi}}_N, \underline{\underline{\xi}}_M$	Variables d'écoulement associées aux directions \underline{N} et \underline{M}	133

Autres symboles

$\underline{\underline{1}}_s$	Tenseur métrique sur la configuration courante	41
$\underline{\underline{1}}_s^0$	Tenseur métrique sur la configuration initiale	41
∇_s	Opérateur gradient surfacique sur la configuration courante	41
∇_s^0	Opérateur gradient surfacique sur la configuration initiale	123
$\overline{\nabla}_s$	Opérateur gradient surfacique sur \overline{S}	140
$\{S_0^{e,loc}\}$	Ensemble des éléments localisés	142

Chapitre 1

Introduction

Dans ce chapitre, on présente l'objet d'étude et le contexte de recherche de la thèse. Dans un premier temps, on introduit l'encapsulation, ses applications, la problématique du contrôle de la rupture des capsules lorsqu'elles sont en écoulement, et on précise le cadre dans lequel nous allons étudier ce problème. On présente ensuite les principaux résultats de la littérature sur le comportement des capsules en écoulement, en se focalisant sur la rupture pour les approches expérimentales, et en décrivant l'influence des principaux paramètres physiques étudiés pour les approches théoriques et numériques. Enfin, à partir de ces éléments, nous détaillons les objectifs de la thèse.

1 Capsules en écoulement

1.1 Encapsulation et applications

L'encapsulation consiste à entourer une substance (cœur) avec une membrane semi-perméable déformable. On désigne la particule formée du cœur et de la membrane comme étant une capsule. La cellule, qui est en contact avec son environnement par l'intermédiaire de sa membrane plasmique, peut être considérée comme une capsule.

La membrane contrôle les échanges entre le cœur et le milieu extérieur. L'encapsulation permet donc de réaliser des fonctions de stockage, transport, protection, et relargage contrôlé de la substance encapsulée. Le globule rouge permet d'illustrer les différentes fonctions de l'encapsulation. Chez l'être humain, le globule rouge est une cellule sans noyau qui contient une solution d'hémoglobine entourée par la membrane plasmique. La membrane protège l'hémoglobine de toute dégradation par les constituants du sang, elle permet de maintenir une concentration élevée d'hémoglobine dans la cellule, elle contrôle les échanges de dioxygène et de dioxyde de carbone, et elle permet de transporter efficacement l'hémoglobine à travers l'ensemble du système vasculaire grâce à sa résistance aux contraintes hydrodynamiques imposées par l'écoulement sanguin.

L'encapsulation est un procédé utilisé dans de nombreuses applications industrielles. Dans l'agroalimentaire, on encapsule certains composés volatiles pour qu'ils se conservent plus longtemps dans les aliments (Zuidam & Nedovic, 2010). Dans le domaine pharmaceutique et dans les cosmétiques, on encapsule les principes actifs pour qu'ils soient protégés pendant leur stockage, puis qu'ils soient libérés seulement lorsqu'ils doivent agir. Dans l'environnement, on utilise des capsules capables d'absorber sélectivement certains composés pour dépolluer les eaux. En papeterie, les capsules peuvent être greffées sur certains papiers pour libérer de l'encre localement dans les zones sous pression (papier carbone). Dans le domaine des biotechnologies, les capsules sont utilisées dans des catalyseurs pour immobiliser certains enzymes (Ma & Su, 2013).

L'application de l'encapsulation au domaine biomédical est prometteur pour le développement d'outils thérapeutiques et diagnostiques innovants. Une première voie de développement concerne les organes bioartificiels. Dans ce cas, les capsules peuvent être utilisées pour encapsuler des groupes de cellules issues d'un donneur afin de suppléer des fonctions endocrines déficientes chez un hôte. Les cellules encapsulées pourraient être des hépatocytes pour traiter les insuffisances hépatiques, ou encore des îlots pancréatiques pour le traitement du diabète, qui seraient directement introduits chez l'hôte (Su *et al.*, 2010). L'encapsulation permet alors de protéger les cellules d'une réponse immunitaire de l'hôte, et d'éviter leur dissémination. Dans le cas des maladies du sang ou des traumatismes entraînant une anémie, les capsules pourraient être utilisées pour du sang artificiel, en encapsulant de l'hémoglobine, qui autrement est une molécule toxique si elle est libre dans la circulation (Bauer *et al.*, 2010). Une autre voie de développement de l'encapsulation pour le domaine biomédical concerne les thérapies vasculaires. Les capsules pourraient être utilisées pour optimiser la délivrance d'un médicament en le transportant jusqu'à une zone cible et en contrôlant ensuite son relargage (Bhujbal *et al.*, 2014). La substance peut alors être diffusée continûment, ou bien, au contraire, on peut souhaiter déclencher la délivrance de la substance grâce à un stimuli externe. Une autre application possible est d'utiliser les capsules pour obstruer des vaisseaux qui alimentent un tissu ciblé, afin de pouvoir limiter l'hémorragie si on souhaite prélever ce tissu, ou pour l'asphyxier s'il s'agit d'un tissu tumoral. Pour cela, les capsules pourraient contenir un liquide qui est dans un état métastable qui se vaporise lorsqu'il est traversé par une onde acoustique. Ainsi, en focalisant une onde acoustique sur le tissu dont on veut empêcher la vascularisation, lors du passage des capsules, le liquide qu'elles contiennent va se vaporiser, augmentant ainsi le volume des capsules, qui restent alors bloquées dans les vaisseaux qui alimentent le tissu ciblé (Zhang *et al.*, 2010).

1.2 Problématique de la rupture et cadre de la thèse

Dans beaucoup de ces applications, les capsules sont en suspension dans un liquide, et elles sont donc soumises à des contraintes hydrodynamiques lorsque la suspension est en écoulement. Les propriétés mécaniques des capsules jouent alors un rôle décisif. Des expériences *in vivo* ont montré que des cellules sanguines artificielles pouvaient être endommagées dans la circulation, en fonction de leur forme et de leur déformabilité (Li *et al.*, 2005). De même, des expériences *in vitro* sur un foie bioartificiel extracorporel à lit fluidisé contenant des cellules du foie encapsulées, ont montré que les capsules pourraient se rompre facilement sous les contraintes hémodynamiques (Dixit, 1994). Ces exemples illustrent le besoin crucial de contrôler la rupture des capsules lorsqu'elles sont en écoulement, que ce soit pour l'empêcher ou la stimuler. Pour utiliser ou concevoir des capsules dont on contrôle le relargage, des expériences et des modèles permettant d'étudier la rupture des capsules en écoulement sont nécessaires.

Dans le cadre de cette thèse, on s'intéresse aux capsules composées d'un cœur liquide entouré d'une enveloppe solide déformable, destinées à être en suspension dans un liquide. Nous nous intéressons en particulier aux capsules artificielles composées d'une membrane polymérique. Ce sont des capsules utilisées typiquement pour des applications en bio-ingénierie. Ces capsules peuvent être obtenues par polymérisation interfaciale d'une goutte, la membrane peut alors être formée de polymères naturels ou synthétiques comme le poly-L-lysine, l'alginate, ou le polyacrylate (Kühntreiber *et al.*, 1999). Un autre procédé consiste à faire réticuler une protéine, comme de l'albumine, à la surface d'une goutte (Lefebvre *et al.*, 2008). Un procédé qui permet de contrôler finement les propriétés de la capsule est une technique de couche-par-couche où, par exemple, on dépose successivement des couches de poly-électrolytes de charges opposées sur un échafaudage qui est ensuite dissout (Johnston *et al.*, 2006). Les capsules obtenues sont alors généralement sphériques avec des tailles allant de quelques micromètres à quelques millimètres. On les désigne alors souvent par le terme de *microcapsules* à cette échelle (dans la suite on emploiera indifféremment les termes microcapsule ou capsule). L'épaisseur de la paroi de ces capsules par rapport à leur rayon est généralement faible. Par ailleurs, la paroi a généralement un comportement hyperélastique.

Peu d'études expérimentales sont parvenues à étudier la rupture d'une microcapsule en écoulement. Ces expériences sont en effet difficiles à mettre en œuvre car il faut contrôler l'écoulement pour imposer des forces hydrodynamiques suffisamment importantes sur un objet de petite taille en suspension, que l'on doit pouvoir observer au microscope. Par ailleurs, ces résultats expérimentaux permettent seulement de dé-

crire la rupture à l'échelle de la capsule et pour des conditions d'écoulement données. Pour exploiter ces résultats, il est nécessaire d'utiliser des modèles tenant compte de la rupture.

Le développement de modèles numériques est particulièrement en essor depuis plusieurs années car ils sont les seuls à donner accès à des quantités qui ne sont autrement pas mesurables sur une capsule, et à pouvoir prédire le comportement des capsules pour tout type de propriétés des fluides ou de la membrane, et pour toutes conditions d'écoulement. Ces modèles numériques permettent de manière générale d'étudier les déformations d'une capsule en écoulement. Cependant, aucune étude n'a décrit les phénomènes d'endommagement. Les enjeux sont pourtant cruciaux, car il est nécessaire d'avoir des modèles pour déterminer les conditions de rupture d'une capsule dans un écoulement donné, et pour savoir comment est relargué le fluide encapsulé.

L'objectif de la thèse est de développer le premier modèle numérique en interaction fluide-structure permettant de modéliser l'endommagement et la rupture d'une microcapsule en écoulement. Nous nous plaçons dans le cas où les fluides interne et externe sont newtoniens. Par ailleurs, d'après la petite taille des microcapsules, on suppose que le nombre de Reynolds associé aux écoulements interne et externe est faible. On considère donc des écoulements de Stokes. Le nombre adimensionnel qui contrôle l'interaction fluide-structure est alors le nombre capillaire, qui compare les forces visqueuses du fluide externe sur la capsule, aux tensions élastiques dans la membrane.

Dans la partie suivante, on décrit d'abord les principales observations expérimentales sur le comportement des capsules en écoulement, et en particulier jusqu'à leur rupture. Puis, on met en évidence les principaux résultats que les modèles ont permis d'obtenir sur l'influence qu'ont les différents paramètres généralement considérés, sur le comportement d'une capsule en écoulement. Nous reviendrons alors plus précisément sur les objectifs de cette thèse dans la dernière partie.

2 Comportement mécanique d'une capsule dans un écoulement

Dans cette partie, nous allons établir une revue des principales études expérimentales et théoriques sur le comportement des capsules en écoulement. On se limite au cas où la capsule est isolée (pas d'interactions avec d'autres capsules), et dans un écoulement que l'on peut supposer infini (non-confiné). Cette revue n'est toutefois pas exhaustive et on pourra consulter par exemple Barthès-Biesel (2016) pour plus de références. Des expériences sur la rupture de capsules en écoulements confinés sont évoquées dans le chapitre 2.

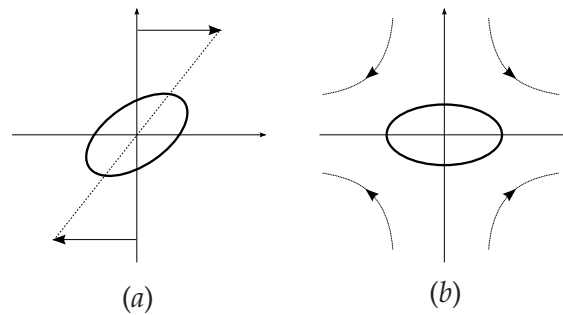


Figure 2.1 – Capsule en suspension dans un écoulement de cisaillement simple (a), et dans un écoulement hyperbolique plan (b).

2.1 Observations expérimentales

L'une des premières études expérimentales sur le comportement d'une capsule synthétique de petite taille en écoulement apparaît dans l'article de Barthès-Biesel (1991). Elle concerne l'étude de la déformation d'une capsule initialement sphérique d'environ 3 mm de diamètre formée d'une membrane en polylysine, et placée dans un écoulement hyperbolique plan (ou élongationnel) créé par quatre rouleaux (Figure 2.1b). La capsule s'allonge dans la direction de l'écoulement, et, si le taux de cisaillement de l'écoulement externe n'est pas trop important, la capsule atteint un état stationnaire. Plus le taux de cisaillement de l'écoulement externe est important, plus la capsule est allongée. Pour de faibles taux de cisaillement, la capsule a une forme ellipsoïdale. Ces résultats sont en bon accord avec le modèle asymptotique développé par Barthès-Biesel & Rallison (1981) décrivant la déformation des capsules sphériques dans des écoulements de cisaillement linéaire pour des petites déformations (ce modèle est décrit dans la partie suivante). Pour des taux de cisaillement plus importants, les extrémités de la capsule ont tendance à former des pointes. À partir d'une valeur seuil du taux de cisaillement, la rupture de la capsule se produit : des gouttes du fluide interne sont libérées au niveau des extrémités des pointes. La formation de pointes est aussi observée pour des gouttes lorsqu'elles sont placées dans le même écoulement, mais pour une goutte composée du même fluide que le fluide interne de la capsule, la goutte se déforme beaucoup plus lorsqu'elle est soumise au même taux de cisaillement.

Chang & Olbricht (1993*b,a*) ont par la suite étudié expérimentalement, et de manière plus systématique, la déformation de capsules synthétiques dans des écoulements hyperbolique plan et de cisaillement simple. Les capsules étudiées sont sphériques d'environ 3-4 mm de diamètre, et sont formées d'une membrane en polyamide (nylon). L'écoulement élongationnel est ici aussi créé avec quatre rouleaux. Pour des faibles va-

leurs du nombre capillaire, les observations sont les mêmes que celles observées par Barthès-Biesel (1991). Pour des valeurs du nombre capillaire plus importantes, un comportement durcissant est observé : la capsule se déforme de moins en moins lorsque le nombre capillaire augmente, et cette déformation semble tendre vers une valeur limite. Le comportement est différent de celui observé par Barthès-Biesel (1991), car la capsule reste ellipsoïdale et ne se rompt pas, bien que la déformation de la capsule soit étudiée jusqu'à des valeurs du nombre capillaire plus élevées dans l'étude de Chang & Olbricht (1993b). D'après les auteurs, ce comportement de la capsule semble révéler un comportement durcissant de la membrane, qui pourrait s'expliquer par des mécanismes d'alignement des chaînes polymériques dans les directions des contraintes, et de cristallisation sous les contraintes locales imposées, ces deux mécanismes augmentant ainsi le module élastique effectif local de la membrane. L'étude en écoulement élongationnel révèle par ailleurs qu'il existe une valeur seuil du nombre capillaire à partir duquel les capsules ont des déformations permanentes si on arrête l'écoulement, et cette déformation permanente est d'autant plus importante que la valeur du nombre capillaire pour laquelle on arrête l'écoulement est importante. Les déformations visqueuses étant peu probables considérant les longs temps de repos, il est donc proposé par les auteurs que la membrane dont sont constituées leurs capsules puissent se restructurer sous des contraintes importantes à cause d'une réticulation incomplète, et de la présence de défauts. En plaçant ces capsules ayant des déformations permanentes dans des écoulements présentant de la vorticit , il est observ  que les d formations permanentes disparaissent.

Chang & Olbricht (1993a)  tudient aussi la d formation d'une capsule dans un  coulement de cisaillement simple (Figure 2.1a). L'exp rience est r alis e   l'aide d'un rh oscope : la capsule est plac e dans un rh om tre de Couette, et elle est positionn e pr cis ment au milieu des deux cylindres de mani re   ce que son centre de masse reste fixe par rapport aux cam ras qui la filme. Pour des valeurs faibles du nombre capillaire, on observe qualitativement les r sultats pr dits par les mod les asymptotiques de Barth s-Biesel (1980) et Barth s-Biesel & Rallison (1981) : la capsule s'allonge dans la direction de d formation de l' coulement (faisant un angle proche de 45 degr s par rapport   la direction de l' coulement) et atteint une forme ellipso dale relativement stable sur laquelle la membrane est en rotation dans le m me sens que la vorticit  de l' coulement. Cette cin matique avait initialement  t  observ e par Schmid-Sch nbein & Wells (1969) pour les globules rouges et avait alors  t  d nomm e mouvement de "tank-treading", qui est toujours le terme g n ralement utilis  pour d crire ce mouvement. Cependant,

contrairement aux résultats prédits par la théorie de Barthès-Biesel (1980) et Barthès-Biesel & Rallison (1981), la capsule n'atteint pas un état stationnaire, elle est dans un régime périodique où la déformation de la capsule, et son angle d'inclinaison par rapport à la direction de l'écoulement, sont légèrement oscillants. Toutefois, tant que les déformations restent petites, l'évolution de la valeur moyenne de la déformation évolue bien linéairement en fonction du taux de cisaillement comme le prévoit la théorie. Des études, décrites dans la prochaine partie, ont montré plus tard que les faibles défauts de sphéricité des capsules permettent d'expliquer le phénomène oscillant (mouvement de "swinging"). Comme dans le cas de l'écoulement hyperbolique, la capsule se déforme de moins en moins à mesure que le nombre capillaire augmente, et la déformation de la capsule semble tendre vers une valeur limite. Dans l'écoulement de cisaillement simple, les capsules peuvent aussi avoir des déformations permanentes après que l'écoulement soit arrêté. En écoulement de cisaillement simple, chacune des capsules a été déformée jusqu'à rupture. La rupture s'initie à l'un des sommets du grand axe de la capsule, puis la fissure se propage dans le plan de cisaillement (contenant le grand axe et le petit axe de la capsule), jusqu'à la rupture complète de la capsule correspondant à sa séparation en deux parties. Les auteurs montrent, à partir d'un modèle en petites déformations, que l'endroit où s'est initié la rupture est corrélé avec la position où la membrane est la plus amincie dans le plan de cisaillement. Sur des tests d'aspiration par micropipette appliqués à des morceaux de la membrane des capsules, la rupture de la membrane s'initie lorsque l'épaisseur s'est amincie de 50 %.

Plusieurs études expérimentales ont par la suite utilisé le principe du rhéoscope pour étudier le comportement des capsules dans des écoulements de cisaillement simple. Walter *et al.* (2000) ont reproduit une expérience similaire à celle de Chang & Olbricht (1993a) en étudiant le comportement de capsules sphériques en polyamide en écoulement de cisaillement simple. La formulation et le procédé de fabrication des capsules sont semblables. Les capsules sont plus petites, avec un diamètre variant de 300 μm à 500 μm . Dans leur étude, Walter *et al.* n'ont pas indiqué si les capsules ont des déformations permanentes lorsque l'écoulement est arrêté. Par ailleurs ils n'ont pas observé de rupture des capsules, en particulier parce que les valeurs du taux de cisaillement devaient rester limitées afin de rester dans un régime d'écoulement correspondant à une valeur faible du nombre de Reynolds.

Par la suite, Walter *et al.* (2001) ont proposé une nouvelle étude expérimentale sur le comportement de capsules sphériques en écoulement de cisaillement simple. Cette fois-ci, en plus de capsules formées d'une membrane en polyamide avec un monomère

ayant trois groupements amine, les auteurs étudient aussi le comportement de capsules avec une membrane en polyamide formée à partir d'un monomère ayant deux groupements amine (diamine), et des capsules formées d'une membrane en polysiloxane. Le comportement des trois capsules dans l'écoulement est semblable dans la plupart des cas, et correspond au comportement décrit par Walter *et al.* (2000). Les auteurs étudient particulièrement le phénomène d'oscillation de la déformation, et de l'inclinaison de la capsule. Les deux oscillations sont sinusoïdales et de même fréquence, avec un déphasage de 90 degrés. Pour les capsules en polyamide formées à partir d'un diamine et celles avec une membrane en polysiloxane, il est observé que dans certains cas des plis peuvent se former sur la membrane dans la région centrale, lorsque la capsule est observée dans le plan de cisaillement (Figure 2.1a). Les plis restent alignés dans la direction d'élongation de la capsule alors que la membrane est en rotation.

Koleva & Rehage (2012) ont réalisé une étude sur le comportement de capsules sphériques en polysiloxane dans un écoulement de cisaillement simple, jusqu'à rupture. La fabrication des capsules à partir d'un procédé microfluidique (jonction en T) permet de contrôler la dispersion du diamètre des capsules entre 300 μm et 330 μm (il est entre 600 μm et 1000 μm dans l'étude de Walter et al (2001)). Cette étude cherche en particulier à déterminer quelle est l'influence de la présence de défauts dans la membrane d'une capsule, sur son comportement en écoulement. Pour cela, trois types de capsules sont fabriquées, contenant des degrés différents de défauts dans leur membrane. Pour créer ces défauts, au moment de la fabrication d'une capsule, de l'eau est introduite, en faible concentration, dans la goutte (phase organique) autour de laquelle se forme la membrane de la capsule. Les trois types de capsules correspondent à trois concentrations en eau différentes dans la phase organique. On s'attend à ce que plus la concentration en eau est importante, moins la membrane est homogène. Pour les capsules ayant la membrane la plus homogène (concentration en eau dans la phase organique la plus faible), en augmentant progressivement le taux de cisaillement, la rupture des capsules est observée pour une valeur de déformation de la capsule entre 1.5%⁽¹⁾ et 2.4%. Au moment de l'initiation de la rupture, la membrane est saillante au niveau des deux sommets du grand axe de la capsule, puis, la capsule s'allonge dans la direction de déformation de l'écoulement, pour une très faible augmentation du taux de cisaillement. L'ordre de grandeur de la déformation à rupture est beaucoup plus faible que celui des capsules

1. Cette déformation est mesurée par le paramètre de Taylor $D = (L - B)/(L + B)$, où L et B sont les longueurs du grand axe et du petit axe, respectivement, de la forme ellipsoïdale du contour de la capsule lorsqu'elle est observée dans le plan de cisaillement (voir Figure 2.1a).

en polyamide, où la rupture est observée pour des déformations à partir de 25% par Chang & Olbricht (1993a).

Pour les capsules ayant la membrane *a priori* la moins homogène (concentration en eau dans la phase organique la plus grande), lorsque le taux de cisaillement est augmenté progressivement, le comportement des capsules est très différent de celui des capsules ayant la membrane la plus homogène. En particulier, à partir d'un certain seuil du taux de cisaillement, pour lequel la déformation de la capsule est de l'ordre de 2.5%, la pente de la courbe d'évolution de la déformation de la capsule avec le taux de cisaillement, augmente fortement, et ce seuil coïncide avec l'apparition de déformations permanentes de la capsule. En continuant d'augmenter le taux de cisaillement, la rupture de la capsule se produit lorsque la déformation est comprise entre 8% et 10%. À l'instant d'initiation de la rupture, par rapport aux capsules ayant la membrane la plus homogène, les capsules ont une forme plus régulière (pas de pointes). Il est intéressant de constater qu'une fois que la capsule a été déformée jusqu'à rupture, si l'écoulement est interrompu, la capsule reprend sa forme sphérique, sans déformations permanentes. Pour le troisième type de capsules, où la concentration en eau dans la phase organique a une valeur intermédiaire entre celles correspondant aux deux autres types de capsules, Koleva & Rehage (2012) parviennent à observer des plis dans la région équatoriale (centrale) de la membrane de la capsule, comme cela avait été observé par Walter *et al.* (2001). Ces plis sont présents jusqu'à une déformation de la capsule de 2%. Jusqu'à cette valeur de déformation, l'évolution de la déformation de la capsule en fonction du nombre capillaire est linéaire. Puis, au-delà de 2% de déformation, la pente de la courbe diminue, et, pour un nombre capillaire de l'ordre de 0.01, la rupture s'initie et elle a lieu principalement dans la zone centrale de la capsule. À partir de l'initiation de la rupture, en continuant de faire augmenter le nombre capillaire, la déformation de la capsule croît fortement en fonction du nombre capillaire.

L'étude de Koleva & Rehage (2012) met en évidence que des capsules avec des membranes ayant *a priori* des degrés d'homogénéités différents, peuvent avoir des comportements jusqu'à rupture très différents. Par exemple, les capsules avec les membranes les moins homogènes ont des déformations permanentes avant rupture que les autres types de capsules ne semblent pas avoir. Par ailleurs, d'après les auteurs, le fait que les plis ne se forment que pour le type de capsules intermédiaire, pourrait révéler que les trois types de capsules peuvent être par exemple dans des états de précontraintes différents (en particulier pour les capsules avec la membrane la plus homogène). L'étude montre donc de manière générale qu'un contrôle précis des procédés est crucial pour

pouvoir fabriquer des capsules dont on puisse contrôler précisément la rupture. Pour des résultats complémentaires sur l'étude de la rupture de capsules en polysiloxane en écoulement, on peut consulter aussi les travaux de Unverfehrt *et al.* (2014, 2015).

Joung *et al.* (2020) ont étudié le comportement de capsules sphériques dont la membrane est formée d'albumine de sérum humain (HSA) et d'alginate, en écoulement de cisaillement simple, jusqu'à rupture. Deux types de capsules sont étudiées : des capsules prégonflées ou non. Le rayon des capsules prégonflées est augmenté de 25% par rapport à leur rayon initial. Les capsules ont des comportements semblables à ceux déjà décrits (Chang & Olbricht, 1993a; Walter *et al.*, 2000; Koleva & Rehage, 2012) : la capsule est en mouvement de tank-treading, la déformation et l'angle d'inclinaison de la capsule oscillent autour d'une valeur moyenne. Toutefois, dans cette étude, des déformations et des valeurs du nombre capillaire plus importantes sont atteintes avant la rupture. L'évolution de la déformation en fonction du nombre capillaire est d'abord relativement linéaire tant que le nombre capillaire est petit, puis, la pente diminue fortement pour des valeurs du nombre capillaire plus élevées. Pour une valeur donnée du nombre capillaire, les capsules prégonflées sont moins déformées que les capsules non-prégonflées. Pour des valeurs faibles du nombre capillaire, la forme de la capsule déformée est relativement ellipsoïdale. Pour des valeurs modérées du nombre capillaire, des pointes se forment aux deux pôles de la capsule (capsule fusiforme), et ces pointes sont alignées avec la direction dans laquelle la capsule s'allonge. Pour des valeurs importantes du nombre capillaire, les pointes s'allongent et se courbent dans la direction de l'écoulement donnant une forme de sigmoïde à la capsule. Considérant les formes non ellipsoïdales observées, la déformation de la capsule étant évaluée à partir du paramètre de Taylor, il n'est pas clair de savoir comment les auteurs ont défini les longueurs des axes de la capsule dans ces cas là. Au cours de l'augmentation progressive du nombre capillaire, la rupture de la capsule se produit lorsque la déformation atteint un seuil entre 60% et 70% pour les deux types de capsules. Au moment de la rupture, la capsule est pincée au niveau de l'équateur, formant deux lobes. Finalement, les deux lobes s'éloignent l'un de l'autre. D'après les auteurs, la rupture semble s'initier dans le plan de cisaillement, à l'endroit où la capsule est pincée. Pour le justifier, Joung *et al.* décrivent l'état de la membrane au moment de la rupture d'après le modèle analytique de Keller & Skalak (1982). Ils font donc une hypothèse forte sur la cinématique de la membrane. Les interprétations sont faites dans les hypothèses de ce modèle, c'est-à-dire tant que la forme de la capsule est ellipsoïdale. D'après ce modèle, l'endroit où la rupture semble s'initier au niveau de l'équateur coïncide avec la position dans le plan de cisaillement

où l'épaisseur de la membrane a le plus diminué, et où la tension principale située dans le plan de cisaillement est la plus importante.

Joung *et al.* (2020) ont aussi cherché à étudier les phénomènes de fatigue. En effet, dans le cas d'une capsule en écoulement de cisaillement simple, les points matériels de la membrane subissent un chargement cyclique. Pour cela, ils étudient l'influence de l'intensité du taux de cisaillement, sur le nombre de cycles de rotation de la membrane jusqu'à rupture. Le mode de rupture de la capsule est similaire à celui observé dans le cas où le nombre capillaire est augmenté progressivement. Pour les deux types de capsules, plus le nombre capillaire est important, plus le nombre de tours que fait la capsule jusqu'à rupture diminue. Dans le cas de la capsule non prégonflée, le nombre de tours jusqu'à rupture varie de 10^3 à 10^1 , pour un nombre capillaire variant de 0,71 à 1,55. Et dans le cas de la capsule prégonflée, le nombre de tours jusqu'à rupture est de l'ordre de 10^2 et il est seulement divisé par quatre lorsque le nombre capillaire varie de 1,78 à 4,01. Les auteurs justifient le mécanisme de rupture par fatigue à partir du modèle analytique de Keller & Skalak (1982). D'après ce modèle, la tension principale maximum qui s'exerce sur un point matériel situé dans le plan de cisaillement qui suit le mouvement de tank-treading de la membrane, a une évolution périodique sur un cycle de rotation de la membrane. Ainsi, les points matériels dans le plan de cisaillement subissent une contrainte cyclique, qui va finalement mener à la fatigue de la membrane. Par ailleurs, l'amplitude crête-à-crête de cette tension augmente avec le nombre capillaire. Ainsi, en augmentant le nombre capillaire, on augmente l'amplitude du chargement cyclique, et donc, pour initier une rupture par fatigue, il y a alors besoin de moins de cycles, et donc de nombre de tours de la membrane.

2.2 Modèles analytiques et numériques

Le développement de modèles est nécessaire pour comprendre les comportements complexes d'une capsule en écoulement que nous avons décrit. Le problème d'interaction fluide-structure à résoudre est alors complexe car il y a un couplage fort entre les fluides et la paroi de la capsule. Différents modèles ont été développés. Ils permettent de comprendre l'influence qu'ont les propriétés de la paroi, le contraste de viscosité des fluides interne et externe, et l'intensité de l'écoulement du fluide externe, sur la déformation d'une capsule.

L'objectif de cette partie est de mettre en évidence les principaux résultats qui ont été établis sur l'influence des différents paramètres, et les principales méthodes numériques qui ont été développées. Nous terminons cette partie en présentant le seul type

de modèle de rupture d'une capsule en écoulement qui semble avoir été développé, et nous en soulignons les limites importantes.

2.2.1 Modèles analytiques

Parce que les modèles développés jusque là ne rendaient pas compte du comportement des gouttes entourées d'une interface ayant des propriétés élastiques, au premier rang desquels figurent les globules rouges, Barthès-Biesel (1980) a réalisé les premiers travaux théoriques sur l'étude des capsules en écoulement avec un modèle asymptotique.

La capsule est initialement sphérique et est étudiée dans un écoulement standard de cisaillement simple. L'écoulement des fluides interne et externe est modélisé avec les équations de Stokes, et le mouvement de l'enveloppe est donné par l'équilibre d'une membrane hyperélastique avec une loi de Mooney-Rivlin. La méthode asymptotique permet d'obtenir la solution stationnaire lorsque les déformations sont petites. La solution associée au développement à l'ordre un, en fonction de l'intensité de l'écoulement (nombre capillaire), met en évidence que la forme stationnaire de la capsule est ellipsoïdale et orientée dans la direction d'élongation de l'écoulement, qui est incliné de 45 degrés par rapport à la direction de l'écoulement. Sur cette forme stationnaire, la membrane est en rotation dû à la composante de vorticité de l'écoulement (mouvement de "tank-treading"). La solution associée au développement à l'ordre deux en fonction du nombre capillaire permet de voir l'influence du nombre capillaire et du contraste de viscosité entre les fluides lorsque le nombre capillaire reste petit. Lorsque le nombre capillaire augmente, la capsule est davantage déformée et s'incline vers la direction d'écoulement. Augmenter la viscosité du fluide interne par rapport à celle du fluide externe a le même effet que l'augmentation du nombre capillaire. Un autre résultat intéressant est que la période de rotation de la membrane est indépendante du contraste de viscosité mais dépend seulement du nombre capillaire, contrairement aux gouttes pour lesquelles cette période dépend aussi du contraste de viscosité entre les deux liquides.

Ce modèle asymptotique a par la suite été davantage développé, avec les études de Barthès-Biesel & Rallison (1981) et de Barthès-Biesel & Sgaier (1985).

L'étude de Barthès-Biesel & Rallison (1981) a permis d'étudier la phase transitoire de la déformation d'une capsule initialement sphérique dans un écoulement de cisaillement lorsque la capsule subit de petites déformations. Par ailleurs, dans cette étude, d'autres lois hyperélastiques pour la membrane ont été étudiées, avec par exemple la loi de Skalak *et al.* (1973) plus adaptée aux rhéologies de membranes bi-dimensionnelles comme

celles des globules rouges. Ce modèle permet par exemple d'étudier les phénomènes de relaxation, mais il est insuffisant pour interpréter des expériences de relaxation de globules rouges, comme celles de Schmid Schoenbein (1975), car le modèle ne tient pas compte de la viscosité de la membrane et la forme initiale sphérique de la capsule ne correspond pas à celle d'un globule rouge au repos.

L'étude de Barthès-Biesel & Sgaier (1985) a permis d'étudier l'influence de la viscosité de la membrane sur la déformation d'une capsule initialement sphérique dans un écoulement de cisaillement lorsque la capsule subit de petites déformations. La loi de comportement de la membrane est modélisée avec un modèle de Kelvin-Voigt. Différentes lois hyperélastiques sont considérées. Lorsque les forces élastiques et visqueuses dans la membrane sont comparables, pour les deux lois hyperélastiques étudiées, la capsule atteint un état stationnaire où elle a une forme ellipsoïdale (la membrane tourne sur cette forme fixe) dont la déformation et l'inclinaison par rapport à la direction de l'écoulement dépend du rapport entre les forces élastiques et visqueuses dans la membrane : plus les forces élastiques prédominent moins la capsule est déformée et son orientation tend vers l'axe d'élongation incliné de 45 degrés par rapport à la direction de l'écoulement (le cas purement élastique correspond au résultat donné par Barthès-Biesel (1980) décrit plus haut) ; plus les forces visqueuses dans la membrane prédominent plus la capsule est déformée et plus elle s'incline dans la direction de l'écoulement. Lorsque les forces élastiques sont négligeables par rapport aux forces visqueuses dans la membrane, la capsule n'atteint pas d'état stationnaire et reste dans un régime périodique où elle a une forme ellipsoïdale dont l'angle d'inclinaison par rapport à la direction de l'écoulement et la déformation sont de période $2\pi/\dot{\gamma}$ (où $\dot{\gamma}$ est le taux de cisaillement), et, sur une période donnée, l'angle évolue linéairement de +45 degrés à -45 degrés par rapport à la direction de l'écoulement, et l'évolution de la déformation sur la même période est sinusoïdale, valant 0 lorsque la capsule est inclinée à +45 degrés et -45 degrés (la capsule est alors sphérique) et maximum lorsqu'elle est alignée avec la direction de l'écoulement. La membrane tourne sur la forme ellipsoïdale à la même vitesse que la vortacité de l'écoulement, donc avec la période $4\pi/\dot{\gamma}$.

Dans les modèles analytiques développés durant la même période, il existe aussi les travaux de Keller & Skalak (1982) et de Secomb & Skalak (1982). Ces modèles permettent de tenir compte d'une forme ellipsoïdale de la capsule. En contre-partie, le comportement de la membrane n'est pas modélisé. À la place, la forme ellipsoïdale de la capsule est fixe et les seuls degrés de liberté sont la rotation rigide de l'ellipsoïde autour de l'axe de vortacité de l'écoulement de cisaillement, et la rotation de la membrane sur sa forme

fixe. Toutefois, le modèle de Keller & Skalak (1982) est le premier à avoir été capable de rendre compte de la transition entre les mouvements de retournement (« flipping » ou « tumbling ») et de "tank-treading" des globules rouges (si on exclut le modèle 2D de Kholeif & Weymann (1974)).

2.2.2 Modèles numériques

Li *et al.* (1988) ont proposé le premier modèle numérique permettant de résoudre le problème d'interaction fluide-structure d'une capsule en écoulement en grandes déformations. Le problème est résolu dans le cadre d'un modèle 2D axisymétrique pour une capsule dans un écoulement hyperbolique. La capsule est modélisée comme une membrane dépourvue de rigidité de flexion dans un écoulement, interne et externe, de Stokes. Le schéma de résolution du problème d'interaction fluide-structure proposé n'est pas classique, il a été repris depuis par toutes les études numériques sur les capsules en écoulement : à un pas de temps donné, la position de la membrane est connue, le problème solide est d'abord résolu pour déterminer les efforts surfaciques externes (saut de contraintes visqueuses à travers la membrane), puis le problème fluide est résolu afin de déterminer le champ de vitesse des points de la membrane, enfin la vitesse est intégrée pour déterminer la position de la membrane au pas de temps suivant. Pour le problème fluide, s'inspirant de modèles numériques développés pour les gouttes, l'écoulement de Stokes est reformulé dans le cadre de la méthode des intégrales de frontières (Ladyzhenskaya, 1969). Le modèle solide correspond à l'équilibre de la membrane, qui relie les tensions interne aux efforts surfaciques externes. Le modèle permet d'étudier l'état stationnaire atteint pour différentes formes de capsules (aplaties ou allongées) en fonction du nombre capillaire, pour une membrane ayant un comportement néo-Hookeen. Dans tous les cas, il est constaté qu'il existe une valeur critique du nombre capillaire au-delà de laquelle il n'y a plus d'état stationnaire et la capsule s'allonge continuellement. Il est donc postulé que ce nombre capillaire correspond au seuil pour lequel la capsule se rompt. Toutefois il n'est pas proposé de critère de rupture permettant de dire à quel instant et à quel endroit la capsule va se rompre.

Pozrikidis (1995) et Zhou & Pozrikidis (1995) ont développé le premier modèle numérique tridimensionnel (3D) d'une capsule en écoulement. Ces études complètent les résultats de Barthès-Biesel (1980) et Barthès-Biesel & Rallison (1981) sur l'étude des capsules en écoulement de cisaillement simple, pour des déformations plus importantes. Le modèle permet d'étudier l'influence du nombre capillaire et de la forme initiale de la capsule. Toutefois, ces deux études n'avaient pas permis d'étudier la phase transitoire

de déformation sur un temps long à cause du manque de robustesse de la méthode numérique employée et des performances de calcul. Le phénomène de rupture des capsules observé par Chang & Olbricht (1993a) est analysé par Pozrikidis (1995). La zone de rupture coïncide avec la position où la membrane est la plus amincie, et en même temps, où la tension principale maximale est la plus grande dans le plan de cisaillement. Un éventuel critère de rupture n'est donc pas clairement établi. Par ailleurs, l'amincissement de la membrane et la tension principale maximale ne sont pas donnés pour des points de la membrane hors du plan de cisaillement.

Différentes stratégies de résolution numérique du problème 3D d'une capsule en écoulement ont été développées depuis. Ces stratégies diffèrent dans les méthodes qu'elles utilisent pour résoudre les problèmes solide et fluide. En revanche elles reposent toutes sur le même schéma de couplage fluide-structure proposé par Li *et al.* (1988). Le problème fluide, donné par les équations de Stokes, est généralement résolu par les méthodes des intégrales de frontière (BI) (Ramanujan & Pozrikidis, 1998; Dodson & Dimitrakopoulos, 2008), des frontières immergées (Kessler *et al.*, 2008), et de lattice-Boltzmann (Sui *et al.*, 2010). Toutes ces méthodes ont l'avantage d'éviter le remaillage des domaines fluides à chaque pas de temps, qui est très coûteux. Le problème solide, qui permet de déterminer le chargement transmis par l'enveloppe au fluide, est généralement obtenu par l'équilibre d'une membrane hyperélastique. Lorsque l'équilibre est résolu sous forme forte, le chargement est constant par morceau (Li & Sarkar, 2008), projeté sur une base de fonctions d'ordre élevées (Lac *et al.*, 2004), ou discrétisé par une méthode spectrale (Dodson & Dimitrakopoulos, 2008). La résolution sous forme faible par la méthode des éléments finis (EF) a été introduite plus récemment (Doddi & Bagchi, 2008; Walter *et al.*, 2010).

Le premier modèle 3D d'une capsule permettant d'étudier l'influence de la rigidité de flexion de la membrane d'une capsule sur son comportement en écoulement de cisaillement simple a été proposé par Pozrikidis (2001). Dans ce modèle, la rigidité de membrane, c'est-à-dire celle associée aux déformations dans le plan tangent de la membrane, n'est pas liée à la rigidité de flexion. Ce modèle semble donc plutôt approprié pour les membranes anisotrope comme la membrane des globules rouges ou les membranes bilipidiques. Par ailleurs, le moment de flexion est calculé directement à partir de la variation de la courbure de la surface moyenne de la membrane, ce qui implique que la coque est supposée avoir une cinématique de Kirchhoff-Love. Une des limites de cette étude est que les résultats sont obtenus pour des modules de rigidité de flexion importants. Ces résultats ne sont donc a priori pas valables pour des membranes isotropes,

car, pour les modules de rigidité de flexion considérés, elles correspondraient alors à des membranes épaisses, ce qui n'entre pas dans le cadre des hypothèses de coques fines utilisées, et ce n'est pas non plus en accord avec l'hypothèse d'une cinématique de Kirchhoff-Love, qui est valable lorsque les coques sont particulièrement minces car cette cinématique suppose que les contraintes de cisaillement transverse n'influencent pas la courbure de la coque.

Dupont *et al.* (2015) ont proposé un modèle de coque mince construit à partir d'un modèle 3D isotrope. Ainsi, les propriétés élastiques de flexion sont liées aux propriétés élastiques associées aux déformations dans le plan tangent de la membrane. Le module de rigidité de flexion est donc directement lié à l'épaisseur de la coque. Ce modèle semble donc adapté pour modéliser le comportement de membranes polymériques isotropes. La coque a une cinématique de Reissner-Mindlin, ce qui permet de tenir compte des déformations dues aux contraintes de cisaillement transverses, et en particulier de leur effet sur la courbure de la coque. Ce modèle met en évidence que pour une capsule sphérique en écoulement de cisaillement simple, la rigidité de flexion a très peu d'effet sur la déformation de la capsule si on rapporte les forces visqueuses du fluide externe aux tensions élastiques planes dans la membrane, autrement dit, la déformation de la capsule ne dépend que du nombre capillaire. Il est supposé que ce résultat soit généralisable pour des capsules sphériques dans d'autres types d'écoulements car comme leur déformation à volume constant impose que la surface de la membrane soit agrandie, les déformations planes sont importantes et peuvent rester prépondérantes devant les déformations dues à la flexion. En revanche pour les capsules non sphériques, la rigidité de flexion doit avoir un effet important pour un nombre capillaire donné, car les déformations dues à la flexion peuvent devenir comparables ou prépondérantes par rapport aux déformations planes. Dans cette étude, le modèle de coque est par ailleurs utilisé pour estimer le module de flexion ainsi que l'épaisseur de la membrane des capsules en polysiloxane étudiées par Koleva & Rehage (2012) à partir de l'étude du plissement de la membrane de ces capsules lorsqu'elles sont en écoulement de cisaillement simple. Connaissant l'épaisseur de la membrane, il pourrait être intéressant de déterminer comment sont distribuées par exemple les contraintes/déformations principales maximum (les contraintes et déformations n'étant pas uniforme dans l'épaisseur) pour les valeurs du nombre capillaire à partir duquel est observé la rupture.

Les travaux de Foessel *et al.* (2011) et de Bagchi & Kalluri (2010) ont permis d'étudier l'influence du contraste de viscosité entre les fluides interne et externe sur le comportement d'une capsule en écoulement de cisaillement simple. On définit le contraste de

viscosité comme le rapport, noté λ , de la viscosité du fluide interne, sur celle du fluide externe. Quelle que soit la valeur du contraste de viscosité, la capsule conserve le mouvement de tank-treading. Lorsque le fluide externe est le plus visqueux ($\lambda < 1$), le fluide interne en rotation a moins d'effet sur la membrane et la capsule s'oriente donc davantage vers la direction d'élongation du fluide externe (qui est inclinée de 45 degrés par rapport à la direction d'écoulement) par rapport au cas où les fluides ont la même viscosité. Pour une même force d'écoulement, la capsule est alors plus déformée que dans le cas $\lambda = 1$. Le fluide interne ayant de moins en moins d'effet lorsque λ diminue, il existe un seuil critique $\lambda = 0.2$ en dessous duquel la variation de λ n'a pratiquement plus d'effet sur la déformation de la capsule. Par ailleurs, la déformation de la capsule pour $\lambda = 0.2$ est seulement 10% plus grande que la déformation pour $\lambda = 1$, et l'angle d'inclinaison de la capsule seulement 20% plus grand. Comme le soulignent Foessel *et al.* (2011), ces résultats sont importants, car dans les expériences réalisées en écoulement de cisaillement simple, pour déformer les capsules avec des taux de cisaillement qui permettent de garder des valeurs du nombre de Reynolds petites, on suspend les capsules dans des fluides suffisamment visqueux, et le contraste de viscosité se trouve alors être petit $\lambda < 0.1$. Ainsi, en comparant des résultats de calculs obtenus pour $\lambda = 1$ avec des expériences réalisées pour $\lambda < 0.1$, le calcul introduit une erreur qui reste donc acceptable. Enfin, lorsque le fluide interne est le plus visqueux $\lambda > 1$, le fluide interne en rotation a davantage d'effet sur le comportement de la capsule que dans le cas $\lambda < 1$. Plus précisément, lorsque la viscosité du fluide interne augmente, la capsule s'aligne de plus en plus avec la direction de l'écoulement, elle s'écarte alors de la direction d'élongation de l'écoulement et la capsule est donc de moins en moins déformée.

Nous terminons cette partie en évoquant les seuls types de modèles qui existent, à notre connaissance, sur la rupture d'une capsule en écoulement. Ce sont les modèles développés dans les travaux de Alexiadis (2014, 2015) et de Rahmat *et al.* (2019). Dans ces différents travaux, ce sont les mêmes modèles qui sont utilisés, mais nous n'évoquerons que celui de Rahmat *et al.* (2019), car c'est le seul modèle tridimensionnel. Ce modèle est basé sur une méthode sans maillage, où les fluides interne et externe sont modélisés par une méthode smoothed particle hydrodynamics (SPH), et la membrane est modélisée avec une méthode mass-spring model (MSM), aussi appelée lattice spring model, ou encore coarse grained molecular dynamics. La membrane est donc modélisée par un réseau de ressorts. La rupture est modélisée en imposant une valeur limite d'extension des ressorts. Lorsque ce seuil est atteint, le ressort est cassé (sa rigidité est nulle). La capsule est étudiée en écoulement de cisaillement simple. Une première limite

(importante) du modèle est qu'un seul maillage de ressorts a été utilisé, alors qu'il a été montré que dans les modèles MSM, les solutions sont très dépendantes du maillage (Omori *et al.*, 2011). Toutefois, la limite qui semble être la limite majeure à ce modèle, est le modèle de rupture en lui-même. Tout d'abord, on ne sait pas quelle est l'influence du maillage des ressorts sur le résultat. Par ailleurs, il n'y a pas de modèle de dissipation dans le modèle de rupture de la membrane. Enfin, on ne sait pas quelle est l'influence du paramètre du modèle de rupture, c'est-à-dire, la limite d'extension des ressorts. On retrouve les mêmes limitations dans l'étude de Ruiz-Riancho *et al.* (2021) (où la capsule n'est pas en écoulement, mais comprimée entre deux plaques), bien qu'il y ait en plus, dans cette étude, une comparaison avec une expérience.

3 Objectifs et plan de l'étude

La revue de l'état de l'art a montré que les capsules ont un comportement complexe lorsqu'elles sont en écoulement. On a vu que les différentes études numériques ont permis d'étudier l'influence de différents paramètres sur la dynamique d'une capsule. Cependant, aucun modèle n'a encore été développé pour étudier les phénomènes d'endommagement et de rupture des capsules en écoulement (si on exclut les modèles basés sur des systèmes masse-ressort, qui semblent trop simplistes, et qui n'ont pas été validés rigoureusement). Ces modèles sont pourtant nécessaires si l'on souhaite pouvoir comprendre et contrôler la rupture des capsules pour tout type d'écoulement, et prédire comment le fluide encapsulé est relargué. Par ailleurs, il existe peu d'études expérimentales sur la rupture, et celles-ci ne permettent d'avoir des informations sur la rupture qu'à l'échelle de la capsule et pour un écoulement donné. Pour être exploitées, ces expériences doivent être associées à un modèle tenant compte des mécanismes d'endommagement.

L'objectif de la thèse est de proposer, pour la première fois, des approches numériques avancées afin de modéliser les mécanismes d'endommagement et de rupture d'une capsule en écoulement. De manière générale, les notions associées à l'endommagement et à la rupture, et à leur modélisation, vont être introduites dans les différents chapitres. Dans le paragraphe suivant nous introduisons seulement les concepts clés associés aux phénomènes d'endommagement et de rupture que nous allons modéliser, au niveau de la paroi de la capsule.

Dans le cadre de l'approche systématique de la rupture proposée par la mécanique de l'endommagement (Lemaitre & Desmorat, 2005), entre l'état initialement vierge d'un matériau solide, et son état rompu, il y a différentes phases successives. Il y a d'abord

une phase dans laquelle des microdéfauts, correspondant à des discontinuités à l'échelle microscopique, s'initient et se développent dans le matériau. À ce stade, l'endommagement est diffus et le matériau peut continuer à être vu comme un matériau homogène à l'échelle macroscopique. Puis, localement, à partir d'un certain seuil d'accumulation de microdéfauts, l'endommagement et les déformations se localisent dans des zones, dites, de localisation. Dans ces zones, l'endommagement est qualifié d'endommagement localisé. À partir de cette phase, le matériau ne peut plus être vu comme homogène à l'échelle macroscopique, et on considérera le début de cette phase comme correspondant à l'initiation de la rupture. Enfin, la coalescence des microdéfauts dans une zone de localisation dégénère en une microfissure qui va ensuite se propager à travers la structure.

La prise en compte de l'ensemble de ces mécanismes d'endommagement dans le cas d'un modèle numérique d'une microcapsule en écoulement n'est pas classique pour plusieurs aspects. Tout d'abord il faut développer ce modèle dans un contexte d'interaction fluide-structure, avec un couplage fort entre les domaines fluide et solide. Par ailleurs, les effets visqueux des fluides sont importants à l'échelle d'une microcapsule, ce qui n'est pas le cas à l'échelle des structures généralement considérées en mécanique. Enfin, la paroi de la capsule a un comportement hyperélastique et elle a un faible rapport épaisseur/rayon (2% – 10%) ce qui la rend très déformable, et peut mener à son flambement.

Pour le développement du modèle, nous allons essentiellement nous focaliser sur les écoulements non confinés, pour lesquels nous avons vu que la rigidité de flexion a peu d'effet sur la déformation d'une capsule (Dupont *et al.*, 2015). Nous allons donc négliger la rigidité de flexion de la paroi, et nous supposerons que les variations de courbure ont aussi peu d'effet sur l'endommagement. Nous allons donc de manière générale considérer la paroi de la capsule comme une membrane n'ayant pas de rigidité de flexion. La prise en compte des effets de flexion sera certainement une extension future du modèle développé dans cette thèse.

Le plan du document est structuré de la façon suivante. Dans le chapitre 2, nous développons le modèle d'endommagement d'une capsule en écoulement dans un cadre général adapté aux capsules artificielles et naturelles. Ce modèle permet de tenir compte des mécanismes d'endommagement diffus dans la membrane. Dans ce chapitre, nous allons voir comment nous avons couplé un modèle d'endommagement continu, avec le code d'interaction fluide-structure existant au sein de l'équipe, couplant la méthode des éléments finis pour résoudre la déformation de la membrane, et la méthode des

intégrales de frontière pour résoudre l'écoulement des fluides (Walter *et al.*, 2010). Dans le chapitre 3, on s'intéresse au cas de la rupture des capsules en polyamide qu'ont observé Chang & Olbricht (1993a), pour lesquelles le mode de rupture semble différent de celui des autres capsules synthétiques. On verra dans ce chapitre qu'en adaptant simplement le critère d'endommagement (cette notion sera introduite dans le chapitre 2) du modèle développé dans le chapitre 2, on peut prédire l'initiation de la rupture. Enfin, dans le chapitre 4, nous développons l'ensemble du modèle de rupture d'une capsule en écoulement. Nous allons alors étendre les modèles des chapitres précédents pour prendre en compte les phénomènes d'endommagement localisés. Ce chapitre permettra de voir comment nous avons couplé la méthode des discontinuités intégrées développée au laboratoire Roberval (Bude, 2015), pour résoudre la déformation de la membrane, avec la méthode des intégrales de frontière, pour résoudre l'écoulement des fluides.

Certains aspects ne seront pas développés dans ce manuscrit. Pour avoir plus de détails, nous renvoyons à d'autres travaux réalisés dans le cadre de projets du laboratoire. Ainsi, pour avoir plus de détails sur la formulation de la méthode des intégrales de frontière pour résoudre le problème des fluides, on pourra consulter Walter (2009), et Dupont (2014). Pour la formulation de la méthode des éléments finis permettant de résoudre le problème de la membrane, on pourra consulter Walter (2009). Enfin, des éléments de géométrie différentielle sur des surfaces courbes, et de calcul tensoriel, sont donnés dans Walter (2009).

Chapitre 2

Prise en compte de l'endommagement

Dans ce chapitre, on développe le modèle d'endommagement d'une capsule en écoulement, et on étudie le cas de l'endommagement d'une microcapsule en écoulement de cisaillement simple. On s'intéresse en particulier à l'influence de la force de l'écoulement, et aux conditions d'initiation de la rupture. En complément à cette étude, on aborde le problème de la localisation de l'endommagement. On aborde d'abord ce problème sans écoulement. Sur un cas théorique unidimensionnel, on précise l'origine du problème et on détermine les conditions de localisation. On illustre ensuite les aspects numériques de la localisation dans le cas d'une membrane en traction. À partir de ces éléments, on met en évidence la localisation dans le cas d'une capsule en écoulement.

Dans ce chapitre, dans la partie 1, on développe le modèle d'endommagement d'une capsule en écoulement, et on étudie le cas de l'endommagement d'une microcapsule en écoulement de cisaillement simple jusqu'à l'initiation de la rupture. Cette étude a été publiée au *Journal of Fluid Mechanics* (Grandmaison *et al.*, 2021). Ce papier est inclus dans la section 1.

La partie 2 est un complément qui aborde le problème de la localisation de l'endommagement.

1 Modélisation de l'endommagement d'une microcapsule en écoulement jusqu'à rupture

Modelling of damage of a liquid-core microcapsule in simple shear flow until rupture

Nicolas Grandmaison¹, Delphine Brancherie² and Anne-Virginie Salsac^{1†}

¹Biomechanics and Bioengineering Laboratory (UMR 7338), Université de technologie de Compiègne – CNRS, CS 60319, 60203 Compiègne cedex, France.

²Roberval Laboratory (FRE 2012), Université de technologie de Compiègne – CNRS, CS 60319, 60203 Compiègne cedex, France.

(Received xx; revised xx; accepted xx)

Capsules, composed of a liquid core protected by a thin deformable membrane, offer high-potential applications in many fields of industry such as bioengineering. One of their limitations comes from the absence of models of capsule damage and/or rupture when they are subjected to an external flow. To assess when rupture is initiated, we develop a fluid-structure interaction (FSI) numerical model of a capsule in Stokes flow that accounts for potential damage of the capsule membrane. We consider the framework of Continuum Damage Mechanics and model the membrane with an isotropic brittle damage model, in which the membrane damage state depends on the history of loading. The FSI problem is solved by coupling the finite element method, to solve for the membrane deformation, with the boundary integral method, to solve for the inner and outer fluid flows. The model is applied to an initially spherical capsule subjected to a simple shear flow. Damage initiates at a critical value of the capillary number, ratio of the fluid viscous forces to the membrane elastic forces, and rupture occurs at a higher capillary number, when it reaches a threshold value. The material parameters introduced in the damage model do not influence the mode of damage but only the values of the critical and threshold capillary numbers. When the capillary number is larger than the critical value, damage develops in the two symmetric central regions containing the vorticity axis. It is indeed in these regions that the internal tensions are the highest on the membrane.

1. Introduction

Capsules consisting of a liquid droplet enclosed by a thin elastic membrane are commonly encountered in nature in the form of red blood cells, fish eggs and vesicles, and in numerous industrial processes. The protection and controlled release of active agents is of great importance for diverse applications in the food, cosmetic, bioengineering and medical engineering industries, among others. In medicine, encapsulation has opened the way to new treatment techniques like targeted drug/gene therapy (Bhujbal *et al.* 2014). New-generation bioartificial organs/cells are being developed, for instance, by encapsulating islets of Langerhans to treat diabetic patients (Su *et al.* 2010) or hemoglobin to create artificial blood (Li *et al.* 2005).

But when placed in suspension, capsules are subjected to intense stresses from the surrounding flow, which may cause the mechanical degradation of the membrane. *In vivo* tests have shown that artificial blood cells could be easily damaged in circulation depending on the particle shape and deformability (Li *et al.* 2005): this example illustrates the importance to control rupture. Depending on the applications, capsule damage is to be prevented to preserve the inner substance, or, on the contrary, fostered and directed to allow a targeted release of the encapsulated substance. This necessitates to gain a good understanding of the capsule damage mechanisms under low-inertia flow conditions and of the parameters that control the initiation of rupture.

Very few studies have been conducted on the rupture of capsules subjected to hydrodynamic stresses. The only results that currently exist are experimental. Early experimental

† Email address for correspondence: a.salsac@utc.fr

studies showed the possibility of wrinkling formation at low shear rates (Walter *et al.* 2001), which could lead to fatigue mechanisms, and of capsule burst at high shear (Chang & Olbricht 1993*a*). The results by Chang and Olbricht (Chang & Olbricht 1993*a*) were obtained on macroscopic spherical capsules, produced through interfacial polymerization. Flow-induced rupture initiated from one of the major axis tips of the deformed ellipsoidal shape of the capsule, which corresponds to the point of minimum thickness. The crack then propagated in the shear plane. Rupture of microcapsules under simple shear flow was observed by Koleva & Rehage (2012) on thin polysiloxane capsules having a high degree of crosslinking. It was reached at small deformations indicating a brittle behaviour of the capsule membrane. Increasing the shear rate, rupture typically occurred in the central region, close to the tips of the flow vorticity axis, which correspond to the zones of maximum tension. This study corroborated the results by Husmann *et al.* (2005), who showed that spherical and non-spherical polysiloxane microcapsules bursted at the points of maximum elastic tensions, when placed in a spinning-drop apparatus. A similar breakup mechanism has been obtained in confined environments by Abkarian *et al.* (2008) for red blood cells flowing through a 5- μm wide channel, and by Le Goff *et al.* (2017) for artificial millimetric capsules and fish eggs trapped at a constriction within a cylindrical channel under a set pressure difference. In both studies, rupture initiated at the front of the capsule, where the tensile tension is the highest. Note that, in Le Goff *et al.* (2017), rupture could also occur at the point of contact between the capsule and the constriction, but this mode of rupture is different, as it is induced by contact and not by deformation under flow.

What is currently lacking is a model of capsule deformation under flow, capable of assessing when and where the initiation of rupture occurs. The objective of the present study is to develop the first fluid-structure interaction model accounting for membrane damage induced on a liquid-core microcapsule subjected to a simple shear flow. We will use Continuum Damage Mechanics (CDM) to model the initiation and growth of microdiscontinuities (microcavities and microcracks), which lead to the local initiation of macrocracking as they accumulate and coalesce. Contrary to fracture mechanics, which accounts explicitly for the inherent geometrical discontinuity and the associated boundary conditions, the microdiscontinuities are not geometrically modelled in CDM. The local average damage state due to the microdiscontinuities is instead represented by a continuum variable: the damage variable. CDM has benefited from numerous contributions to its theoretical development (e.g. Kachanov (1986); Lemaitre & Desmorat (2005)) since the pioneering work of Kachanov (1958). It is based on the thermodynamics of irreversible processes with internal variables (Coleman & Gurtin 1967), and has been applied to model the damage mechanisms of a large spectrum of materials, from engineering materials (an overview of applications is presented in Lemaitre & Desmorat (2005)) to biological tissues (Holzapfel & Fereidoonzhad 2017; Hokanson & Yazdani 1997; Natali *et al.* 2005). We propose to incorporate a CDM model into a fluid-structure interaction framework, in order to investigate the time-evolution of damage as the capsule deforms under flow.

In this study, we focus on the damage process of a capsule under intense hydrodynamic stresses induced by an external flow over a relatively short time. Due to the short time scale of the phenomena, fatigue or creep damage models are thus not presently relevant. Previous studies have shown that microcapsules may experience ductile (Ghaemi *et al.* 2016) or brittle (Koleva & Rehage 2012; Le Goff *et al.* 2017) damage depending on the material and history of loading (external thermo-mechanical stresses). We derive the damage model assuming a quasi-brittle behaviour of the capsule membrane, for which dissipation prior to cracking occurs with negligible irreversible strains (*i.e.* negligible plasticity). However, CDM provides a general framework: the present model will thus be straightforwardly extended to the other damage behaviours (ductile material, creep or fatigue).

After having detailed the formulation of the damage model of a capsule in infinite shear flow in Section 2, we present the model discretization and numerical solver in Section 3. We first investigate damage of a spherical capsule under isotropic inflation in Section 4, as it provides insight on capsule damage and allows us to validate the numerical method by comparison of the results with the corresponding analytical solution. We then study damage in simple shear flow in section 5, and assess the effect that the dimensionless parameters of

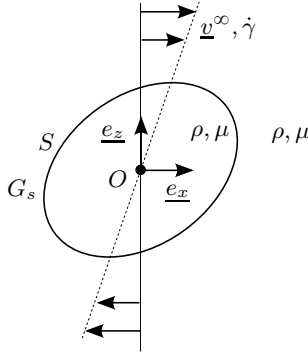


FIGURE 1. Capsule suspended in the unbounded simple shear flow.

the model have on damage evolution and rupture initiation. We finally discuss the model and results in Section 6 and analyze the potential of the model to identify the capsule membrane limit of elasticity by comparison with experiments.

2. Formulation of the problem

We consider a spherical microcapsule of radius a enclosed in an elastic envelope of very small thickness with respect to its radius. The capsule is thus modelled as a two-dimensional incompressible membrane with surface shear elastic modulus G_s . It is placed in an infinite shear flow of shear rate $\dot{\gamma}$. The problem is studied in the reference frame of center O and Cartesian basis $(\underline{e}_x, \underline{e}_y, \underline{e}_z)$ corresponding to the barycentric reference frame of the capsule oriented such that the unperturbed velocity field is given by $\underline{v}^\infty(\underline{x}) = \dot{\gamma}z\underline{e}_x$ (Figure 1). The inner and outer fluids are the same incompressible Newtonian fluids of dynamic viscosity μ and density ρ . Gravitational and inertial effects being negligible due to the microscopic capsule size, the fluid-structure interaction problem is governed by only one non-dimensional parameter: the capillary number $Ca = \mu\dot{\gamma}a/G_s$, ratio of the viscous to the elastic characteristic forces.

Internal and external flows

Inertial effects being neglected, the fluid problem is governed by the Stokes equations:

$$\operatorname{div}(\underline{\underline{\sigma}}) = 0, \quad \operatorname{div}(\underline{v}) = 0, \quad (2.1)$$

where $\underline{\underline{\sigma}}$ designates the Cauchy stress tensor, \underline{v} is the velocity vector and $\operatorname{div}(\cdot)$ is the divergence operator. At a given point \underline{x} of the membrane S , the boundary integral formulation of the Stokes equations gives the relationship between the velocity vector \underline{v} and the stress tensor $\underline{\underline{\sigma}}$ (Pozrikidis 1992):

$$\forall \underline{x} \in S, \quad \underline{v}(\underline{x}) = \underline{v}^\infty(\underline{x}) - \frac{1}{8\pi\mu} \int_S \underline{\underline{J}}(\underline{x}, \underline{y}) \cdot \llbracket \underline{\underline{\sigma}} \rrbracket \cdot \underline{n}(\underline{y}) \, dS_{\underline{y}}, \quad (2.2)$$

where \underline{n} is the unit vector normal to S pointing towards the external fluid and $\llbracket \underline{\underline{\sigma}} \rrbracket \cdot \underline{n} = (\underline{\underline{\sigma}}_{ext} - \underline{\underline{\sigma}}_{int}) \cdot \underline{n}$ is the stress jump across the membrane. We denote as $\underline{\underline{J}}$ the second order Oseen-Burgers tensor defined by:

$$\underline{\underline{J}}(\underline{x}, \underline{y}) = \frac{1}{r} \underline{\underline{1}} + \frac{1}{r^3} \underline{r} \otimes \underline{r}, \quad (2.3)$$

where $\underline{r} = \underline{x} - \underline{y}$, $r = \|\underline{r}\|$ and $\underline{\underline{1}}$ is the identity tensor.

Wall mechanics

The capsule wall is modelled as a membrane of mid-surface S . The curvilinear coordinates (ξ_1, ξ_2) describe the position $\underline{x}(\xi_1, \xi_2, t)$ on S in the configuration at time t . The position $\underline{x}(\xi_1, \xi_2, 0)$ on the initial configuration S_0 of S is noted \underline{X} . It is convenient to write the membrane equations in local tangent bases. In what follows, if not specified, indices written

with Latin letters take values in $\{1, 2, 3\}$, while indices written with Greek letters are in $\{1, 2\}$. The covariant basis (\underline{a}_i) attached to S is defined by:

$$\underline{a}_\alpha = \frac{\partial \underline{x}}{\partial \xi_\alpha}, \quad \underline{a}_3 = \frac{\underline{a}_1 \times \underline{a}_2}{\|\underline{a}_1 \times \underline{a}_2\|}. \quad (2.4)$$

The contravariant basis (\underline{a}^i) is defined by $\underline{a}_i \cdot \underline{a}^j = \delta_i^j$, where δ_i^j designates the Kronecker symbol. On S_0 , the covariant and contravariant bases are denoted (\underline{A}_i) and (\underline{A}^i), respectively. The metric tensor is $\underline{1}_s$ on S and $\underline{1}_s^0$ on S_0 . The contravariant and covariant components of $\underline{1}_s$ are $a^{\alpha\beta} = \underline{a}^\alpha \cdot \underline{a}^\beta$ and $a_{\alpha\beta} = \underline{a}_\alpha \cdot \underline{a}_\beta$, respectively (similar definitions for the components $A^{\alpha\beta}$ and $A_{\alpha\beta}$ of $\underline{1}_s^0$).

The wall inertia being negligible (Walter *et al.* 2010), the motion of the membrane is governed by the local mechanical equilibrium:

$$\forall \underline{x} \in S, \quad \underline{\nabla}_s \cdot \underline{T} + \underline{q} = \underline{0}, \quad (2.5)$$

where \underline{q} is the surface external load, \underline{T} is the tension (resultant of the internal Cauchy stress over the thickness), $\underline{\nabla}_s \cdot$ is the surface divergence operator. The dynamic boundary condition imposes that:

$$\forall \underline{x} \in S, \quad \underline{q} = \llbracket \underline{\sigma} \rrbracket \cdot \underline{n}. \quad (2.6)$$

The weak form of the membrane equilibrium equation is obtained applying the principle of virtual work:

$$\begin{aligned} &\text{For any virtual displacement } \underline{\hat{u}} \in H^1(S), \\ &\int_S \underline{\hat{u}} \cdot \underline{q} \, dS = \int_S \underline{T} : \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\hat{u}}) \, dS, \end{aligned} \quad (2.7)$$

where $H^1(S)$ designates the Sobolev space associated to the Lebesgue space $L^2(S)$ and $\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\hat{u}})$ is the symmetric part of $\underline{1}_s \cdot \underline{\nabla}_s \underline{\hat{u}}$, the tensor $\underline{\nabla}_s \underline{\hat{u}}$ being the gradient of $\underline{\hat{u}}$.

In terms of kinematics, the no-slip boundary condition holds on S and gives the relationship between the fluid velocity and the position \underline{x} of the corresponding point of the membrane:

$$\underline{v} = \frac{d\underline{x}}{dt}. \quad (2.8)$$

Material behaviour

The model of the capsule wall behaviour is developed in the standard framework of CDM (Lemaitre & Desmorat 2005) to account for the progressive degradation of the membrane while staying in the field of continuum mechanics. More specifically, CDM is a branch of the thermodynamics of irreversible processes with internal variables, the focus of which is to model irreversible transformations associated with damage. The development of a damage model is thus based on four key concepts inherited from the thermodynamics of irreversible processes: state variables, state potential, damage criterion and damage evolution law. A short review of these concepts together with the details of how we developed the model are given hereafter. We specify them in the case of quasi-brittle damage which corresponds to the membrane deformation until the initiation of rupture without irreversible strains (see Table 1 for a summary).

State variables

We assume that the transformations of the capsule wall correspond to isothermal elastic deformation and damage. The damage variable represents the irreversible growth of microdefects in a representative volume element (RVE) (Figure 2).

To illustrate the definition of the damage variable, we consider a deformed RVE of the capsule wall containing microdefects in the form of microcavities and microcracks (Figure 2). We define damage in direction \underline{k} as the surface ratio $\delta S_D / \delta S$, with δS_D the maximum intersection of microdefects in a cross-section δS of normal \underline{k} of the RVE. The stresses on this cross-section are thus transmitted on $\delta \tilde{S} = \delta S - \delta S_D$. We assume that the microdefects have no preferential orientation: the $\delta S_D / \delta S$ ratio is thus independent of the direction \underline{k}

TABLE 1. Summary of the key ingredients of the present associated damage model.

State / Associated variables	Green Lagrange strain $\underline{\underline{e}}$ / Second Piola-Kirchhoff tension $\underline{\underline{\pi}}$ Damage variable d / Energy release rate Y
State potential	Free energy $\phi(\underline{\underline{e}}, d) = (1 - d)\phi_{NH}(\underline{\underline{e}})$ with ϕ_{NH} the isochore neo-Hookean potential
Damage threshold function	$f = Y - \kappa(d)$ with $\kappa(d) = Y_D + Y_C d$, Y_D and Y_C being the model constants

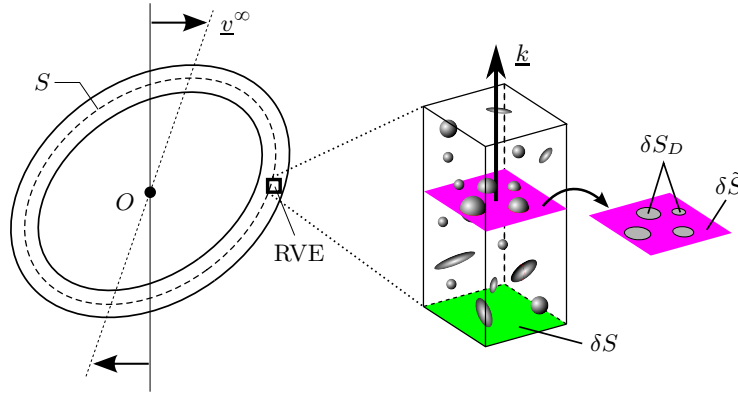


FIGURE 2. Representation of a microcapsule of mid-surface S placed in an infinite shear flow (left). Zoom on a representative volume element (RVE) containing microcavities and microcracks (middle). Decomposition of the cross-section δS of normal vector \underline{k} into the effective load-bearing cross-section $\delta \tilde{S}$ and the total surface of the microdefects δS_D (right).

and corresponds to isotropic damage. The state variable is then the scalar damage variable d defined as

$$d = \frac{\delta S_D}{\delta S} = 1 - \frac{\delta \tilde{S}}{\delta S}. \quad (2.9)$$

It ranges from 0, for the local sound (undamaged) state of the material, to 1, when a crack initiates having the size of the RVE.

The other state variable is the standard elastic deformation, used in all the mechanical models. The capsule incompressible wall being modelled as a membrane, the in-plane deformation tensor on the mid-surface S is given by the Green-Lagrange strain tensor $\underline{\underline{e}}$

$$\underline{\underline{e}} = \frac{1}{2}(\underline{\underline{F}}^T \cdot \underline{\underline{F}} - \underline{\underline{1}}_s^0). \quad (2.10)$$

The tensor $\underline{\underline{F}}$ is the gradient of the transformation of S

$$\underline{\underline{F}} = \frac{\partial \underline{x}}{\partial \underline{X}} = \underline{\underline{a}}^\alpha \otimes \underline{\underline{A}}_\alpha, \quad (2.11)$$

in which, as in what follows, we adopt the convention of summation over repeated indices. In conclusion, the state variables are d and $\underline{\underline{e}}$, which both depend only on $\underline{x} \in S$.

State potential

Following the standard framework of CDM, the constitutive law of the membrane and the definition of the variable controlling d are derived from a unique state potential function of the state variables. We note $\phi(\underline{\underline{e}}, d)$ the specific membrane free energy per unit surface of

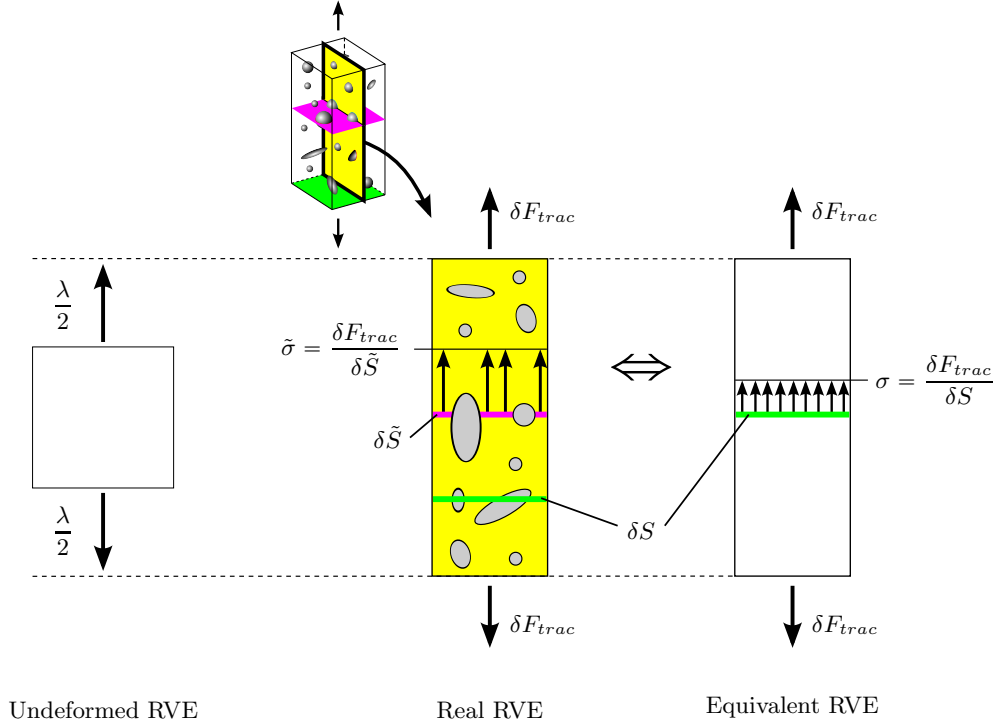


FIGURE 3. Illustration of the homogenization principle on a representative volume element (RVE) under an uniaxial traction of intensity δF_{trac} and of the associated elongation λ . The heterogeneous damaged material (real RVE) is modelled as a homogeneous domain (equivalent RVE) with the same cross-section δS and subjected to the same loading/elongation. The force equilibrium leads to $\sigma = \delta \tilde{S} / \delta S \tilde{\sigma} = (1 - d)\tilde{\sigma}$, where the effective stress $\tilde{\sigma}$ is the stress transmitted through the load-bearing cross-section $\delta \tilde{S}$ and determined with the constitutive law of the undamaged material.

S_0 . Knowing ϕ , one can derive the associated variables dual to $\underline{\underline{e}}$ and d , using the state laws

$$\begin{cases} \underline{\underline{\pi}} = \frac{\partial \phi}{\partial \underline{\underline{e}}}, \\ Y = -\frac{\partial \phi}{\partial d}, \end{cases} \quad (2.12)$$

where $\underline{\underline{\pi}}$ is the second Piola-Kirchhoff tension tensor and Y the specific elastic energy release rate. The Cauchy tension tensor $\underline{\underline{T}}$ is related to $\underline{\underline{\pi}}$ through

$$\underline{\underline{T}} = \frac{1}{J_s} \underline{\underline{F}} \cdot \underline{\underline{\pi}} \cdot \underline{\underline{F}}^T, \quad (2.13)$$

where J_s is the Jacobian of the transformation of S . The undamaged wall is chosen to follow the neo-Hookean (NH) law, which was shown to model well the elastic behaviour of thin artificial proteic membranes (Chu *et al.* 2011; Gubspun *et al.* 2016). The corresponding specific free energy ϕ_{NH} (Barthès-Biesel *et al.* 2002) is

$$\phi_{NH}(\underline{\underline{e}}) = \frac{G_s}{2} \left(I_1 - 1 + \frac{1}{I_2 + 1} \right), \quad (2.14)$$

where the two invariants of the transformation I_1 and I_2 are defined by:

$$\begin{aligned} I_1 &= tr(\underline{\underline{F}}^T \cdot \underline{\underline{F}}) - 2 = A^{\alpha\beta} a_{\alpha\beta} - 2, \\ I_2 &= det(\underline{\underline{F}}^T \cdot \underline{\underline{F}}) - 1 = det(A^{\alpha\beta}) det(a_{\alpha\beta}) - 1. \end{aligned} \quad (2.15)$$

What is classical in CDM is to obtain the free energy ϕ in the damage state using homogenization, which is based on the principle of strain equivalence. We propose to illustrate this concept on the 3D RVE shown in Figure 2, in the case of a uniaxial traction of intensity δF_{trac} which induces an elongation λ (Figure 3). We look for the equivalent RVE (right) having the same cross-section δS , and being subjected to the same elongation λ and

loading δF_{trac} as the real RVE. The stress in the equivalent RVE is thus $\sigma = \delta F_{trac}/\delta S$, which is related to the effective stress $\tilde{\sigma} = \delta F_{trac}/\delta \tilde{S}$ through:

$$\sigma(\lambda, d) = \frac{\delta \tilde{S}}{\delta S} \tilde{\sigma}(\lambda) = (1-d)\tilde{\sigma}(\lambda). \quad (2.16)$$

where $\tilde{\sigma}$ is computed from the constitutive law of the undamaged material.

The concept of equation (2.16) can be translated to our 2D membrane and generalized to any in-plane stress state with:

$$\frac{\partial \phi}{\partial \underline{\underline{\underline{e}}}}(\underline{\underline{\underline{e}}}, d) = (1-d) \frac{\partial \phi_{NH}}{\partial \underline{\underline{\underline{e}}}}(\underline{\underline{\underline{e}}}). \quad (2.17)$$

We thus choose to express the specific free energy ϕ as:

$$\phi(I_1, I_2, d) = (1-d)\phi_{NH}(I_1, I_2). \quad (2.18)$$

Note that the present homogenization process preserves the membrane properties observed in the undamaged case. The state laws defined by equations (2.12) and (2.13) then have the following expressions:

$$\begin{cases} T^{\alpha\beta} = (1-d)G_s \left(\frac{1}{J_s} A^{\alpha\beta} - \frac{1}{J_s^3} a^{\alpha\beta} \right) \\ Y = \phi_{NH}, \end{cases} \quad (2.19)$$

where the Cauchy tension tensor is given through its contravariant components.

Damage criterion and damage evolution law

The last ingredients of the model are the damage criterion and the damage evolution law. We choose to adopt an associated model (Besson *et al.* 2010), which is numerically robust. It only requires the introduction of the damage threshold function $f(Y; d)$ (d acts as a parameter) to derive the damage criterion and the evolution law through the admissibility condition (i) and the principle of maximum dissipation (ii).

(i) Admissibility condition

To be admissible, the associated variable Y must satisfy the standard admissibility condition

$$f(Y; d) \leq 0. \quad (2.20)$$

It defines a bounded domain for Y , illustrated in Figure 4a.

(ii) Principle of maximum dissipation

The damage evolution is accompanied by dissipation. The associated governing laws are based on the principle of maximum dissipation

$$\mathcal{D}(Y, \dot{d}) = \max_{f(Y^*; d) \leq 0} \left\{ \mathcal{D}(Y^*, \dot{d}) \right\}, \quad (2.21)$$

where $\mathcal{D}(Y, \dot{d}) = Y\dot{d}$, and \dot{d} designates the material temporal derivative of d .

The solution of the maximization problem under constrain (2.21) is provided by the Kuhn-Tucker conditions

$$\begin{cases} \dot{d} = \dot{\eta} \frac{\partial f}{\partial Y} \\ f \leq 0, \dot{\eta} \geq 0, \dot{\eta} f = 0. \end{cases} \quad (2.22)$$

the four of which constitute the evolution law of damage, where $\dot{\eta}$ acts as a Lagrange multiplier.

The three conditions within equation (2.22)₂ are known as the loading/unloading conditions. They provide the damage criterion

$$\begin{cases} f(Y) < 0 \Rightarrow \dot{\eta} = 0 \\ f(Y) = 0 \Rightarrow \dot{\eta} \geq 0. \end{cases} \quad (2.23)$$

TABLE 2. Loading case possibilities as a function of the values of f , \dot{f} and $\dot{\eta}$. An illustration is given in Figure 4 for a loading/unloading cycle.

① elastic loading/unloading	$f < 0$	$\dot{f} = 0$	$\dot{\eta} = 0$
② elastic unloading	$f = 0$	$\dot{f} < 0$	$\dot{\eta} = 0$
③ neutral loading	$f = 0$	$\dot{f} = 0$	$\dot{\eta} = 0$
④ loading with damage	$f = 0$	$\dot{f} = 0$	$\dot{\eta} > 0$

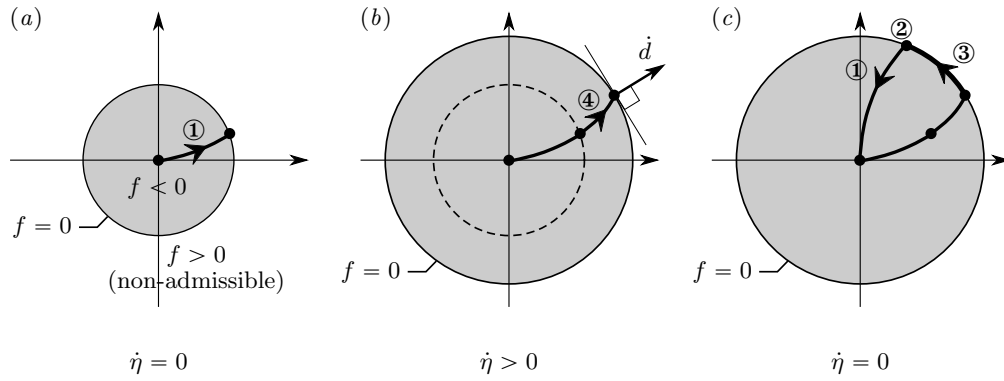


FIGURE 4. Illustration in 2D of (a) the admissible domain of the associated variable Y , defined by $f(Y) \leq 0$, (b) the case of damage evolution ($\dot{\eta} > 0$) where the yield surface $f = 0$ moves due to hardening and where the rate of damage \dot{d} is along the normal to the yield surface (normality rule), and (c) the case when damage ceases ($\dot{\eta} = 0$). The thick black lines represent one example of loading cycle, which successively contains all the phases given in table 2: (a) elastic loading ①, (b) loading with damage ④, (c) neutral loading ③ followed by elastic unloading ② + ①.

The interior of the admissible domain corresponding to $f(Y) < 0$ (Figure 4a) is thus the elastic domain, in which damage remains constant ($\dot{d} = 0$). The domain boundary corresponds to $f(Y) = 0$ and thus to cases where damage evolves. The damage evolution follows equation (2.22)₁ which can be interpreted geometrically as \dot{d} being along the normal to the yield surface $f = 0$ (Figure 4b). It is thus referred to as the normality rule.

Together, the admissibility condition (2.20) and the damage criterion (2.23) lead to the consistency condition

$$\dot{\eta}\dot{f} = 0. \quad (2.24)$$

Different cases of loading may exist (see Table 2 and Figure 4). When $\dot{\eta} = 0$, no damage occurs regardless the values of f and \dot{f} . Damage only occurs when $\dot{\eta} \neq 0$, the value of which is obtained by solving $\dot{f}(Y; d) = 0$ (imposed by equation (2.24)).

Note that from the inequality of Clausius-Duhem $\mathcal{D} \geq 0$, and given that $Y \geq 0$, the damage variable d can only grow in time

$$\dot{d} \geq 0. \quad (2.25)$$

Thus, during damage ($f = 0$)

$$\frac{\partial f}{\partial Y} \geq 0, \quad (2.26)$$

which restrains the choice of f .

Since most artificial and natural microcapsules have been shown to be brittle, we choose to follow the model developed by Marigo (1981) for quasi-brittle damage:

$$f(Y; d) = Y - \kappa(d) \leq 0. \quad (2.27)$$

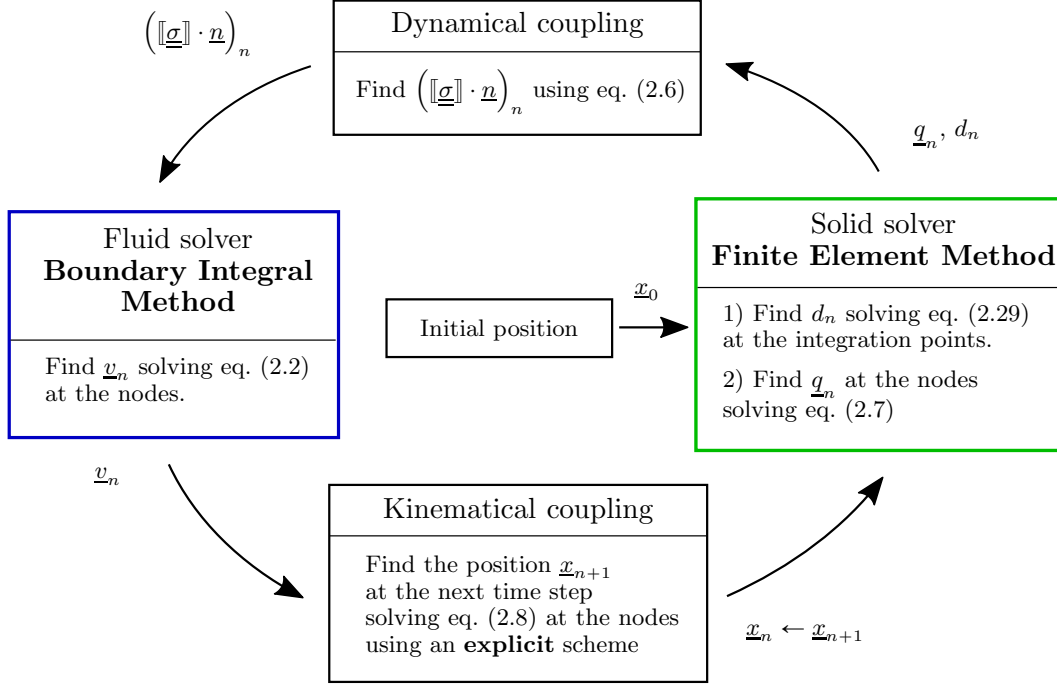


FIGURE 5. Numerical method to solve the fluid-structure interaction problem over a time step.

We presently define κ as a function of two parameters, the damage threshold $Y_D \geq 0$ and the hardening modulus $Y_C \geq 0$, such that:

$$\kappa(d) = Y_D + Y_C d. \quad (2.28)$$

The size of the domain of admissible states $f \leq 0$ increases with damage (Figure 4b). It is due to the hardening of the material and is controlled by the parameter Y_C .

The damage evolution law eq. (2.22) can be written equivalently in an explicit form:

$$d = \langle \zeta(Y^{max}) \rangle^+, \quad (2.29)$$

where $\langle \cdot \rangle^+$ designates the Macaulay brackets defined by

$$\begin{cases} \langle x \rangle^+ = x & \text{if } x \geq 0 \\ \langle x \rangle^+ = 0 & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (2.30)$$

The function $\zeta(Y) = (Y - Y_D)/Y_C$ designates the reciprocal of the bijection κ , and Y^{max} is defined by

$$Y^{max}(t) = \max_{\tau \leq t} \{Y(\tau)\}. \quad (2.31)$$

3. Numerical method

Knowing the current position of the material points of the membrane, we perform a Lagrangian tracking of the nodes of the capsule to solve the fluid-structure interaction problem (eq. (2.2), (2.6), (2.7), (2.8), (2.29)). We use the strategy proposed by Walter *et al.* (2010) coupling the Finite Element Method to solve for the solid and the Boundary Integral Method to solve for the fluid (Figure 5). The problem is solved using the dimensionless forms of the equations, in which the lengths are non-dimensionalized by a , time by $1/\dot{\gamma}$ and tensions by G_s . The two parameters Y_D and Y_C are thus also non-dimensionalized by G_s .

The originality of our work consists in introducing a damage model in the solid problem. At the material level, the evolution of the damage variable d is determined for each integration point using the explicit equation (2.29). The external load \underline{q} is then obtained by solving the global problem (2.7) and transferred to the fluid problem. The velocity is computed explicitly at each node from eq. (2.2). Finally, eq. (2.8) is integrated with a second-order

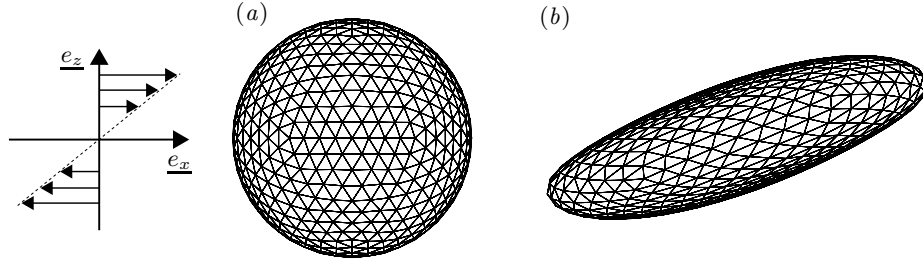


FIGURE 6. Projection on the shear plane of the mesh of a damaged capsule captured (a) in the initial configuration and (b) at a steady deformed state. P2 elements, $N_e=1280$, $N_n=2562$.

explicit Runge-Kutta scheme to solve for the position of the membrane nodes at the next time step.

Mesh

A conform mesh is used, the nodes on the capsule S being shared by the fluid and the solid problems. The mesh is composed of curved triangular elements containing six nodes with quadratic shape functions (P2 elements). The mesh is generated on the spherical shape corresponding to the initial configuration (Figure 6). Following a previous study (Walter *et al.* 2010), the mesh contains $N_e = 1280$ P2 elements corresponding to a total of $N_n = 2562$ nodes.

Solid solver

For a given deformed configuration of the capsule, the discrete solid problem consists in finding the external load $\underline{q} \in L_h^2$ and the damage $d \in L_h^2$ that satisfy eq. (2.7) and eq. (2.29), where the subscript h indicates the finite element space. The position \underline{x} and the virtual displacement $\hat{\underline{u}}$ are searched in H_h^1 . Using isoparametric elements, we restrict the solution for \underline{q} in H_h^1 . A field $\underline{v}(\underline{x}, t) \in H_h^1$ writes: $\underline{v}(\underline{x}, t) = N_p(\underline{x})\underline{v}^{(p)}(t)$, $p \in [1, N_n]$, where N_p and $\underline{v}^{(p)}$ are the shape function and the nodal coordinates of \underline{v} associated to the node p , respectively. Noting $v_{X_j}^{(p)}$ the coordinates of $\underline{v}^{(p)}$ in a Cartesian basis (\underline{e}_{X_j}) , the left-hand side of the discretized form of eq. (2.7) writes:

$$\sum_{el} \hat{u}_{X_j}^{(p)} \int_{el} N_p N_q dS q_{X_j}^{(q)} = \{\hat{\underline{u}}\}^T [M] \{q\}, \quad (3.1)$$

and the right-hand side writes:

$$\sum_{el} \int_{el} T^{\alpha\beta}(\underline{e}, d) \chi_{\alpha\beta}^{(p)X_j} dS \hat{u}_{X_j}^{(p)} = \{\hat{\underline{u}}\}^T \{R\}(\underline{e}, d), \quad (3.2)$$

where $\{q\}$ and $\{\hat{\underline{u}}\}$ are the vectors of size $3N_n$ of the nodal coordinates, and $\chi_{\alpha\beta}^{(p)X_j}$ is defined by:

$$\chi_{\alpha\beta}^{(p)X_j} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial N_p}{\partial \xi_\beta} \underline{a}_\alpha + \frac{\partial N_p}{\partial \xi_\alpha} \underline{a}_\beta \right) \cdot \underline{e}_{X_j}, \quad p \in [1, N_n]. \quad (3.3)$$

Eq. (2.7) being satisfied for any virtual displacement, the discrete solid problem writes:

$$\text{Find } \underline{q} \text{ and } d, \text{ such that, } \begin{cases} [M] \{q\} = \{R\}(\underline{e}, d) & (3.4a) \\ d = \langle \zeta(Y_{max}) \rangle^+ & (3.4b) \end{cases}$$

The square and column matrices $[M]$ and $\{R\}$ are, respectively, computed at each time step by using 6 Hammer points on each element (Hammer *et al.* 1956). The new value of the damage variable is obtained from eq. (3.4b), solved locally at each integration point while computing $\{R\}$. Knowing the deformation, the variable d is computed explicitly as Y^{max} depends only on the deformation. The computation of d ensures the admissibility condition (eq. 2.27) at each time step. Finally, \underline{q} is computed by solving eq. (3.4a) with the Pardiso solver (Schenk & Gärtner 2004).

Fluid solver

For a given deformed configuration of the capsule and knowing the stress exerted by the membrane on the fluid, the velocity field \underline{v} is given explicitly by eq. (2.2). The velocity field \underline{v} is computed at each node. The integral on the right-hand side of eq. (2.2) is computed with 12 Hammer points per element. To handle the singularity of the tensor $\underline{\underline{J}}$ at node \underline{x} , we use polar coordinates centred on \underline{x} when integrating on the elements sharing this node (for more details see e.g. Lac *et al.* (2004)). We do not use penalty methods to impose the conservation of the volume of the fluids. Still, the maximum relative variation of the capsule volume is limited to 0.1% of the initial volume.

Coupling

Using a conform mesh with isoparametric elements, the loads $[[\underline{\sigma}]] \cdot \underline{n}$ and \underline{q} are in the same space H_h^1 . Hence the dynamic coupling between the fluid and the solid (eq. 2.6) is verified in its strong form in this space. Considering the kinematic coupling, the no-slip condition (eq. 2.8) is solved at the nodes with an explicit second order Runge-Kutta scheme to find the position of the nodes at the next temporal increment. Since the local problem of damage is solved in the solid problem with an implicit scheme, the condition of stability of the scheme of temporal integration of the fluid-structure interaction problem is the same as the one initially developed by Walter *et al.* (2010).

4. Capsule damage under isotropic inflation

We first analyse the damage of a spherical capsule under osmotic inflation. We impose radial displacements inflating the capsule from radius a to radius $a(1 + \alpha(t))$, where the inflation ratio α is such that $\alpha \geq 0$. We will study two cases: a monotonic increase of α and cyclic variations of α with successive increase and decrease of the capsule diameter. We compare the solution given by the solid solver to the analytical solution.

The problem consists in finding the damage variable d and the external load \underline{q} that satisfy the evolution law of damage (eq. 2.29) and the equilibrium of the membrane (eq. 2.7). We remind that we consider a neo-Hookean law for the undamaged wall. An analytical solution of the problem exists. We look for it in the form of uniform fields that satisfy the spherical symmetry of the problem. The stretch ratio of the membrane, which is the square root of the isotropic principal value of the dilatation tensor $\underline{\underline{F}}^T \cdot \underline{\underline{F}}$, is simply $\lambda = 1 + \alpha$. The corresponding isotropic principal value T of the tension is:

$$T = (1 - d)G_s \left(1 - \frac{1}{\lambda^6}\right), \quad (4.1)$$

and the elastic energy release rate Y :

$$Y = \frac{G_s}{2} \left(2\lambda^2 + \frac{1}{\lambda^4} - 3\right). \quad (4.2)$$

As Y increases monotonically with α , the evolution law for damage (2.29) writes:

$$d = \langle \zeta(Y(\alpha^{max})) \rangle^+, \quad (4.3)$$

where α^{max} is defined similarly to Y^{max} in eq. (2.31). Hence, the condition for d to increase is that α is larger than any of its previous values.

The external load is $\underline{q} = p\underline{n}$, where $p \geq 0$ is the difference between the internal and external pressures. Choosing test functions of the form $\hat{\underline{u}} = \hat{u}\underline{x}$ in the equilibrium equation (2.7), we obtain the Laplace relation between T and p :

$$T = \frac{a(1 + \alpha)p}{2}. \quad (4.4)$$

We prescribe the radial displacements to the nodes and impose $\underline{x}^{(m)} = (1 + \alpha)\underline{X}^{(m)}$, $\forall m \in [1, N_n]$. The pressure difference and damage variable d are obtained analytically using eq. (4.1)-(4.4), and numerically using the solid solver presented in section 3. For the numerical solution, we compute p and d as surface averages, the pressure difference p being given by

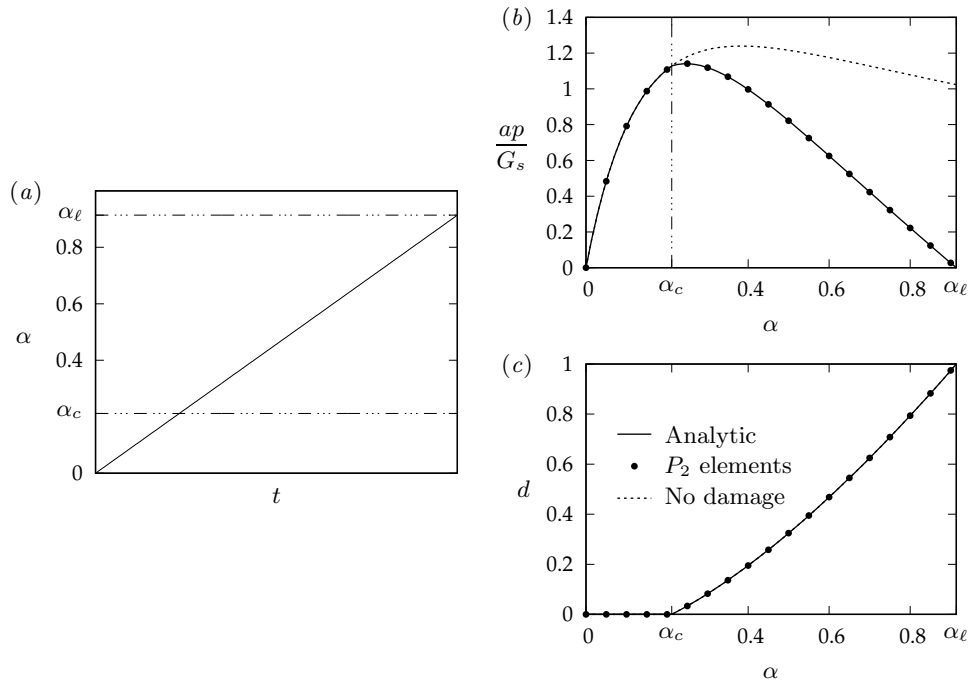


FIGURE 7. Case of a monotonic inflation: for the stretch ratio α shown in (a), corresponding curves of the dimensionless pressure difference (b) and of the damage variable (c), computed for $Y_D = 0.2$, $Y_C = 2.0$.

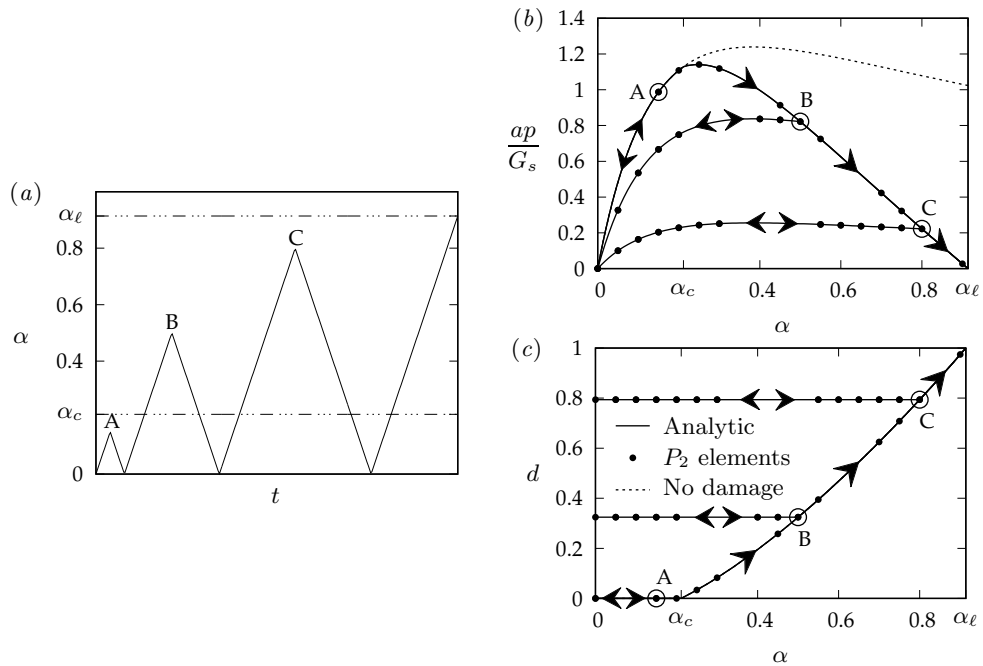


FIGURE 8. Case of cycles of inflations and deflations with increasing maximum capsule size: for the stretch ratio α shown in (a), corresponding curves of the dimensionless pressure difference (b) and of the damage variable (c), computed for $Y_D = 0.2$, $Y_C = 2.0$.

$\underline{q} \cdot \underline{n}$. Between the numerical and analytical solutions, we always find relative errors lower than $10^{-3}\%$ for the pressure difference p and $10^{-4}\%$ for damage d .

We first compare how ap/G_s (the dimensionless value of p) and d evolve with the inflation ratio α in the case of a monotonic inflation of the capsule (Figure 7). The numerical and analytical curves are perfectly superimposed (Figures 7 b-c) and comparison with the analytical solution of the undamaged capsule ($d = 0$) shows a clear effect of damage on the

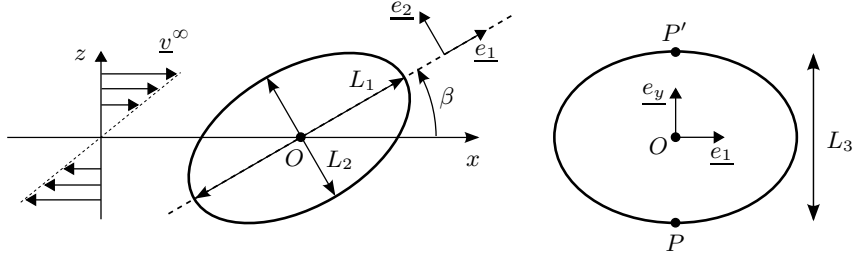


FIGURE 9. Two principal ellipses of the ellipsoid of inertia of the capsule.

pressure difference (Figure 7 b). Damage is initiated at the critical value $\alpha = \alpha_c$, which corresponds to $Y(\alpha_c) = Y_D$. The loss in elastic properties of the damaged capsule leads to a reduction in pressure difference as compared to the undamaged case. The pressure difference returns to zero when $d = 1$, which occurs when $\alpha = \alpha_\ell$.

We then compare the evolution of ap/G_s and d with α in the case of a capsule subjected to cyclic inflations and deflations with increasing maximum sizes (Figure 8). During the first cycle corresponding to the inflation of the capsule until point A , the value of α does not exceed the critical value α_c . Hence damage does not initiate and the curves of ap/G_s for the damaged and undamaged capsules coincide during inflation and deflation. For the second cycle (inflation until point B), the curves of d and ap/G_s coincide with the corresponding curves obtained for the monotonic size increase (Figures 7b-c). During deflation from point B , damage remains constant and the curve of pressure difference ap/G_s stays below the inflation curve when α decreases back to 0. For the third cycle, the inflation curves of ap/G_s and d overlap the corresponding curves of the previous deflation until point B . But, between points B and C , damage increases during inflation, and the curve of ap/G_s again coincides with the corresponding curve obtained for the monotonic size increase. The deflation from point C is then similar to that of the second cycle with constant damage and an ap/G_s -curve below the inflation one. During the last inflation, capsule rupture occurs, when α reaches the limit value α_ℓ (corresponding to $d = 1$).

The case of the capsule under isotropic inflation illustrates the effects of damage on the behaviour of the capsule. For a given value of the inflation ratio α , the more the membrane is damaged, the lower the pressure difference (Figure 8b), in other words damage reduces the loading capacity of the membrane. For increasing d , the slope at the origin for the curve $ap/G_s(\alpha)$ decreases (Figure 8b), which means that damage reduces the stiffness of the structure. It is interesting to see how the values of α_c and α_ℓ depend on the parameter values Y_D and Y_C . Following equation (4.3), the values of α initiating damage and rupture are given respectively by the equations $Y(\alpha_c) = Y_D$ and $Y(\alpha_\ell) = Y_D + Y_C$, where the expression of $Y(\alpha)$ is obtained using equation (4.2). The critical inflation ratio α_c thus depends solely on Y_D , but the limit inflation ratio α_ℓ depends on both Y_D and Y_C . Furthermore, the higher the parameter values, the higher the two threshold inflation ratios.

5. Capsule damage under simple shear flow

We now study the damage of a capsule in simple shear flow. We first show the typical motion and evolution of damage of a capsule in a reference case and then study the influence of the capillary number on the capsule behaviour. We will see that, when the capillary number is increased, three different regimes are found. The capsule is first undamaged until a critical capillary number Ca_c is reached, corresponding to the onset of damage. Above this value, the capsule reaches a steady-state deformed shape in which it is partly damaged. When the limit capillary number Ca_ℓ is reached, rupture initiates putting a limit to the damage regime. In the last part of this section, we will finally study the influence of the material parameters Y_D and Y_C on the three identified regimes and on the values of Ca_c and Ca_ℓ .

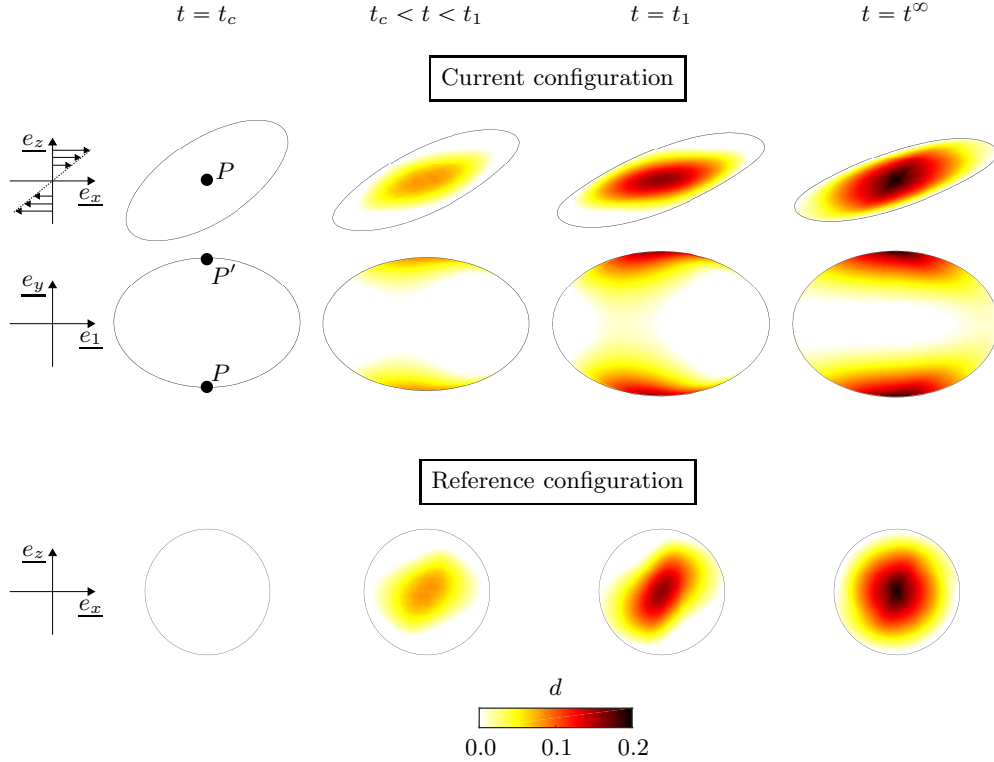


FIGURE 10. Map of damage at the instant of initiation of damage t_c , at an intermediary instant between t_c and the instant of maximum elongation t_1 , at time t_1 , and at steady state (t^∞). The map of damage is represented on the current and reference configurations. The current configuration is observed in the shear plane $(O, \underline{e}_x, \underline{e}_z)$ and in the plane $(O, \underline{e}_1, \underline{e}_y)$ which is defined in Figure 9. The reference configuration of the capsule is observed in the shear plane $(O, \underline{e}_x, \underline{e}_z)$. The points P and P' correspond to the intersection of the membrane with the vorticity axis \underline{e}_y . The results are obtained for $Ca = 0.7$, $Y_D = 0.2$ and $Y_C = 2.0$. All the pictures are at the same scale. The capsule is delimited by a black line.

5.1. Coupled kinetics of motion and damage on a reference case ($Ca = 0.7$)

As reference case, we choose $Y_D = 0.2$, $Y_C = 2.0$ and $Ca = 0.7$. The value of Ca is such that $Ca_c < Ca < Ca_\ell$. Hence the capsule is damaged but the damage stabilizes and a steady state is reached.

Upon the start of the shear flow at $t = 0$, the initially spherical capsule rotates and takes an ellipsoidal deformed shape. It gets flattened while inclining towards the direction of the flow \underline{e}_x (Figure 9). Figure 10 shows the evolution of the capsule state over time until steady state. Note that the membrane rotates around the vorticity axis \underline{e}_y and has a so-called tank-treading motion. We choose to show the capsule shape and damage distribution at different stages: at the onset of damage ($t = t_c$), at an intermediate instant while damage develops, at maximum elongation ($t = t_1$) and at steady state ($t = t_\infty$). The capsule states are shown in the current configuration from two view points in the shear plane and in the transverse inclined plane containing the maximum principal direction \underline{e}_1 (Figure 9). Damage is initiated, at time t_c , at the points P and P' which are on the vorticity axis (O, \underline{e}_y) . As the capsule elongates, two symmetric disjoint damaged areas form around points P and P' , which correspond to the locations of maximum damage d_{max} at each instant. Due to the irreversibility of damage, the maximum values d_{max}^∞ are found at P and P' at steady state ($t = t_\infty$). In order to see whether preferential direction of damage exists, we plotted the damage distributions on the initial capsule configuration (last row of Figure 10). Damage initially develops preferentially along the direction of maximum elongation \underline{e}_1 but the anisotropy decreases after time t_1 to reach a quasi-isotropic damage distribution at steady state. This may be induced by the tank-treading of the capsule membrane around the vorticity axis.

Figure 11 gives complementary information on the evolution of the state of the capsule

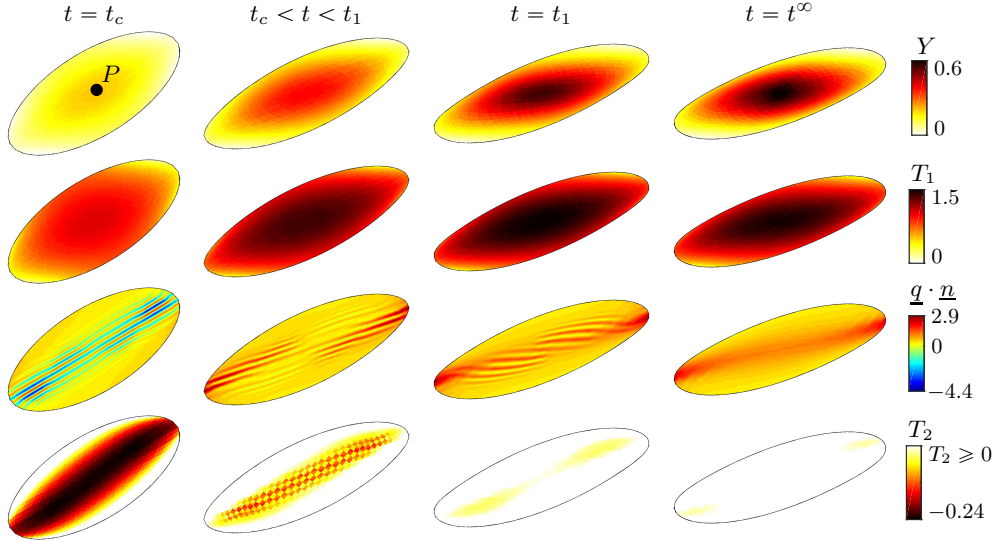


FIGURE 11. Time evolution of different state quantities: elastic energy release rate Y (first row), maximum principal tension T_1 (second row), normal load $\underline{q} \cdot \underline{n}$ to visualize wrinkling (third row) and negative part of principal tension T_2 (fourth row). The results are shown in the shear plane $(O, \underline{e}_x, \underline{e}_z)$ at the same instants as in Figure 10, for $Ca = 0.7$, $Y_D = 0.2$ and $Y_C = 2.0$.

over time until the steady damaged state. The localisation of the energy release rate Y , and hence of damage, in the regions around the points P and P' (see Figure 10) is correlated with the maximum of the principal tension T_1 (first and second rows of Figure 11). Damage has no visible consequences on membrane wrinkling: the wrinkles visible on the normal load maps in the third row of Figure 11 are the same as in Walter *et al.* (2010) in the case without damage. They are induced by the presence of negative T_2 tensions transverse to the direction of the wrinkles (fourth row of Figure 11). The capsule wall being presently modelled as a membrane devoid of bending stiffness, the wrinkle amplitude and wavelength are purely numerical. But the small amplitude of the negative part of T_2 tensions indicates that they hardly contribute to the energy release rate Y and thus to damage. Consequently, they do not lead to any numerical artefact and damage is well predicted by the present model.

We now investigate how the capsule shape and deformation is influenced by damage. In Figure 12, we compare the time evolution of geometric parameters to the case of a capsule without damage. Since the shape of the capsule can be approximated by an ellipsoid of inertia, we define the principal lengths L_1 and L_2 of the major and minor axes (directions \underline{e}_1 and \underline{e}_2) in the shear plane $(O, \underline{e}_x, \underline{e}_z)$ and L_3 , the length along the vorticity axis \underline{e}_y (see Figure 9). The capsule indeed elongates along the directions \underline{e}_1 and \underline{e}_y ($L_1 > L_3 > 2a$) and shrinks along the direction of the minor axis ($L_2 < 2a$) (Figure 12a). We quantify the deformation of the capsule with the Taylor parameter $D_{12} = (L_1 - L_2)/(L_1 + L_2)$ which measures the distortion of the profile of the ellipsoid in the shear plane (Figure 12b). The inclination of the capsule is measured by the angle β between the flow direction \underline{e}_x and the direction of the major axis \underline{e}_1 . Figure 12c represents the temporal evolution of β showing that the inclination angle decreases from the first measurable value near $\pi/4$. Figure 12d shows the evolution of the global surface expansion ratio $\lambda_S = (S - S_0)/S_0$.

Figure 12 globally shows that a steady deformed shape is reached. All the quantities tend towards a plateau value which will be denoted with the symbol ∞ hereafter. It is interesting to notice in Figure 12a that the onset of damage ($t = t_c$) is not visible on the L_i curves. It is only close to $t = t_1$ that the curves slightly diverge from the case without damage. But only small differences are observed on the principal lengths L_i (Figure 12a), D_{12} (Figure 12b) and β (Figure 12c) hereafter. In this reference case, we find that damage has no significant effects on the motion and deformation of the capsule, suggesting that damage will be very difficult to detect experimentally. The geometrical parameter that is the most affected by damage ends up being the global surface expansion ratio λ_S (Figure 12d). Nevertheless, the difference at steady state is only of a few percent.

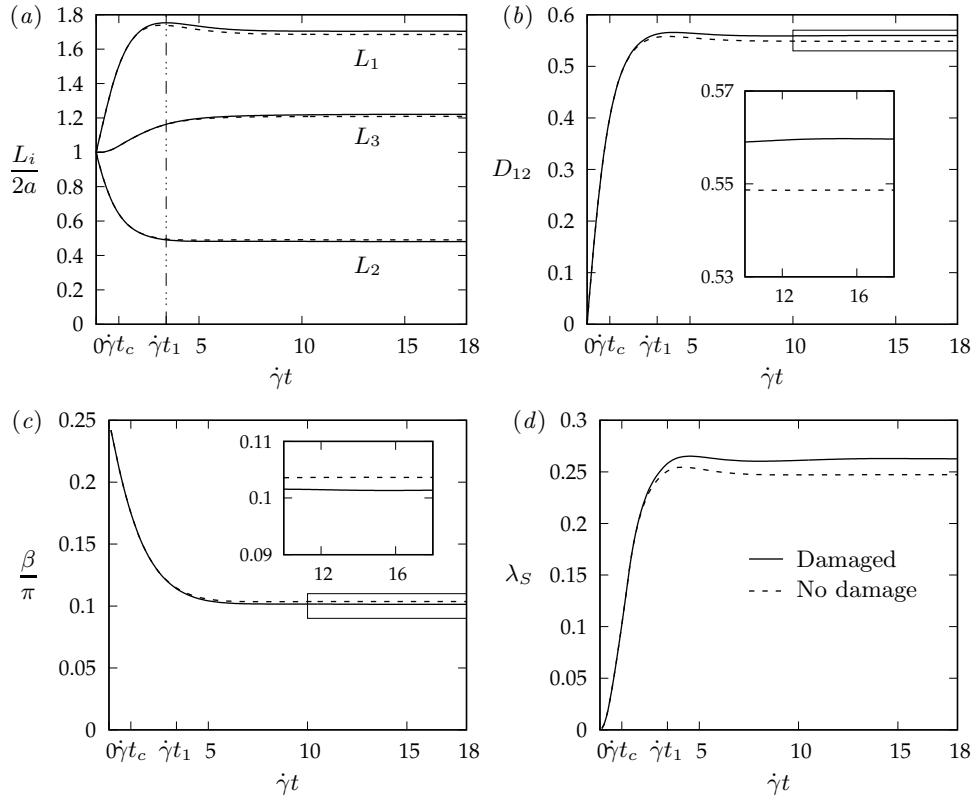


FIGURE 12. Temporal evolution of (a) the lengths of the axes of the ellipsoid of inertia, (b) the Taylor parameter D_{12} , (c) the inclination angle β , and (d) the global surface expansion λ_S . Computed for $Ca = 0.7$, $Y_D = 0.2$ and $Y_C = 2.0$.

5.2. Effect of Ca

We now study the effect of Ca for the same values of parameters ($Y_D = 0.2$, $Y_C = 2.0$) as in the reference case. The corresponding critical and limit capillary numbers are $Ca_c = 0.37$ and $Ca_\ell = 0.73$. The maximum value of damage at steady state d_{max}^∞ is shown as a function of the capillary number Ca in Figure 13. For $Ca > Ca_c$, it increases almost linearly with Ca until $Ca \sim 0.6$. Above, d_{max}^∞ increases more rapidly with Ca until $d_{max}^\infty = 0.4$. Around $Ca = Ca_\ell$, it finally reaches the value of 1 at points P and P' very sharply, with a slope close to infinity. It is for this reason that it is classical in damage mechanics to relax the criterion for rupture to $d = 0.9$ or even $d = 0.8$. Figure 13 indeed shows that they provide the same value for $Ca = Ca_\ell$.

The inserted images in Figure 13 show that the damage maxima always lie at points P and P' . They also provide an indication of the extent of the damaged zone for increasing values of Ca . Note that for $Ca = 0.8$ the damage distribution is given at the instant of initiation of rupture $t = t_\ell$ and not at steady state, as it no longer exists. In these cases, the capillary number influences mainly the values of damage in the vicinity of points P and P' and marginally the damaged surface.

The capsule deformation and inclination at steady state are compared in Figure 14 with the non-damaged case for $Ca \leq Ca_\ell$. No results are shown above Ca_ℓ , since no steady deformed shape exists any longer (D_{12} diverges to infinity). Despite the large effect of Ca on d_{max}^∞ for $Ca_c < Ca < Ca_\ell$, the D_{12}^∞ and β^∞ curves initially remain superimposed to the non-damaged case, and it is only close to Ca_ℓ that small differences become visible. No significant influence of damage is, thus, found on these global quantities. It is a consequence of the localisation of damage around points P and P' that occurs in the case of a shear flow. Although the evolution curve of D_{12} with Ca does not provide information on when damage is initiated (i.e. on the value of Ca_c), it directly provides the value of Ca_ℓ , which corresponding to when D_{12} diverges to infinity (initiation of breakup).

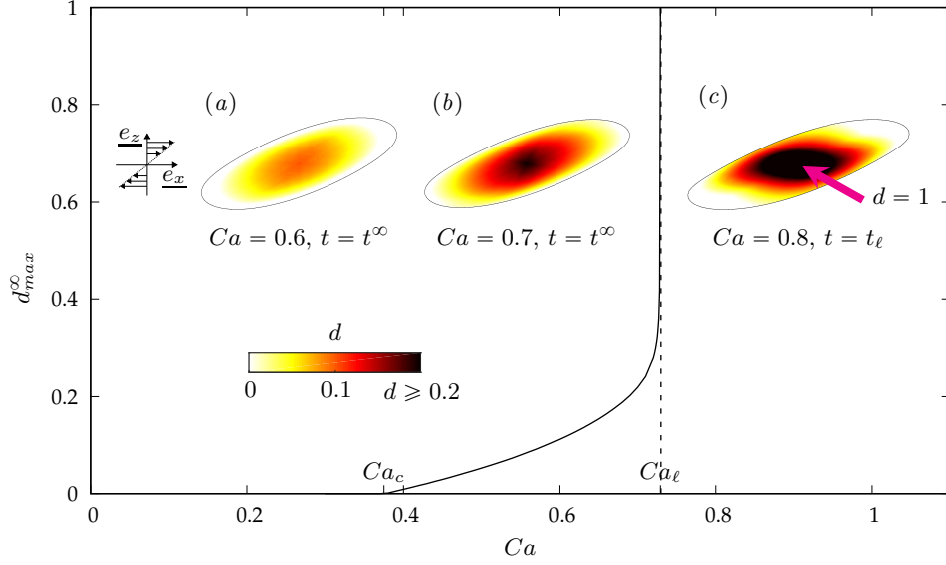


FIGURE 13. Maximum damage value at steady state d_{max}^{∞} with respect to Ca for $Y_D = 0.2$ and $Y_C = 2$. The inserted images represent the map of damage in the shear plane at steady state for $Ca = 0.6$ (a), for $Ca = 0.7$ (b) and at the instant of initiation of rupture $t = t_{\ell}$ for $Ca = 0.8$ (c). The colormap for d is saturated for values of d larger than 0.2.

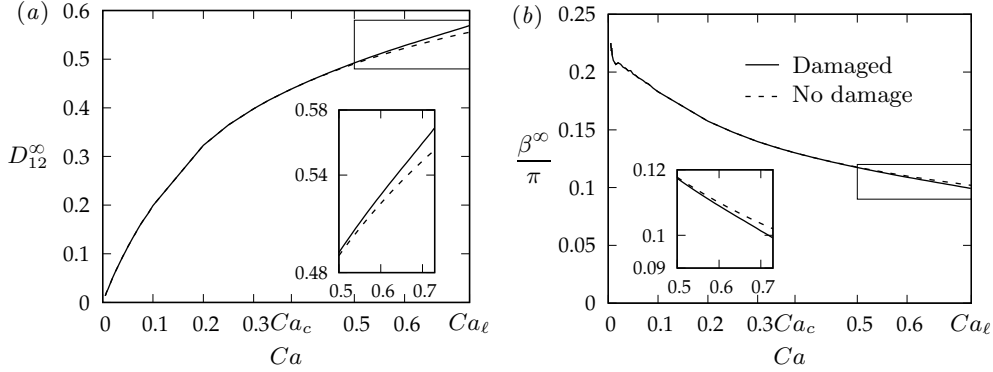


FIGURE 14. Evolution of the values (a) D_{12}^{∞} and (b) β^{∞} , respectively the values of D_{12} and β at steady state, in relation to Ca . Computed for $Y_D = 0.2$ and $Y_C = 2.0$.

5.3. Effect of Y_D and Y_C

We finally study the influence of the material parameters Y_D and Y_C on the damage of the capsule. The evolution of $d_{max}^{\infty}(Ca)$ is represented for different values of Y_D and Y_C in Figure 15. We observe the same trend as in the reference case (Figure 13).

For a fixed value of Y_C , Ca_c and Ca_{ℓ} increase with Y_D (Figure 15a). However, when Y_D is fixed (Figure 15b), increasing Y_C does not impact when damage initiates (constant Ca_c) but delays when the capsule breaks up (increasing value of Ca_{ℓ}). This relates to the facts that the criterion of initiation of damage is only a function of Y_D , whereas the criterion of initiation of rupture is controlled by $Y_D + Y_C$, as already shown at the end of section 4.

The results are synthesized in Figure 16, which provides a phase-diagram of the capsule states for a range of values of Y_D and Y_C . For a given Y_C , the curves $Ca_c(Y_D)$ and $Ca_{\ell}(Y_D; Y_C)$ delimit three domains in the parametric space (Ca, Y_D) : undamaged for $Ca < Ca_c$, damaged for $Ca_c < Ca < Ca_{\ell}$, ruptured for $Ca > Ca_{\ell}$. The only effect of Y_C is to shift the Ca_{ℓ} delimiting curve to higher Ca values as the capsule is then more resistant. This is what is shown by the dotted lines in Figure 16, which complete the base case ($Y_C = 2.0$).

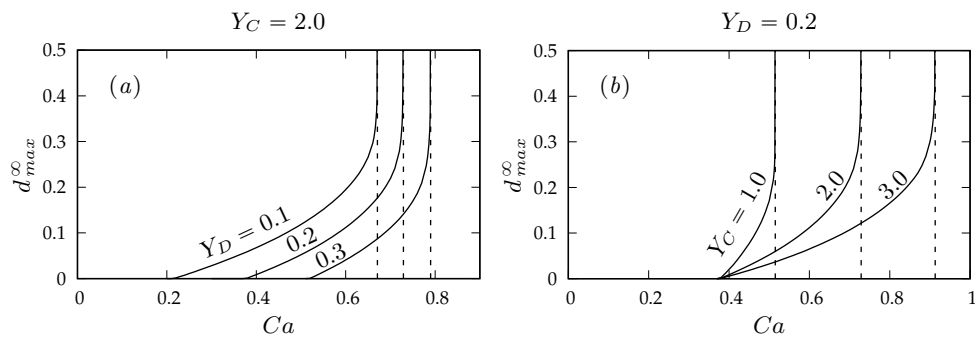


FIGURE 15. Influence of the parameters Y_C and Y_D on the evolution of the damage value d_{max}^{∞} at points P and P' at steady state with Ca : (a) $Y_C = 2.0$ and $Y_D = 0.1, 0.2, 0.3$, (b) $Y_C = 1.0, 2.0, 3.0$ and $Y_D = 0.2$.

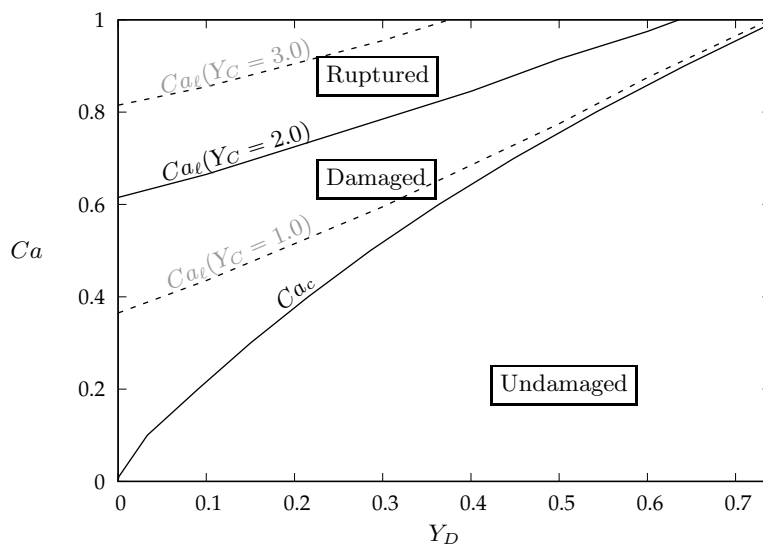


FIGURE 16. Evolution of the critical and limit capillary numbers Ca_c and Ca_l with Y_D . The solid lines represent the limit curves of Ca_c and Ca_l for $Y_C = 0.2$. They delimit three domains corresponding to three states of the capsule: undamaged, damaged and ruptured. We also show the limit curves of Ca_l for $Y_C = 1.0, 3.0$ as dotted lines to show how the three domains evolve with the parameters.

6. Discussion and conclusion

In response to the current need for a damage model of microcapsules in flow, we have developed the first fluid-structure interaction (FSI) numerical model accounting for the degradation of the capsule membrane till the onset of rupture, when it is deformed by hydrodynamic forces. We have placed ourselves within the framework of continuum damage mechanics, and simulated microdefect development by degrading the elastic material parameters through the introduction of a damage variable d . We have used an isotropic brittle damage model, in which the damage evolution of the membrane depends on the history of loading. We have integrated it in a Finite Element method that solves for the membrane deformation, which we have coupled to a Boundary Integral method to solve for the Stokes flows inside and outside the capsule.

6.1. Interpretation of the damage evolution law

We have explained the physical meaning of the damage model in section 2, but propose to further detail the interpretation of the damage evolution law eq. (2.29). The capsule membrane being assumed to have a quasi-brittle behaviour, damage evolution is driven by Y^{max} . As an illustration, we propose to introduce a toy model (Figure 17), consisting of a bundle of parallel elastic fibres under uniaxial traction (Krajcinovic 1989; Lemaitre

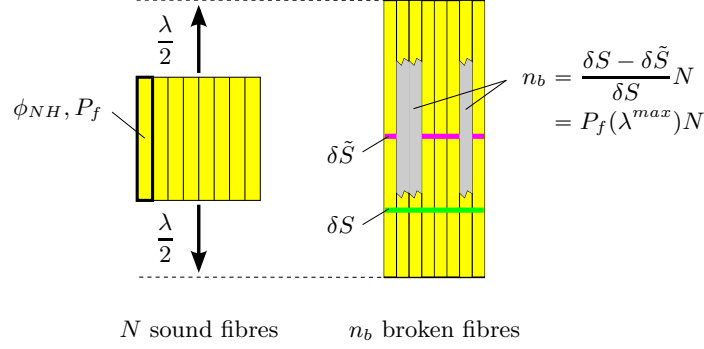


FIGURE 17. The RVE consists of a bundle of elastic initially unbroken fibres of specific elastic energy ϕ_{NH} and probability of rupture P_f (eq. (6.3)). It is subjected to an elongation λ up to the maximum elongation ratio λ^{max} . The zone where the microdefects have appeared upon the rupture of the fibres are represented in grey.

& Desmorat 2005). The RVE consists of N parallel elastic fibres initially unbroken and subjected to an elongation ratio λ .

Each fibre is associated to the specific elastic energy ϕ_{NH} and has a brittle behaviour given by the classical energetic criterion of rupture

$$\begin{cases} \phi_{NH}(\lambda^{max}) < \phi_u \Rightarrow \text{sound fibre} \\ \phi_{NH}(\lambda^{max}) = \phi_u \Rightarrow \text{broken fibre,} \end{cases} \quad (6.1)$$

where ϕ_u is a specific energy at rupture and λ^{max} is defined similarly to Y^{max} in eq. (2.31). The key ingredient of this model is to consider ϕ_u as a random variable with probability density $p(\phi_u)$ given by the following band-limited and uniform probability density

$$p(\phi_u) = \begin{cases} \frac{1}{Y_C} & \forall \phi_u \in [Y_D, Y_D + Y_C] \\ 0 & \forall \phi_u \notin [Y_D, Y_D + Y_C]. \end{cases} \quad (6.2)$$

where Y_D and Y_C are the parameters of the damage model introduced in eq. (2.28). Hence, from eqs. (6.1) and (6.2), the probability of rupture of a fibre is given by

$$P_f(\lambda^{max}) = \int_0^{\phi_{NH}(\lambda^{max})} p(\phi_u) d\phi_u \quad (6.3)$$

Consistent with eq. (2.9), the damage variable d corresponds to the ratio n_b/N , where n_b is the number of broken fibres. For a large number of fibres, we can postulate $n_b = P_f(\lambda^{max})N$, and thus $d = P_f(\lambda^{max})$. From eq. (6.3), we obtain

$$d = \begin{cases} 0 & \text{if } \phi_{NH}(\lambda^{max}) \leq Y_D \\ \frac{\phi_{NH}(\lambda^{max}) - Y_D}{Y_C} & \text{if } Y_D \leq \phi_{NH}(\lambda^{max}) \leq Y_D + Y_C \\ 1 & \text{if } Y_D + Y_C \leq \phi_{NH}(\lambda^{max}) \end{cases} \quad (6.4)$$

where $\phi_{NH}(\lambda^{max}) = Y^{max}$ (see eq. (2.19)₂). We thus retrieve the damage evolution law (2.29).

This toy model thus shows that the damage evolution law (2.29) is dictated by local phenomena: each fibre has a binary state broken/unbroken (eq. (6.1)), for which the transition is randomly triggered. By integrating the function of rupture probability over all the fibres, we obtain a deterministic damage model for the RVE, where d ranges from 0 (all the fibres are unbroken) to 1 (all the fibres are broken). Eq. (6.2) shows that the model parameters Y_D and Y_C delimit the range of dispersion of the specific energy at rupture in the microstructure.

6.2. Capsule inflation test

We have first applied the model to a capsule under isotropic inflation, case for which we derived an analytical solution. This has allowed us to validate the numerical simulations and to show the consequences of damage on the pressure difference p between the internal and external fluids. The main findings are that a given capsule remains sound up to a critical value of the inflation ratio α_c , at which damage initiates. As the capsule further inflates above this critical value, the isotropic tension first increases with the isotropic strain, reaches a maximum and then decreases: it corresponds to what is generally defined as a softening behaviour. As damage builds up, the pressure difference decreases, as the global stiffness of the capsule is proportional to the local effective surface shear modulus $(1 - d)G_s$. The pressure difference finally returns to $p = 0$, which occurs when the damage variable reaches $d = 1$: it corresponds to the moment when the membrane ruptures. A given capsule is thus characterized by a limit inflation ration α_ℓ at which it breaks up.

The inflation capsule test has shown how excellent the agreement is between the theoretical solution and the one obtained with the FSI damage model. If the problem had been solved in displacement (imposed pressure) as classically done in finite element numerical codes, the material softening behaviour resulting from damage would have induced a loss of stability of the uniform solution at the beginning of the regime of strain localization (Rice 1976; Benallal *et al.* 1993). In this regime, a small perturbation from the uniform solution would have localized damage and strain in a band of width of one element: the solution would have been strongly mesh-dependent. To solve this issue, classical solid solvers require additional methods, called localization limiters, to obtain more objective solutions (Bažant & Pijaudier-Cabot 1988; Simo *et al.* 1993). However, it is interesting to notice that even for the case of a capsule in simple shear flow discussed below, where the solution is non-uniform, we did not observe the effect of strain localization by changing the mesh size (results not shown). This shows how advantageous it is to implement the damage model within an explicit FSI solver, where the node displacements are imposed by the fluid and the corresponding external loads exerted by the fluids on the membrane are solved for in the solid problem. Furthermore, the present FSI scheme is particularly robust and stable, thanks to the fact that the quantities are integrated over the surface in both the fluid and solid solvers.

6.3. Capsule under simple shear flow

We have then considered a capsule under simple shear flow and similarly seen that there exist a critical value of the capillary number Ca_c , at which damage initiates, and a limit capillary number Ca_ℓ , at which capsule rupture occurs. In the model, we have chosen to base the criterion for damage on the elastic energy release rate Y of the membrane and to use the evolution law developed by Marigo (1981) for quasi-brittle materials, in which damage evolves when $Y = Y_D + Y_C d$. The initiation of damage is then solely dictated by the threshold modulus Y_D , to which Ca_c is proportional. As for the hardening modulus Y_C , it governs the rate at which damage occurs: the lower Y_C , the faster rupture occurs. The initiation of rupture ($d = 1$) and the corresponding limit capillary number Ca_ℓ are thus controlled by $Y_C + Y_D$.

For $Ca_c < Ca < Ca_\ell$, irreversible damage appears on the flanks of the capsule at the points P and P' located on the flow vorticity axis: it is at these locations that the internal membrane tension is the highest. As the capsule tank-treads, the two damaged zones grow around these points, but remain confined in their vicinity, the maximum values remaining at P and P' . The most striking results in this range of capillary numbers are that the capsule still reaches a steady deformed shape like in the case without damage, and that the effect of damage remains non-visible on the capsule deformed shape, inclination and dynamics. Indeed, damage concentrates around the capsule poles P and P' in the case of a simple shear flow, without propagating to the entire capsule. Note that such would not be the case under other flows conditions with three-dimensional vorticity effects, as the capsule rotation would lead to an isotropic distribution of damage all over the capsule membrane. Still, at present, differences in shape and inclination with the no-damage case start to be visible,

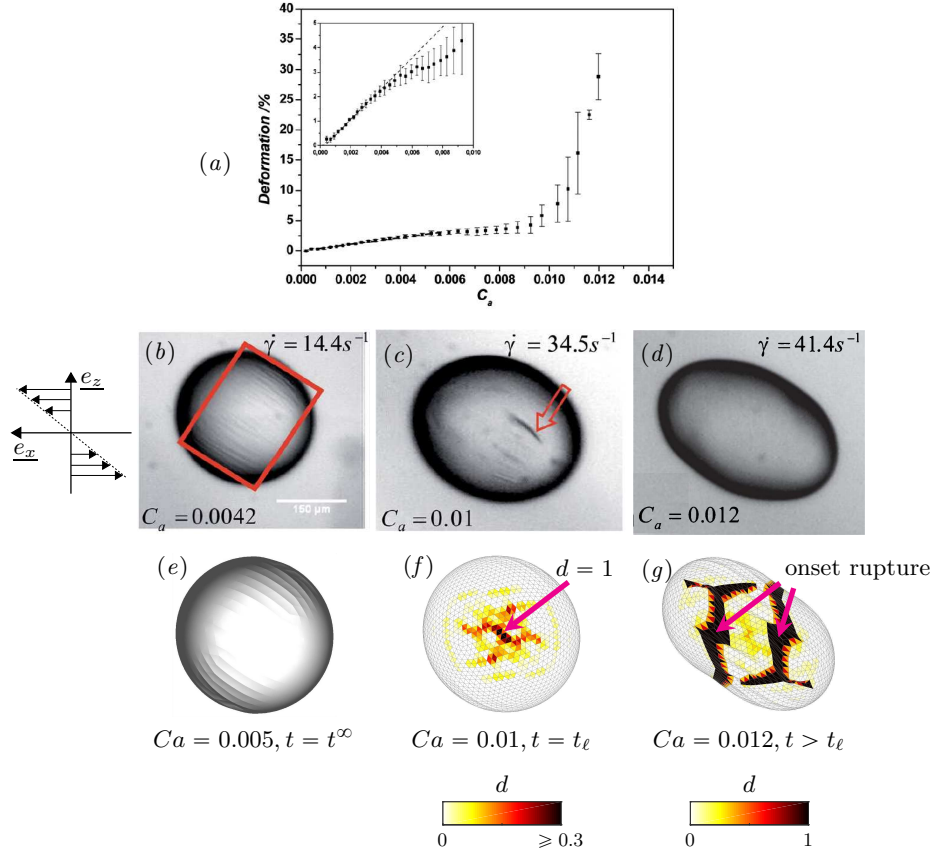


FIGURE 18. Experimental results obtained by Koleva & Rehage (2012) on polysiloxane microcapsules: (a) Evolution of the Taylor parameter D_{12} with the capillary number Ca , (b) Formation of wrinkles at $Ca = 0.0042$, (c) Formation of a crack at $Ca = 0.01$, (d) Divergence of the capsule shape for Ca larger than $Ca = 0.01$. Numerical predictions given by the present damage FSI model for $Y_D/G_s = 5 \times 10^{-4}$ and $Y_C/G_s = 3.1 \times 10^{-3}$: (e) At $Ca = 0.005$, 3D rendering showing the presence of wrinkles. (f) At $Ca = 0.01$, map of damage at $t = t_\ell$ when rupture initiates ($d = 1$). (g) At $Ca = 0.012$, map of damage at an instant of time after $t = t_\ell$ while the capsule shape diverges due to infinite elongation, this is a case where damage initiates at the points on the vorticity axis but not rupture, which occurs in the nearby region. Pictures (a-d) are reproduced from (Koleva & Rehage 2012) with permission of The Royal Society of Chemistry.

when Ca gets close to Ca_ℓ . At $Ca = Ca_\ell$, rupture finally occurs at points P and P' , and no steady deformed shape exists thereafter for the capsule.

6.4. Comparison with experiments of capsule damage

Damage models are phenomenological and require confrontation with experimental data to assess the relevance of choice of damage evolution law. It is interesting to observe that the present findings corroborate well the results of the few experimental studies present in the literature, which showed that rupture is initiated at the points of maximum elastic tension (Husmann *et al.* 2005; Abkarian *et al.* 2008; Koleva & Rehage 2012; Unverfehrt *et al.* 2015; Le Goff *et al.* 2017). The damage model assumptions are thus relevant to study the dynamics of microcapsules in flow.

Comparing the results of the model with experiments also serves the purpose of identifying the values of the model parameters, namely Y_D and Y_C in the present model. We propose to look more closely at the results obtained by the group of Prof. H. Rehage on thin polysiloxane microcapsules subjected to a simple shear flow until breakup in a counter-rotating rheometer cell (Koleva & Rehage 2012; Unverfehrt *et al.* 2015). They followed a given capsule under increasing values of shear rate and found that wrinkles form on the capsule membrane (Figure 18b) similarly to what was predicted by numerical models (Lac *et al.* 2004; Walter *et al.* 2010). Polysiloxane being very brittle and resistant to deformation,

only a small increase in capsule deformation was observed as Ca increased (Figure 18a), and rupture occurred at only 3% of deformation. The crack formed in the region near the vorticity axis (Figure 18c), in agreement with the prediction given by our model. Similarly to what we have shown in section 5.2, no influence of damage effects could be observed on the Taylor parameter curve (Figure 18a). But, even though simple shear flow experiments do not allow to identify the value of Ca_c (and thus Y_D), Ca_ℓ is easily identified from the point of divergence of the Taylor parameter curve. Note that in Koleva & Rehage (2012) the capillary number is based on the surface Young modulus instead of the surface shear modulus as in the present study. However, for the capsules of Figure 18, the authors estimated that the two moduli had practically the same values, indicating that the Poisson ratio of the membrane was negative. The polysiloxane capsules of Figure 18 are thus found to have a limit capillary number $Ca_\ell(Y_D, Y_C) = 0.01$, which provides an implicit relationship between Y_D and Y_C . Since we know from Figure 16 that the damaged domain is delimited by the curves $Ca = Ca_c$ and $Ca = 0.01$, we deduce that $Y_D \in [0; 1 \times 10^{-3}]$ and $Y_C \in [0; 4.6 \times 10^{-3}]$. We have run simulations assuming $Y_D/G_s = 5 \times 10^{-4}$ and $Y_C/G_s = 3.1 \times 10^{-3}$, for which $Ca_\ell(Y_D, Y_C) = 0.01$, and found a good fit between the numerical predictions (Figure 18e-g) and the experimental results (Figure 18b-d). For $Ca \geq Ca_\ell$, we have continued the simulations after the critical instant $t = t_\ell$ where rupture initiates, and found that the totally damaged state $d = 1$ of the membrane propagates in the plane perpendicular to the major axis (O, \underline{e}_1) and that the capsule elongates indefinitely along its major axis (Figure 18g). The divergence of the capsule shape in the simulations (Figure 18g) is similar to what is observed experimentally (Figure 18d).

In retrospect, it is surprising that the experiments by Chang & Olbricht (1993a) did not fit those by the group of Prof. Rehage. Chang & Olbricht (1993a), who were the first to study the rupture of polyamide capsules using a counter-rotating rheometer cell, found that rupture initiated at the apex of the major axis, where the capsule is the thinnest. Although these results contradict what all the other studies of the literature have found, it could be interesting to use the damage FSI model to investigate for which damage threshold function (eq. (2.27)) the model would predict an initiation of rupture at that location.

This study, based on an associated damage model with three ingredients (Table 1), could be generalized to include other dissipative phenomena, such as irreversible strains. These have for instance been taken into account by Ghaemi *et al.* (2016), in the case of a capsule under compression. The model, however, does not include the gradual degradation of the membrane and information on rupture is obtained by post-processing the stress-strain results. The modularity of the framework that we are proposing represents a real advantage if one wants to generalize the use of the damage FSI model for crack nucleation prediction and damage property identification. Predicting crack propagation is, however, outside the scope of the model, as it would require the use of another approach. The eXtended Finite Element Method (Sukumar *et al.* 2000; Moës & Belytschko 2002) could then be one option among others to provide answers on the subsequent events following crack nucleation.

Acknowledgements

This work was supported by the European Research Council (ERC) under the European Union's Horizon 2020 research and innovation programme (MultiphysMicroCaps, No. ERC-2017-COG 772191) and by the French Ministry of Higher Education and Research (fellowship of Nicolas Grandmaison).

Declaration of Interests

The authors report no conflict of interest.

2 Complément sur le problème de localisation

Comme nous l'avons décrit à la fin du chapitre 1, plusieurs stades se succèdent jusqu'à la rupture finale d'une structure. Dans la partie 1 nous avons cherché à décrire la phase d'endommagement diffus. L'entrée dans la phase suivante correspond à la localisation des déformations et de l'endommagement dans une zone de faible épaisseur sur la structure (zone de localisation). La transition entre ces deux phases se produit lorsque, au niveau de la zone de localisation, le comportement du matériau devient adoucissant, résultant de l'accumulation de l'endommagement.

Si le modèle d'endommagement permet bien de rendre compte localement d'un comportement adoucissant à partir d'un certain seuil d'endommagement, des problèmes mathématiques et numériques se posent dans ce cas là, qui empêchent d'utiliser le modèle d'endommagement pour modéliser le comportement du matériau dans la zone de localisation, et donc la phase de localisation. L'objectif de cette partie est de mettre en évidence ces problèmes. Dans l'objectif général de notre travail visant à modéliser les différentes phases de la rupture, ce sera l'objet du chapitre 4 de proposer d'étendre le modèle pour tenir compte de la phase de localisation.

Dans la suite, nous commençons par mettre en évidence le caractère mal posé d'un problème de structure dans le cas d'un matériau à comportement adoucissant, à travers un exemple simple, puis, nous déterminerons dans quelles conditions le modèle d'endommagement est mal posé (sur un cas 1D), enfin, nous mettrons en avant les problèmes numériques de dépendance au maillage engendrés par la simulation du phénomène de localisation avec le modèle d'endommagement (avec et sans le fluide). Nous aurons alors une idée plus précise du domaine de validité du modèle d'endommagement, et nous discuterons du choix que nous avons fait dans la partie 1, de considérer que la rupture s'initie lorsque $d = 1$.

2.1 Mise en évidence de la localisation pour les matériaux adoucissants

L'objectif de cette partie est de mettre en évidence le caractère mal posé d'un problème de structure dans la phase de comportement adoucissante d'un matériau.

On se place pour cela dans un cas simple, en considérant le cas unidimensionnel d'une barre de longueur L et de section S , sollicitée en traction, dont l'une des extrémités est encastree, et on impose le déplacement U à l'autre extrémité (Figure 2.1a). On note F l'effort résultant à l'extrémité de la barre.

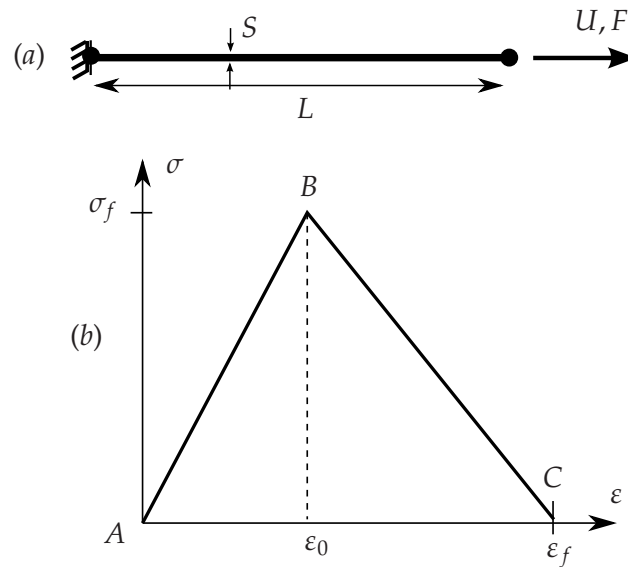


Figure 2.1 – (a) Barre en traction uniaxiale, et (b) sa loi de comportement locale (bilinéaire).

On se place dans le cadre de l'hypothèse des petites perturbations et on suppose que la loi de comportement du matériau est donnée par la loi bilinéaire suivante (Figure 2.1b) :

$$\begin{cases} \sigma = E\epsilon & \text{si } \epsilon \leq \epsilon_0 \\ \sigma = K(\epsilon - \epsilon_0) + E\epsilon_0 & \text{si } \epsilon \geq \epsilon_0 \end{cases} \quad (2.1)$$

où σ et ϵ sont la contrainte et la déformation dans la direction uniaxiale, respectivement, ϵ_0 est une constante, E est le module d'Young, et K est une constante telle que $K < 0$. Enfin, en supposant que la transformation est quasi-statique, l'équilibre de la barre impose :

$$\sigma(x) = cste, \quad (2.2)$$

où x est la position d'un point le long de barre, et $cste$ est une constante qui ne dépend que du temps. Par ailleurs, à $t = 0$, on a $\epsilon = 0 \quad \forall x$, et $U = 0$.

On cherche alors à déterminer dans quelles conditions le problème devient mal posé en imposant une évolution de U .

À partir de $t = 0$, on fait évoluer U . Tant que $U/L < \epsilon_0$, la déformation est homogène dans la barre, donnée par $\epsilon = U/L$, et on a $F = ESU/L$. La solution est unique.

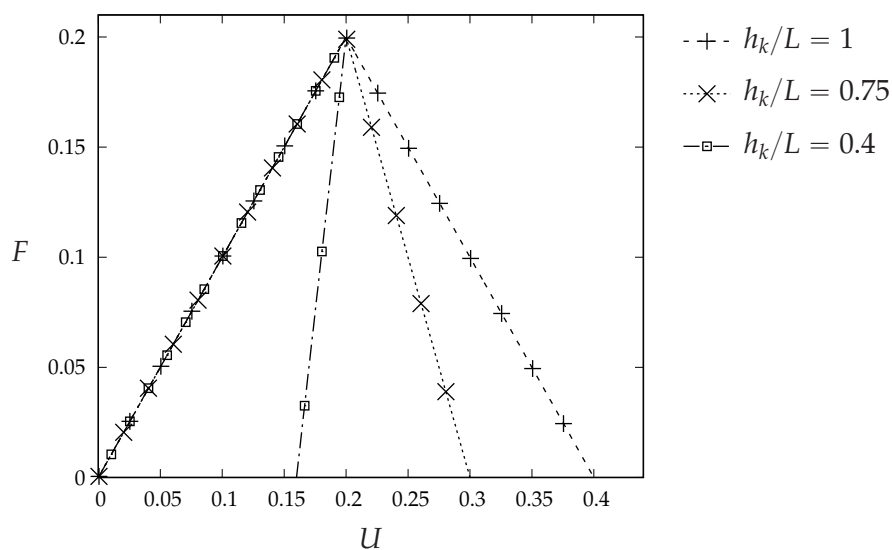


Figure 2.2 – Évolution de l'effort F en fonction du déplacement U pour différentes valeurs du rapport h_k/L . Calculé pour $E = 1$, $K = -1$, $\varepsilon_0 = 0.2$, $S = 1$ et $L = 1$.

A l'instant t_0 où $U/L = \varepsilon_0$, c'est-à-dire lorsqu'en chaque point on atteint la déformation ε_0 , comme une solution doit correspondre à une contrainte constante le long de la barre, alors en chaque point de la barre il existe deux solutions possibles, consistant, depuis B, soit à revenir sur la branche AB avec une déformation qui diminue (décharge), soit à aller sur la branche BC avec une déformation qui augmente (charge). Si on note Ω_K l'ensemble des points en charge, on a donc les déformations qui augmentent pour les points dans Ω_K , et elles se relaxent pour les points en dehors. L'adoucissement induit donc l'entrée dans la phase de localisation des déformations sur Ω_K . Cependant, comme rien n'impose Ω_K dans le modèle, tout ensemble Ω_K est donc solution. Le problème est alors mal posé car il existe une infinité de solutions (perte d'unicité).

En particulier, si on note h_k la longueur de Ω_K , l'ensemble des solutions pour F est décrit par :

$$F = \left[U + \varepsilon_0 h_k \left(1 - \frac{E}{K} \right) \right] \frac{EKS}{K(L - h_k) + Eh}. \quad (2.3)$$

La Figure 2.2 illustre différentes solutions de F et met donc en évidence le caractère mal posé du modèle lorsqu'on entre dans la phase adoucissante du comportement local (au-delà du pic).

Cet exemple nous a tout d'abord permis de mettre en évidence le lien entre le comportement adoucissant et l'entrée dans la phase de localisation des déformations, et, par ailleurs, lorsque le comportement devient adoucissant localement, le problème devient

mal posé car rien n'indique quelle est la taille du domaine Ω_K sur laquelle la déformation de localise.

Dans la réalité, ce sont les défauts présents dans la barre et l'inhomogénéité des contraintes qui vont déterminer le domaine Ω_K .

2.2 Condition de localisation pour le modèle d'endommagement (cas 1D en petites déformations)

Dans le cas unidimensionnel de la partie précédente, les conditions de localisation (perte d'unicité) étaient données simplement par le seuil de déformation ε_0 . Dans le cas bidimensionnel de la membrane, la condition de localisation dépend de manière générale de l'état de déformation biaxial et de l'endommagement. Pour déterminer les conditions de localisation dans les cas bi- et tridimensionnels, de nombreux travaux se sont basés sur l'approche par bifurcation, dont une contribution importante a été apportée par Rice (1976). Nous proposons ici d'appliquer cette méthode pour déterminer les conditions de localisation du modèle d'endommagement, en nous plaçant dans un cas unidimensionnel simple, l'objectif étant de décrire simplement la démarche qui est généralisable au cas bidimensionnel de la membrane.

On considère à nouveau le cas de la barre en traction décrite dans la partie précédente avec les mêmes conditions limites, et en restant dans le cadre des petites perturbations (Figure 2.1a). On considère le modèle d'endommagement de la partie 1, qu'on adapte ici au cas unidimensionnel. La densité d'énergie libre d'Helmholtz, par unité de longueur, est donnée par :

$$\phi = \frac{1}{2}(1-d)E\varepsilon^2 \quad (2.4)$$

où E est le module d'Young et ε est la déformation. La loi d'évolution de l'endommagement est simplement donnée par :

$$d = \left\langle \kappa^{-1} \left(\frac{1}{2} E \varepsilon_{max}^2 \right) \right\rangle^+ \quad (2.5)$$

avec :

$$\begin{cases} \kappa^{-1}(X) = \frac{X - Y_D}{Y_C} \\ \varepsilon_{max} = \max_{\tau \leq t}(\varepsilon(\tau)), \end{cases} \quad (2.6)$$

Figure 2.3 – Barre contenant la bande de localisation Ω^+ .

et :

$$\langle X \rangle^+ = \begin{cases} X & \text{si } X \geq 0 \\ 0 & \text{sinon .} \end{cases} \quad (2.7)$$

La loi de comportement locale est déduite d'après (2.4) :

$$\sigma = (1 - d)E\varepsilon \quad (2.8)$$

En notant u le champ de déplacement le long de la barre, l'équation de compatibilité est donnée par :

$$\varepsilon = \frac{du}{dx}. \quad (2.9)$$

On considère par ailleurs toujours une évolution quasi-statique :

$$\frac{d\sigma}{dx} = 0. \quad (2.10)$$

Dans la partie précédente, nous avons vu que le problème devient mal posé lorsqu'on passe d'un état de déformation homogène à un état de déformation hétérogène localisé. L'approche des bifurcations consiste alors à déterminer les conditions pour lesquelles, pour un solide homogène en déformation homogène, une bande de localisation, c'est-à-dire une zone délimitée par deux surfaces de discontinuité du taux de déformation, peut apparaître. Le problème est alors en effet mal posé car rien n'indique la taille de la bande de localisation.

On note Γ l'une des surfaces de discontinuité, qui correspond à une section droite sur la barre, qui divise la barre en deux domaines Ω^+ et Ω^- , et on considère que la deuxième surface est à l'extrémité de la barre, de sorte que Ω^+ correspond à la bande de localisation (Figure 2.3). On note les champs dans chaque domaine Ω^+ et Ω^- avec les exposants $()^+$ et $()^-$, respectivement.

On introduit g l'amplitude du saut de taux de déformation à travers la surface de discontinuité Γ :

$$\dot{\varepsilon}^+ - \dot{\varepsilon}^- = g, \quad (2.11)$$

où \dot{X} désigne la dérivée temporelle de la grandeur X . Par ailleurs, on réécrit la loi de comportement (2.8) sous forme incrémentale :

$$\dot{\sigma} = L\dot{\varepsilon}, \quad (2.12)$$

avec :

$$\begin{cases} L = \underbrace{(1-d)E}_{L_e}, & \text{s'il n'y a pas d'évolution de l'endommagement} \\ L = \underbrace{\left[(1-d) - \frac{E\varepsilon^2}{Y_C} \right] E}_{L_d}, & \text{sinon.} \end{cases} \quad (2.13)$$

La condition de localisation se dérive en partant de l'équation d'équilibre (2.10) qui nous donne :

$$\dot{\sigma}^+ - \dot{\sigma}^- = 0. \quad (2.14)$$

D'après l'équation (2.12), on a alors :

$$L^+\dot{\varepsilon}^+ - L^-\dot{\varepsilon}^- = 0, \quad (2.15)$$

et d'après l'équation (2.11), le saut de taux de déformation g vérifie alors :

$$L^+g + (L^+ - L^-)\dot{\varepsilon}^- = 0. \quad (2.16)$$

Cette équation admet toujours la solution triviale $g = 0$. La localisation s'initie au premier instant au cours de l'histoire du chargement où l'équation (2.16) admet une autre solution $g \neq 0$.

La condition de localisation peut alors se mettre sous la forme (Lemaitre & Desmorat, 2005, p. 67) :

$$L_d \leq 0. \quad (2.17)$$

Tableau 2.1 – Valeurs adimensionnées des paramètres du modèle d'endommagement pour la membrane en traction uniaxiale.

Y_D	0.01
Y_C	0.1

D'après l'équation (2.13)₂, la condition (2.17) peut se mettre sous la forme :

$$d \geq D_c, \quad (2.18)$$

où D_c est la valeur critique d'endommagement donnée par :

$$D_c = \frac{1}{3} \left(1 - 2 \frac{Y_D}{Y_C} \right). \quad (2.19)$$

Comme d est continue, croissante, et initialement égale à 0, alors, la condition de localisation (2.18) peut être remplacée par

$$d = D_c. \quad (2.20)$$

La valeur critique D_c correspond à la valeur de d lorsqu'on se trouve au niveau du pic de la courbe de σ en fonction de ε , c'est-à-dire lorsqu'on entre dans la phase de comportement adoucissante. Dans le cas de la membrane, D_c dépend aussi de l'état de déformation.

En suivant l'approche des bifurcations que nous avons présenté ici, on pourrait déterminer de la même manière les conditions de localisation pour la membrane en grande déformation (Oliver *et al.*, 2003, p. 1058). Les calculs restent à être menés.

2.3 Aspects numériques du problème de localisation

L'objectif de cette partie est de mettre en évidence comment se caractérise le problème de localisation au niveau numérique et de faire le lien avec les parties précédentes.

Pour cela, on considère une membrane rectangulaire en traction uniaxiale, qui est maillée avec différentes tailles d'éléments au centre du maillage (Figure 2.4). La membrane est encadrée à l'une de ses extrémités, et on impose un déplacement U à l'autre extrémité. Les valeurs des paramètres du modèle d'endommagement sont données dans le tableau 2.1. Afin de mettre en évidence la localisation, on affaiblit légèrement les deux éléments au centre du maillage, la valeur du paramètre Y_D de ces éléments est prise égale à 99% de celle des autres éléments.

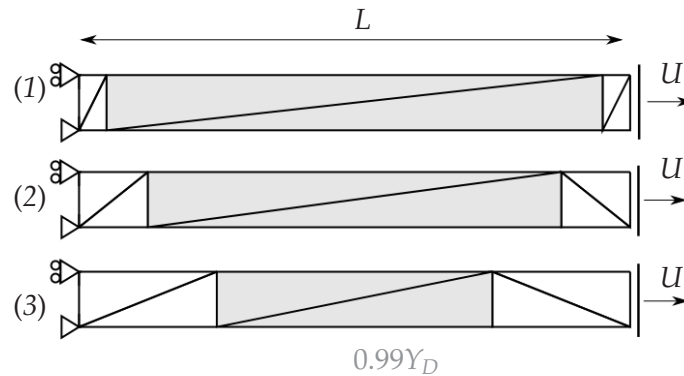


Figure 2.4 – Maillages de la membrane rectangulaire avec des éléments P1. Les éléments en gris sont les éléments affaiblis pour lesquels la valeur de Y_D vaut 99% de celle donnée dans le Tableau 2.1.

Sur la Figure 2.5a est représentée la courbe d'évolution de l'effort résultant F à l'extrémité de la membrane en fonction du déplacement imposé U , et la Figure 2.5b représente le profil de déformation le long de la membrane pour un déplacement imposé U_0 (le déplacement U_0 est défini sur la Figure 2.5a).

Dans la portion de la courbe force/déplacement allant du point O au point A , les éléments ont un comportement élastique et les déformations sont homogènes dans toute la membrane. Puis, du point A au point B , l'endommagement et les déformations évoluent de manière homogène dans la membrane. Au niveau du point B , l'endommagement atteint la valeur critique D_c dans les éléments affaiblis. Au-delà du pic au niveau du point B , on constate que la courbe de réponse force/déplacement dépend fortement du maillage. On constate sur la Figure 2.5b que, dans cette phase, les déformations sont localisées au niveau des éléments au centre, qui sont les éléments affaiblis. Seuls ces éléments sont entrés dans la phase adoucissante du comportement, les autres éléments se déchargent de façon élastique. Ainsi, au-delà du point B , l'endommagement n'évolue que dans les éléments affaiblis, et la dissipation se trouve uniquement concentrée sur ces éléments. Si on poursuivait l'essai jusqu'à $F = 0$ ("rupture"), correspondant à des éléments affaiblis totalement endommagés ($d = 1$), on constaterait alors que l'énergie dissipée dans la structure diminue avec la taille des éléments. En particulier, la dissipation dans la structure dans la phase adoucissante tend vers 0 lorsque la taille des éléments tend vers 0, ce qui n'a pas de sens physique.

La forte dépendance de la solution au maillage dans la phase adoucissante est à relier au caractère mal posé du problème continu. Comme nous l'avons décrit dans les parties précédentes, lorsque le problème continu devient mal posé, il y a une infinité de solutions. Ceci est lié au fait que le modèle continu local ne contient pas intrinsèquement

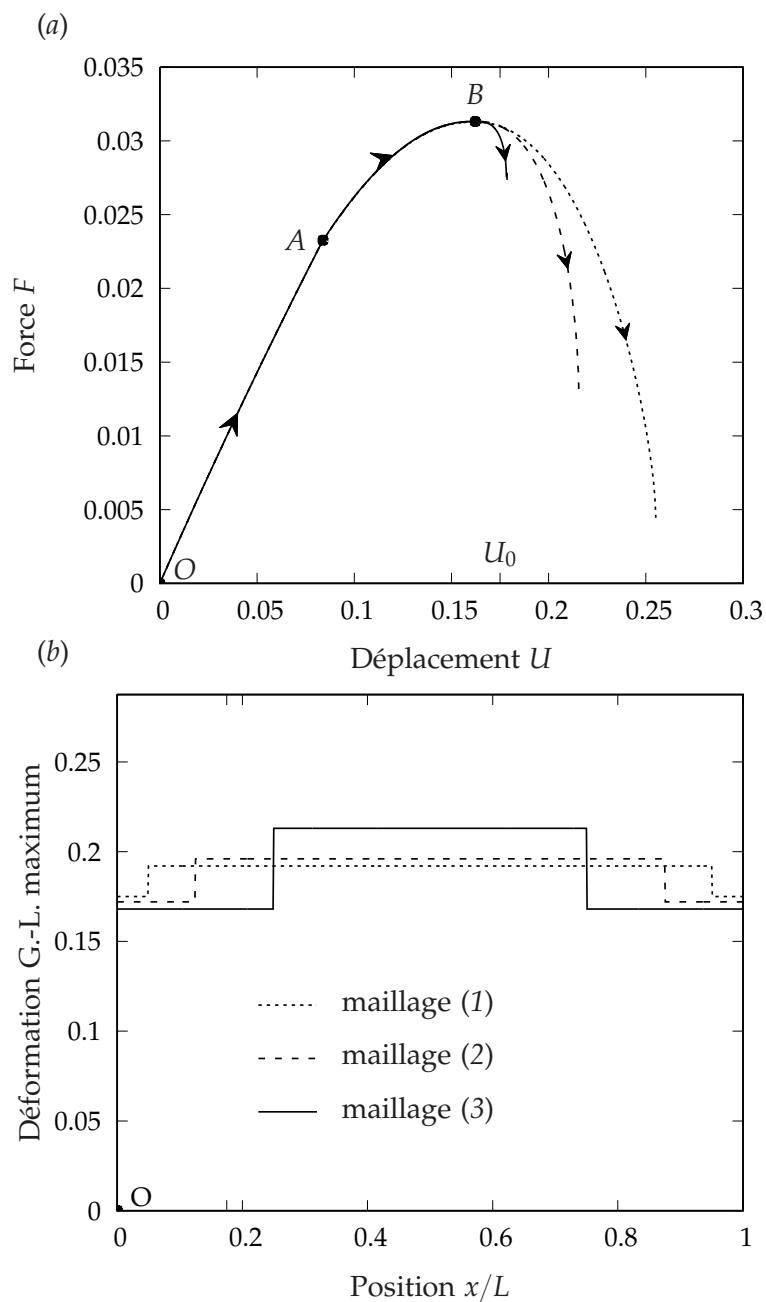


Figure 2.5 – (a) Réponse effort/déplacement de la membrane en traction, et (b) profil de la déformation principale maximum du tenseur de Green-Lagrange lorsque $U = U_0$ (représenté en (a)), pour les trois maillages de la Figure 2.4.

de longueur caractéristique pour prédire la taille de la zone sur laquelle les déformations se localisent dans la phase adoucissante. La réponse de la structure dans le régime post-localisation est alors indéterminée. Dans le cas de la solution éléments finis, le problème est modifié. En effet, comme les déformations sont continues à l'intérieur des éléments, et que les discontinuités sont limitées aux bords des éléments, la taille des éléments apparaît alors naturellement comme la longueur caractéristique de localisation. Ainsi, lorsque la condition de localisation est détectée, la réponse post-localisation peut être déterminée, et elle correspond alors aux déformations qui se localisent dans une zone correspondant à une rangée d'éléments. La dissipation se trouve alors elle aussi confinée dans cette zone. La solution est alors pathologiquement dépendante du maillage, en terme de taille, mais aussi d'autres caractéristiques des éléments, en particulier leur orientation.

On pourra noter que les résultats obtenus dans cette partie mettent par ailleurs en évidence le caractère instable de la localisation : en appliquant de très faibles perturbations aux conditions initiales/limites des différents maillages, après la localisation, on obtient des solutions qui sont très éloignées les unes des autres. La localisation est donc un phénomène d'instabilité, local.

2.4 Localisation pour une capsule en écoulement

Dans les parties précédentes, nous avons traité le problème de localisation en l'absence du fluide. Dans l'environnement fluide-structure, on pourrait s'attendre à ce que les propriétés visqueuses du fluide, en contact avec la membrane, aient un effet régularisant sur le problème de localisation, car le fluide contrôle la vitesse à laquelle les déformations peuvent se localiser. Par ailleurs, différentes méthodes basées sur des modèles de viscosité ont été proposées dans la littérature pour régulariser le problème de localisation.

Pour établir si l'endommagement se localise dans le cas d'une capsule en écoulement, on se place dans le cadre l'étude de la partie 1, et on considère un cas où on impose une valeur du nombre capillaire Ca supérieure au nombre capillaire limite Ca_ℓ , de manière à ce que l'endommagement atteigne la valeur $d = 1$, et qu'il ait donc dépassé la valeur d'endommagement critique D_c à partir de laquelle la condition de localisation (éq. (2.20)), établie dans un cas sans fluide, ait été vérifiée. Dans le cas d'une capsule en écoulement de cisaillement simple, l'endommagement étant maximum au niveau des deux pôles situés sur l'axe de vorticité de l'écoulement, si la localisation des déformations et de l'endommagement se produit, c'est au niveau de ces pôles qu'elle doit

Tableau 2.2 – Valeurs adimensionnées des paramètres du modèle pour étudier la localisation pour capsule en écoulement de cisaillement simple.

Ca	Y_D	Y_C	Δt
0.74	0.2	2.0	10^{-4}

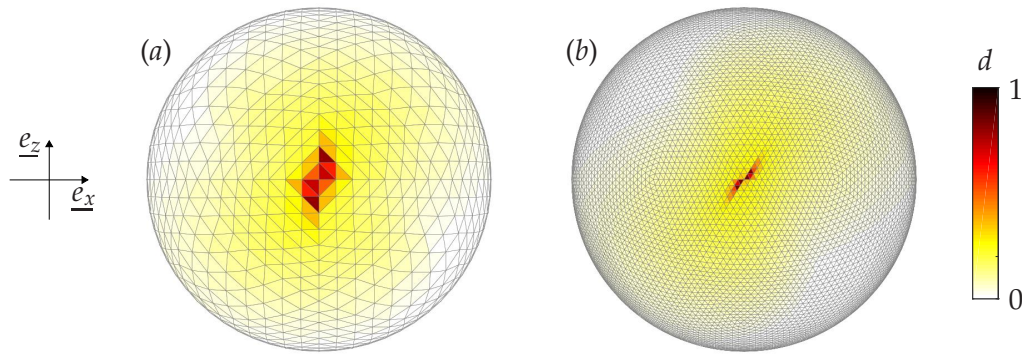


Figure 2.6 – Cartographie de l'endommagement pour une capsule en écoulement de cisaillement simple peu de temps avant que l'endommagement atteigne la valeur $d = 1$, obtenue avec un maillage de (a) 512 éléments P2, et de (b) 5120 éléments P2. Chaque élément P2 a été subdivisé en 4 éléments P1 sur ces images. La capsule est représentée dans la configuration de référence et dans le plan $(\underline{e}_x, \underline{e}_z)$, d'après le repère défini dans la partie 1. Les résultats ont été obtenus pour les valeurs des paramètres données dans le Tableau 2.2.

apparaître. Nous avons considéré deux maillages, l'un grossier, l'autre fin, et avons pris les valeurs des paramètres données dans le tableau 2.2.

Sur la Figure 2.6 est représentée la cartographie de l'endommagement pour les deux maillages lorsque d a atteint des valeurs suffisamment élevées (au-delà de $d = D_c$) tout en étant inférieur à $d = 1$. On peut constater que l'endommagement s'est localisé sur une zone d'une largeur de la taille des éléments. Cela implique donc que l'endommagement et les déformations ont bien tendance à se localiser lorsque la condition de localisation (éq. (2.20)) est vérifiée.

Pour compléter cette étude sur la localisation, on se place dans le cas où $Ca < Ca_\ell$, pour lequel l'initiation de la rupture ne se produit pas ($d < 1$), et étudions l'influence qu'a la taille du maillage sur la courbe d'évolution de d_{max}^∞ , quantité que nous avons introduit dans la partie 1 et qui correspond au maximum spatial de la variable d'endommagement d à l'état stationnaire, en fonction du nombre capillaire. On considère

Tableau 2.3 – Nombre d'éléments et taille caractéristique des éléments (adimensionnée par le rayon de la capsule) des maillages P2 considérés pour l'étude de la localisation pour une capsule en écoulement de cisaillement simple lorsque $Ca < Ca_\ell$.

Nombre d'éléments	5120	1280	512
taille des éléments	0.06	0.13	0.21

trois maillages, dont le nombre d'éléments et la taille caractéristique des éléments est précisée dans le tableau 2.3.

Les résultats sont présentés sur la Figure 2.7. On constate que les courbes obtenues pour les trois maillages se recouvrent jusqu'à une certaine valeur seuil de d_{max}^∞ , à partir de laquelle on peut commencer à distinguer les différentes courbes. Cette description rappelle celle que nous avons donnée dans la partie précédente concernant les courbes de réponse Force/Déplacement obtenues pour les différents maillages de la membrane plane. Dans ce cas, les courbes se séparaient au moment où la valeur de l'endommagement critique correspondant à la condition de localisation, était dépassée. Il semble donc que le seuil de d_{max}^∞ à partir duquel les courbes se distinguent corresponde à la valeur de l'endommagement critique. En effet, sur la Figure 2.7, cette valeur seuil de d_{max}^∞ est évaluée à 0.24, ce qui est proche de la valeur critique D_c donnée par le modèle unidimensionnel que nous avons décrit dans la partie 2.2, pour lequel on obtient $D_c = 0.27$, sachant que l'état de tension au niveau des pôles sur l'axe de vorticit  (où se trouve d_{max}) est proche d'un état de tension uniaxial, comme c'est le cas du modèle unidimensionnel. Les résultats deviennent donc dépendant du maillage lorsqu'on dépasse le seuil de localisation, comme c'était le cas avec la membrane sans le fluide dans la partie 2.3.

Ainsi, bien que le fluide contrôle la vitesse de localisation des déformations, comme les déformations restent, elles, discontinues d'un élément à l'autre, alors les déformations peuvent se localiser sur un élément ou une rangée d'éléments, même en présence du fluide, si on dépasse localement le seuil de localisation ( q. (2.20)).

Ainsi, en choisissant $d = 1$ comme crit re de rupture, on inclut la phase de localisation dans le mod le, pour laquelle il y a une d pendance au maillage. Toutefois, comme on peut le constater sur la Figure 2.7, les valeurs de Ca_ℓ (valeur seuil de Ca à partir de laquelle d atteint la valeur 1) obtenues pour les différents maillages sont proches, et en particulier elles sont proches de la valeur de Ca pour laquelle on atteint $d_{max}^\infty = D_c$, correspondant au seuil de localisation. Par ailleurs, lorsqu'on atteint $d_{max}^\infty = D_c$, une faible variation de Ca induit une forte variation de d_{max}^∞ quel que soit le maillage consid r .

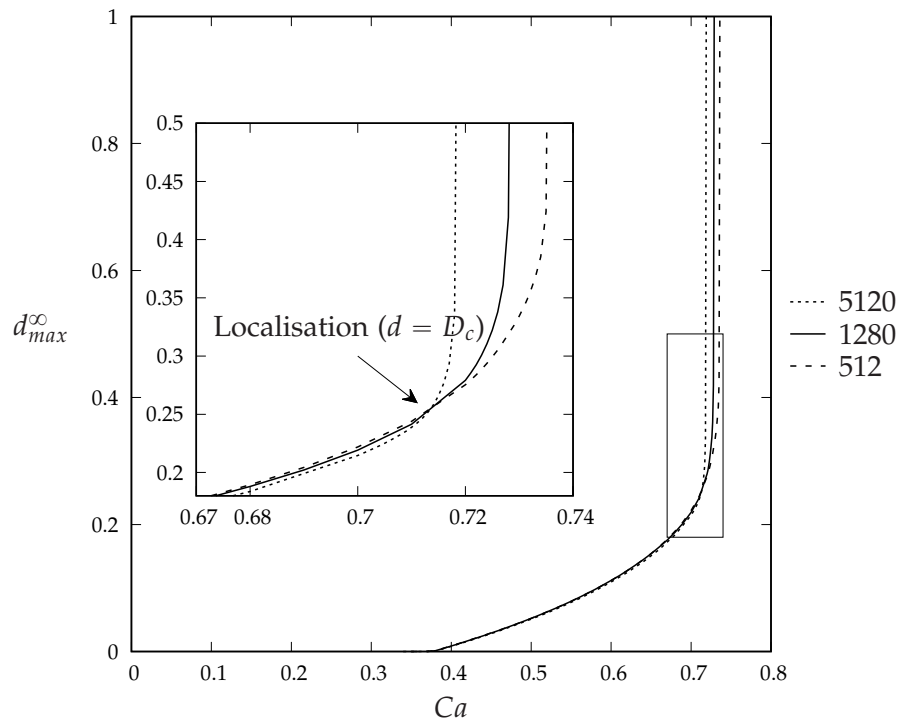


Figure 2.7 – Évolution de la valeur maximum de l'endommagement pour une capsule en écoulement de cisaillement simple à l'état stationnaire d_{max}^{∞} , en fonction du nombre capillaire, obtenu pour les trois maillages décrits dans le Tableau 2.3. Calculs réalisés avec $Y_D = 0.2$ et $Y_C = 2.0$.

Ainsi quelle que soit l'énergie dissipée dans les éléments localisés, ils prédisent tous qu'une fois qu'on atteint l'instabilité locale (localisation), et que le comportement local devient adoucissant, on a une instabilité globale (rupture). Ainsi, on peut considérer qu'en choisissant $d = 1$ comme critère de rupture, on estime correctement les conditions pour lesquelles la rupture se produit.

Toutefois, si on cherche à modéliser précisément les phénomènes de rupture qui ont lieu dans la phase de localisation, le modèle d'endommagement ne convient pas et il faut donc étendre le modèle. C'est l'objet du chapitre 4.

Chapitre 3

Évolution des critères d'endommagement

Dans ce chapitre, on s'intéresse au mode de rupture observé par Chang & Olbricht (1993a) pour des capsules en écoulement de cisaillement simple, qui suggère l'existence d'un autre mécanisme d'endommagement, corrélé à l'amincissement de la membrane. Pour décrire ces mécanismes, on développe un nouveau modèle où l'endommagement est sensible aux dilatations surfaciques de la membrane. On étudie l'endommagement d'une capsule sphérique en écoulement de cisaillement simple avec différentes lois de comportement hyperélastiques pour la membrane. Le mode d'initiation de la rupture donné par le modèle est en bon accord avec l'expérience de Chang et al..

1 Introduction

Dans le chapitre précédent, nous avons développé un modèle d'interaction fluide-structure permettant de modéliser l'endommagement quasi-fragile d'une capsule en écoulement, jusqu'à l'initiation de la rupture. L'initiation de la rupture donnée par ce modèle pour une capsule en écoulement de cisaillement simple est en bon accord avec les résultats d'études expérimentales (Koleva & Rehage, 2012; Unverfehrt *et al.*, 2015).

Les travaux de Chang & Olbricht (1993a) ont mis en évidence un autre mode d'initiation de la rupture pour une capsule en polyamide en écoulement de cisaillement simple, où la rupture s'initie dans le plan de cisaillement à l'un des sommets du grand axe de la capsule. Dans cet article, les auteurs estiment que les sommets du grand axe sont aussi les régions de la membrane où l'épaisseur a diminué le plus.

L'objectif de cette étude est de voir s'il serait possible, à partir d'un modèle d'endommagement quasi-fragile, de prédire l'initiation de la rupture telle que l'ont observé Chang & Olbricht (1993a), en traduisant le critère de rupture portant sur l'épaisseur de la membrane en un modèle d'endommagement.

2 Contexte

Dans leurs expériences, Chang *et al.* observent systématiquement la rupture des capsules lorsque leur déformation par l'écoulement devient suffisamment importante au cours de l'augmentation du taux de cisaillement (qui est augmenté par échelons successifs avec des interruptions brèves entre chaque échelon). À partir du modèle asymptotique de Barthès-Biesel & Sgaier (1985), les auteurs estiment que la zone d'initiation de la rupture au niveau des sommets du grand axe de la capsule, coïncide avec la région où l'épaisseur de la membrane s'est le plus amincie.

Avant de développer le modèle d'endommagement, nous proposons de vérifier l'estimation qu'avaient fait Chang *et al.* sur les variations d'épaisseur de la membrane. En effet, leur estimation est basée sur un modèle analytique valable en petites déformations, qu'ils ont appliqué pour des déformations importantes des capsules, les valeurs du paramètre de Taylor (introduit dans le chapitre précédent) valant typiquement $D_{12} = 0.3$ à $D_{12} = 0.4$ aux instants précédant l'initiation de la rupture. On se propose donc de déterminer la variation locale d'épaisseur ϑ/ϑ_0 , où ϑ désigne l'épaisseur de la membrane dans la configuration courante, et ϑ_0 est l'épaisseur de la membrane dans la configuration de référence, pour trois lois de comportement hyperélastiques, et pour la valeur du nombre capillaire pour laquelle la déformation la plus importante $D_{12} = 0.4$ a été observée, c'est-à-dire pour le nombre capillaire $Ca = 0.3$, celui-ci étant ici calculé comme dans le chapitre 2, à partir du module de cisaillement surfacique.

On reste dans le cadre des hypothèses du chapitre 2 pour la formulation de l'écoulement des fluides et la mécanique de la membrane. Pour le comportement de la membrane, on suppose pour ce calcul qu'il n'y a pas d'endommagement. On détermine les variations d'épaisseur de la membrane pour trois potentiels hyperélastiques bidimensionnels : le potentiel de Hooke généralisé, le potentiel néo-Hookéen, et le potentiel de Mooney-Rivlin (le potentiel néo-Hookéen étant un cas particulier du potentiel de Mooney-Rivlin). Les expressions de chacun de ces potentiels seront précisées dans la suite du chapitre. Pour le potentiel de Mooney-Rivlin, nous choisissons le cas où les deux modules présents dans son expression sont égaux, qui correspond, avec les notations que nous introduisons plus bas, au cas $\psi = 0.5$. Ces potentiels étant construits à partir de potentiels hyperélastiques tridimensionnels, on détermine la déformation dans la direction de l'épaisseur à partir des déformations dans le plan tangent de la membrane. On fait l'hypothèse que la paroi de la capsule est localement incompressible en volume, comme l'ont supposé Chang *et al.*.

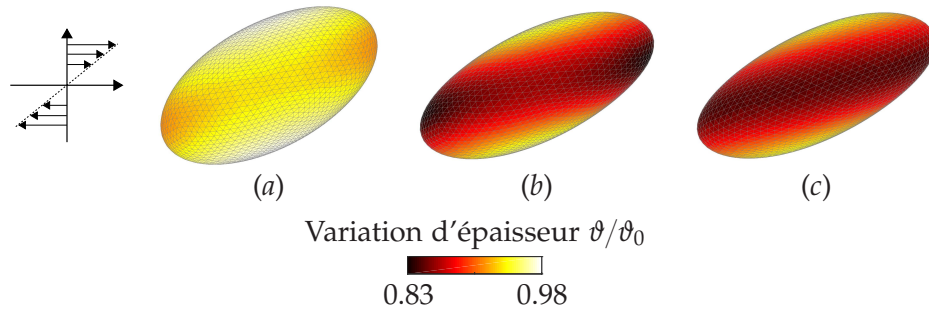


Figure 2.1 – Distribution de la variation d'épaisseur ϑ/ϑ_0 sur la membrane d'une capsule qui a atteint l'état stationnaire dans un écoulement de cisaillement simple, où la membrane est modélisée avec (a) une loi de Hooke Généralisée pour un coefficient de Poisson égal à 0.5, (b) une loi néo-Hookéenne, (c) une loi de Mooney-Rivlin pour $\psi = 0.5$ (voir plus bas pour la définition de ψ). ϑ désigne l'épaisseur dans la configuration courante, et ϑ_0 est l'épaisseur dans la configuration de référence. Calculé pour un nombre capillaire égal à 0.3. La capsule est observée dans le plan de cisaillement. Toutes les images sont à la même échelle.

La Figure 2.1 présente la distribution de la variation locale d'épaisseur ϑ/ϑ_0 pour la valeur du nombre capillaire $Ca = 0.3$. Les trois lois prédisent bien la variation d'épaisseur la plus faible dans le plan de cisaillement, près des deux sommets du grand axe de la capsule. Pour la loi de Mooney-Rivlin avec $\psi = 0.5$, on voit toutefois que dans la région centrale de la capsule, telle qu'elle est observée sur la Figure 2.1, les variations d'épaisseur ont des valeurs relativement proches de la valeur minimum.

Ces résultats confortant l'hypothèse selon laquelle la membrane s'amincit le plus dans les zones où l'initiation de la rupture est observée, nous avons cherché à développer un modèle d'endommagement pour lequel le critère d'endommagement est lié à la diminution locale de l'épaisseur de la membrane.

3 Évolution du modèle d'endommagement

Pour développer le modèle d'endommagement, on reste dans le cadre des hypothèses formulées dans le chapitre précédent pour la description de la cinématique de la paroi de la capsule (modèle de membrane). Le modèle d'endommagement que l'on va développer dans cette partie se base sur le fait que, pour une membrane élastique isotrope, en petites déformations, la déformation associée à l'épaisseur de la membrane est proportionnelle à la dilatation surfacique de la surface moyenne de la membrane. On

Tableau 3.1 – Résumé des ingrédients clés du modèle d'endommagement associé développé dans cette étude.

Variables d'états / associées	Déformation de Green-Lagrange $\underline{\underline{e}}$ / Tension de Piola-Kirchhoff 2 $\underline{\underline{\pi}}$
	Variable d'endommagement d / Taux de restitution d'énergie Y
Énergie libre d'Helmholtz	$\phi(\underline{\underline{e}}, d) = (1 - d)\phi_e^{dil}(\underline{\underline{e}}) + \phi_e^{dist}(\underline{\underline{e}}),$ avec $\phi_e = \phi_e^{dil} + \phi_e^{dist}$ l'énergie libre du matériau non endommagé
Fonction seuil d'endommagement	$f = Y - \kappa(d),$ avec $\kappa(d) = Y_D + Y_C d,$ où Y_D et Y_C sont deux constantes

propose alors, de manière générale, de développer un modèle où le critère d'endommagement porte sur la dilatation surfacique de la membrane.

Dans le modèle du chapitre 2, la valeur la plus élevée de la variable d'endommagement d est localisée dans les zones de la membrane où la densité d'énergie élastique effective, *i.e.* la densité d'énergie associée à la phase résistante de la microstructure, a atteint sa valeur la plus élevée. Ici, nous allons considérer qu'il n'y a qu'une part de l'énergie élastique effective qui fait croître l'endommagement, et qu'il s'agit d'une part de l'énergie élastique effective qui dépend de la dilatation surfacique.

On construit ce nouveau modèle d'endommagement en restant dans le cadre standard du chapitre 2, où on choisit les mêmes variables d'états/associées et la même fonction seuil d'endommagement. La seule modification que nous apportons au modèle d'endommagement est au niveau de l'expression de la densité surfacique d'énergie libre de Helmholtz ϕ (voir le Tableau 3.1 pour un résumé des ingrédients du modèle).

Dans le chapitre 2, nous avons construit ϕ à partir d'un potentiel néo-Hookéen, ici nous allons le construire de manière générale à partir d'un potentiel hyperélastique bidimensionnel ϕ_e donné sous la forme :

$$\phi_e = \sum_i \phi_{e,i}(I_1, I_2), \quad (3.1)$$

où I_1 et I_2 sont des invariants surfaciques donnés par :

$$\begin{cases} I_1 = tr(\underline{\underline{C}}) - 2 = \lambda_I^2 + \lambda_{II}^2 - 2, \\ I_2 = det(\underline{\underline{C}}) - 1 = \lambda_I^2 \lambda_{II}^2 - 1, \end{cases} \quad (3.2)$$

avec $\underline{\underline{C}}$ le tenseur de dilatation surfacique et λ_I et λ_{II} sont les allongements principaux maximum et minimum, respectivement.

On choisit alors le potentiel ϕ sous la forme :

$$\phi = (1 - d) \underbrace{\sum_i (1 - a_i) \phi_{e,i}}_{\phi_e^{dil}} + \underbrace{\sum_i a_i \phi_{e,i}}_{\phi_e^{dist}}. \quad (3.3)$$

Le taux de restitution d'énergie élastique est alors donné par $Y = \phi_e^{dil}$ (Y est la force thermodynamique qui contrôle l'endommagement d'après la fonction seuil que nous avons choisie dans le Tableau 3.1), et l'objectif consiste à déterminer les valeurs des coefficients $(a_i)_i$ qui permettent d'avoir Y (et donc ϕ_e^{dil}) ne dépendant que de la dilatation surfacique.

La décomposition de l'énergie libre suivant l'équation (3.3) suit la même philosophie que des modèles d'endommagement 3D de matériaux hyperélastiques quasi-incompressibles, où l'énergie libre du matériau hyperélastique est décomposée en la somme d'une énergie libre associée aux dilatations volumiques et une autre associée aux déformations isochores (distorsion), et le facteur $(1 - d)$ porte, dans ce cas, sur le terme associé à l'énergie de distorsion (Comellas *et al.*, 2016). Dans notre cas, la différence est que l'on cherche à "pénaliser" un terme correspondant à l'énergie associée à la dilatation surfacique locale.

Comme il est plus aisé de définir un modèle d'endommagement sensible aux dilatations surfaciques en petites déformations, dans la partie 4, on commence par étudier le comportement de membranes hyperélastiques en petites déformations afin de déterminer un modèle d'endommagement sensible aux dilatations surfaciques en petites déformations. Dans la partie 5, on cherche à généraliser le modèle de la section 4 au cas des grandes déformations. Enfin, dans la dernière partie (section 6), on étudie le comportement de capsules en écoulement de cisaillement simple ayant les potentiels ϕ déterminés en section 5.

De manière générale, dans la suite, nous qualifierons le modèle d'endommagement que l'on cherche à établir comme un modèle "anisotrope", par opposition au modèle isotrope développé dans le chapitre 2. Le caractère anisotrope du modèle est lié ici au fait que le comportement initialement isotrope du matériau devient anisotrope avec le développement de l'endommagement.

4 Modèle d'endommagement sensible aux dilatations surfaciques en petites déformations

L'objectif de cette partie est de construire le modèle d'endommagement dans le cas des petites déformations, afin de pouvoir l'étendre au cas des grandes déformations dans la section 5. Dans la partie 4.1, on établit l'expression générale d'un potentiel hyperélastique en petites déformations. Dans la partie 4.2, on développe le modèle d'endommagement anisotrope en petites déformations et on le compare au modèle du chapitre 2, lorsque celui-ci est développé aussi en petites déformations.

4.1 Tenseur d'élasticité

Pour un potentiel hyperélastique ϕ_e donné (néo-Hookéen, Mooney-Rivlin, Skalak, ...), on cherche à établir le comportement local de la membrane autour de l'état d'équilibre naturel, lorsque $\underline{\underline{e}} = \underline{\underline{0}}$, avec $\underline{\underline{e}}$ le tenseur de Green-Lagrange défini par :

$$\underline{\underline{e}} = \frac{1}{2}(\underline{\underline{C}} - \underline{\underline{1}}), \quad (4.1)$$

et $\underline{\underline{0}}$ est le tenseur nul. Pour cela, on développe ϕ_e à l'ordre deux :

$$\phi_e(\underline{\underline{e}}) = \phi_e(\underline{\underline{0}}) + \left. \frac{\partial \phi_e}{\partial \underline{\underline{e}}} \right|_0 : \underline{\underline{e}} + \frac{1}{2} \underline{\underline{e}} : \left. \frac{\partial^2 \phi_e}{\partial \underline{\underline{e}}^2} \right|_0 : \underline{\underline{e}} + o(\|\underline{\underline{e}}\|^2). \quad (4.2)$$

Par convention on choisit :

$$\phi_e(\underline{\underline{0}}) = 0, \quad (4.3)$$

et, en considérant qu'à l'état d'équilibre naturel ($\underline{\underline{e}} = \underline{\underline{0}}$) les tensions sont nulles, on a :

$$\left. \frac{\partial \phi_e}{\partial \underline{\underline{e}}} \right|_0 = \underline{\underline{0}}. \quad (4.4)$$

On note :

$$\underline{\underline{\mathcal{H}}} = \left. \frac{\partial^2 \phi_e}{\partial \underline{\underline{e}}^2} \right|_0, \quad (4.5)$$

le tenseur d'élasticité (ordre 4) à l'état d'équilibre naturel. Lorsqu'on exprime ϕ_e sous la forme $\phi_e = \phi_e(I_1, I_2)$, avec I_1 et I_2 les deux invariants définis dans l'équation (3.2), on a :

$$\underline{\underline{\underline{\mathcal{H}}}} = \left(A \frac{A^{\alpha\gamma} A^{\beta\delta} + A^{\alpha\delta} A^{\beta\gamma}}{2} + B A^{\alpha\beta} A^{\gamma\delta} \right) \underline{A}_\alpha \otimes \underline{A}_\beta \otimes \underline{A}_\gamma \otimes \underline{A}_\delta, \quad (\alpha, \beta, \gamma, \delta) \in \{1, 2\}^4, \quad (4.6)$$

avec $(\underline{A}_\alpha)_{\alpha \in \{1, 2\}}$ la base tangente covariante dans la configuration de référence, $A^{\alpha\gamma}$ les composantes contravariantes du tenseur métrique dans la configuration de référence⁽¹⁾, et A et B sont deux modules d'élasticité donnés par :

$$\begin{cases} A = -4 \frac{\partial \phi_e}{\partial I_2}, \\ B = 4 \left(\frac{\partial^2 \phi_e}{\partial I_1^2} + 2 \frac{\partial^2 \phi_e}{\partial I_1 \partial I_2} + \frac{\partial \phi_e}{\partial I_2} + \frac{\partial^2 \phi_e}{\partial I_2^2} \right). \end{cases} \quad (4.7)$$

Si les déformations \underline{e} sont petites, alors le terme du second ordre dans l'équation (4.2) est prépondérant et on peut faire l'approximation⁽²⁾ :

$$\phi_e(\underline{e}) \simeq \frac{1}{2} \underline{e} : \underline{\underline{\underline{\mathcal{H}}}} : \underline{e}. \quad (4.8)$$

Avec la notation matricielle de Voigt, soit $[e_{**}]$ la matrice colonne des composantes covariantes de \underline{e} dans la base contravariante $(\underline{A}^\alpha)_{\alpha \in \{1, 2\}}$, la base duale de $(\underline{A}_\alpha)_{\alpha \in \{1, 2\}}$, on pose :

$$[e_{**}] = \begin{bmatrix} e_{11} \\ e_{22} \\ 2e_{12} \end{bmatrix}. \quad (4.9)$$

Par ailleurs, soit $[H^{****}]$ la matrice de rigidité contenant les composantes contravariantes du tenseur $\underline{\underline{\underline{\mathcal{H}}}}$ dans la base $(\underline{A}_\alpha)_{\alpha \in \{1, 2\}}$, on pose :

$$[H^{****}] = \begin{bmatrix} \mathcal{H}^{1111} & \mathcal{H}^{1122} & \mathcal{H}^{1112} \\ \mathcal{H}^{2211} & \mathcal{H}^{2222} & \mathcal{H}^{2212} \\ \mathcal{H}^{1211} & \mathcal{H}^{1222} & \mathcal{H}^{1212} \end{bmatrix}, \quad (4.10)$$

1. dans une base $(\underline{A}_\alpha)_{\alpha \in \{1, 2\}}$ orthonormée, $A^{\alpha\gamma} = \delta_\alpha^\gamma$ avec δ le symbole de Kronecker.

2. Par ailleurs, l'approximation $\underline{e} \simeq \underline{\nabla}_0^{sym} \underline{u}$ n'est valable, elle, que si les déplacements \underline{u} sont petits, avec $\underline{\nabla}_0^{sym} \underline{u}$ la partie symétrique du gradient de \underline{u} sur la configuration de référence.

qui est une matrice symétrique, dû à la grande symétrie du tenseur $\underline{\underline{H}}$. Alors, on peut réécrire l'équation (4.8) sous la forme :

$$\phi_e(\underline{e}) = \frac{1}{2} [e_{**}]^T [H^{****}] [e_{**}]. \quad (4.11)$$

Dans une base orthonormée, comme les bases duales $(\underline{A}_\alpha)_{\alpha \in \{1,2\}}$ et $(\underline{A}^\alpha)_{\alpha \in \{1,2\}}$ sont confondues, alors les composantes de variances différentes mais de mêmes indices sont égales. On note alors simplement $[e]$ la matrice des composantes de \underline{e} et $[H]$ la matrice des composantes de $\underline{\underline{H}}$. La matrice $[H]$ est donnée par :

$$[H] = \begin{bmatrix} A + B & B & 0 \\ B & A + B & 0 \\ 0 & 0 & A \end{bmatrix}. \quad (4.12)$$

Les conditions de stabilité de l'état d'équilibre naturel sont données par :

$$\begin{cases} A > 0 \\ A + B > 0. \end{cases} \quad (4.13)$$

Exemple : Loi de Hooke généralisée

Dans la loi de Hooke généralisée, l'expression du potentiel de Hooke en petites déformations est étendue aux grandes déformations. Sous sa forme bidimensionnelle, le potentiel hyperélastique est donné par :

$$\phi_e^H(\underline{e}) = \mu_s \text{tr}(\underline{e}^2) + \frac{\lambda_s}{2} \text{tr}(\underline{e})^2, \quad (4.14)$$

où μ_s et λ_s sont les coefficients de Lamé surfaciques. Par rapport aux coefficients de Lamé 3D notés μ et λ , on a les relations suivantes :

$$\begin{cases} \mu_s = \vartheta_0 \mu \\ \lambda_s = \vartheta_0 \frac{2\lambda\mu}{\lambda + 2\mu}, \end{cases} \quad (4.15)$$

où ϑ_0 désigne l'épaisseur de la membrane dans la configuration de référence. On peut réécrire l'expression du potentiel ϕ_e^H (eq. (4.14)) en fonction des invariants surfaciques

définis dans l'équation (3.2) :

$$\phi_e^H(\underline{e}) = \frac{\mu_s}{4} \left(2I_1 - 2I_2 + \frac{1}{1 - \nu_s} I_1^2 \right), \quad (4.16)$$

où ν_s désigne le coefficient de Poisson surfacique donné par :

$$\nu_s = \frac{\lambda_s}{\lambda_s + 2\mu_s}. \quad (4.17)$$

En calculant les modules élastiques A et B à partir de l'équation (4.7), on obtient $A = 2\mu_s$ et $B = \lambda_s$. Ainsi, pour les petites déformations, on retrouve bien la matrice de rigidité classique :

$$[H^H] = \begin{bmatrix} \lambda_s + 2\mu_s & \lambda_s & 0 \\ \lambda_s & \lambda_s + 2\mu_s & 0 \\ 0 & 0 & 2\mu_s \end{bmatrix}. \quad (4.18)$$

4.2 Modèles d'endommagements en petites déformations

Dans cette partie, on établit l'expression du modèle d'endommagement de ce chapitre (modèle d'endommagement anisotrope) en petites déformations. Pour comparer ce modèle à celui du chapitre précédent, on commence par établir l'expression du modèle d'endommagement du chapitre 2 en petites déformations.

4.2.1 Modèle d'endommagement isotrope

Dans le modèle d'endommagement du chapitre 2, l'énergie libre est donnée par l'expression :

$$\phi^{iso} = (1 - d)\phi_e, \quad (4.19)$$

où l'on va considérer ici le cas général où ϕ_e est un potentiel hyperélastique quelconque, pas nécessairement néo-Hookéen. À partir de l'équation (4.11), l'expression de ϕ^{iso} en petites déformations est donnée par :

$$\phi^{iso} = (1 - d) \frac{1}{2} [e]^T [H] [e]. \quad (4.20)$$

D'après les lois d'états, le taux de restitution d'énergie est donné par :

$$Y^{iso} = \frac{1}{2} [e]^T [H] [e]. \quad (4.21)$$

Dans le chapitre 2, la fonction seuil d'endommagement f , ici notée f^{iso} , est donnée par :

$$f^{iso} = Y^{iso} - \kappa(d). \quad (4.22)$$

Lorsque l'endommagement évolue, on a :

$$f^{iso} = Y^{iso} - \kappa(d) = 0, \quad (4.23)$$

qui correspond à l'équation de la "surface" de charge⁽³⁾ \mathcal{F}^{iso} . En représentant \mathcal{F}^{iso} dans le plan des allongements principaux $(\lambda_I, \lambda_{II})$, avec $\lambda_I \simeq e_I + 1$ et $\lambda_{II} \simeq e_{II} + 1$ car les déformations principales e_I et e_{II} sont supposées petites, on peut analyser la sensibilité du modèle d'endommagement à différents chargements. On se place donc dans la base principale en prenant $[e]^T = [e_I, e_{II}, 0]$ dans l'équation (4.21), on a alors :

$$Y^{iso} = \frac{1}{2}(A + B)(e_I^2 + e_{II}^2) + Be_I e_{II}, \quad (4.24)$$

où les conditions de stabilité (cf. eq. (4.13)) imposent $B/A > -1$. Ainsi, dans le plan $(\lambda_I, \lambda_{II})$, la surface de charge $\mathcal{F}^{iso} : f^{iso} = 0$ est une ellipse dont l'un des demi-axes de longueur $\sqrt{2\kappa(d)/(A + 2B)}$ est aligné avec la droite d'équation $\lambda_I = \lambda_{II}$ correspondant à l'ensemble des points en extension équi-biaxial, et le second demi-axe est de longueur $\sqrt{2\kappa(d)/A}$ (Figure 4.1). Le rapport des longueurs des demi-axes étant seulement dépendant du rapport B/A (paramètres matériaux élastiques), les paramètres d'endommagement n'influent donc pas sur la forme de la surface de charge mais seulement sur sa taille. Lorsque l'endommagement évolue, la taille de l'ellipse augmente (phénomène d'écroutissage). Nous comparerons ces surfaces de charge à celle obtenue dans le cas du modèle d'endommagement anisotrope.

4.2.2 Modèle d'endommagement sensible aux dilatations surfaciques (modèle d'endommagement anisotrope)

Pour établir l'expression d'un modèle d'endommagement qui, en petites déformations, soit sensible aux dilatations surfaciques, on réécrit l'expression de ϕ_e donnée dans

3. Le concept de surface de charge est classiquement employé pour représenter les critères d'endommagement et de rupture dans l'espace des contraintes ou des déformations (3D), et permet d'identifier les propriétés d'un critère. Nous avons mis le terme surface entre guillemets car, dans notre cas, il n'y a que deux composantes des déformations qui sont indépendantes, et la contrainte normale à la surface moyenne est nulle. Ainsi, \mathcal{F}^{iso} est en fait une courbe dans l'espace des déformations et des contraintes.

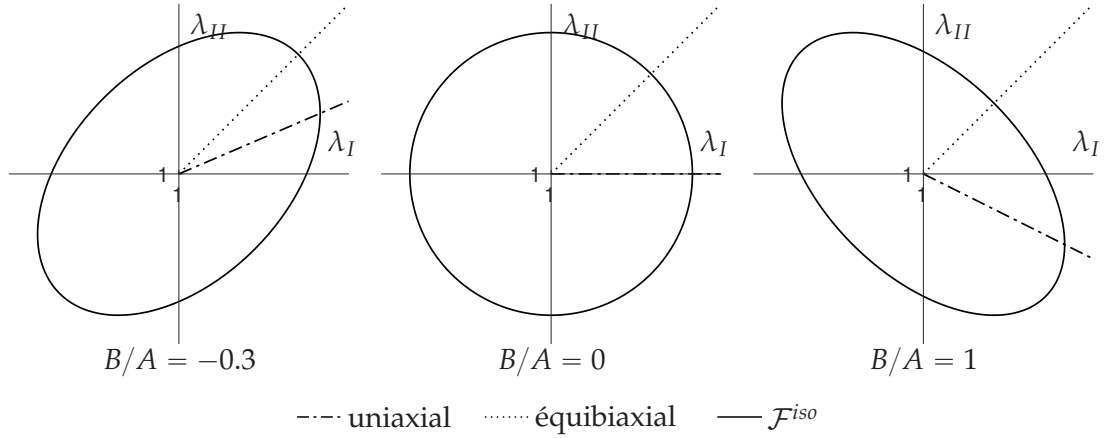


Figure 4.1 – Surface de charge \mathcal{F}^{iso} : $f^{iso} = 0$ représentée dans le plan des allongements principaux $(\lambda_I, \lambda_{II})$ dans le cas des petites déformations, pour trois valeurs du rapport B/A , et pour une valeur donnée de $\kappa(d)$. La courbe en trait pointillé représente le chemin suivi pour une déformation équi-biaxiale, et le trait interrompu celui suivi dans le cas d'un état de tension uniaxiale où la direction de la tension principale maximum est alignée avec la direction de l'allongement λ_I .

l'équation (4.8) sous une forme classique :

$$\begin{aligned}
 \phi_e(\underline{e}) &= \frac{1}{2} \underline{e} : \underline{\mathcal{H}} : \underline{e} \\
 &= \frac{1}{2} \left(\underline{e}^D + \frac{1}{2} tr(\underline{e}) \underline{1}_s^0 \right) : \underline{\mathcal{H}} : \left(\underline{e}^D + \frac{1}{2} tr(\underline{e}) \underline{1}_s^0 \right) \\
 &= \frac{1}{2} \left(\frac{1}{4} tr(\underline{e})^2 \mathcal{H}^{\alpha\alpha\beta\beta} \right) + \frac{1}{2} \underline{e}^D : \underline{\mathcal{H}} : \underline{e}^D \quad (\text{somme indices répétés}) \\
 &= \frac{K_s}{2} tr(\underline{e})^2 + \frac{1}{2} \underline{e}^D : \underline{\mathcal{H}} : \underline{e}^D,
 \end{aligned} \tag{4.25}$$

où $tr(\underline{e})$ désigne la trace de \underline{e} , le tenseur \underline{e}^D est la partie déviatorique (trace nulle) de \underline{e} , on désigne par $\underline{1}_s^0$ le tenseur identité dans le plan tangent sur la configuration de référence, et K_s est le module de dilatation surfacique, qui est donné par :

$$K_s = \frac{1}{2} (A + 2B). \tag{4.26}$$

En effet, si on désigne par p_s la composante sphérique des tensions \underline{T} (ie. $p_s = 1/2 tr(\underline{T})$), on obtient :

$$\begin{aligned}
 p_s &= K_s tr(\underline{e}) \\
 &= K_s \frac{dS}{S},
 \end{aligned} \tag{4.27}$$

où dS/S désigne le taux de dilatation surfacique local, ce qui justifie bien la désignation de module de dilatation surfacique pour K_s . À partir de la décomposition obtenue dans l'équation (4.25), on s'intéresse donc désormais naturellement à une énergie libre de la forme :

$$\phi^{K_s}(\underline{e}) = (1-d)\frac{K_s}{2}tr(\underline{e})^2 + \frac{1}{2}\underline{e}^D : \underline{\underline{H}} : \underline{e}^D. \quad (4.28)$$

Le taux de restitution d'énergie est alors donné par :

$$Y^{K_s} = \frac{K_s}{2}tr(\underline{e})^2. \quad (4.29)$$

On considère par ailleurs qu'on conserve toujours une fonction seuil d'endommagement f^{K_s} de la forme :

$$f^{K_s} = Y^{K_s} - \kappa(d). \quad (4.30)$$

D'après l'équation (4.29), la fonction f^{K_s} dépend uniquement du scalaire $tr(\underline{e})$ qui correspond au taux de dilatation surfacique (cf. eq. (4.27)). On obtient alors un modèle d'endommagement sensible uniquement aux dilatations surfaciques.

En se plaçant dans la base principale des déformations on a :

$$Y^{K_s} = \frac{K_s}{2}(e_I + e_{II})^2. \quad (4.31)$$

Dans le plan (e_I, e_{II}) , la surface de charge $\mathcal{F}^{K_s} : f^{K_s} = Y^{K_s} - \kappa(d) = 0$ correspond alors à l'union de deux droites $\mathcal{D}_{\pm}^{K_s}$ d'équations :

$$\mathcal{D}_{\pm}^{K_s} : e_{II} = -e_I \pm \sqrt{\frac{2\kappa(d)}{K_s}}, \quad (4.32)$$

et le domaine d'admissibilité ($f^{K_s} \leq 0$) est contenu entre les deux droites $\mathcal{D}_{\pm}^{K_s}$ (Figure 4.2). Les paramètres d'endommagement n'ont d'influence que sur les ordonnées à l'origine des deux droites. Lorsque l'endommagement évolue, les deux droites s'écartent l'une de l'autre.

En comparant les surfaces de charge \mathcal{F}^{iso} et \mathcal{F}^{K_s} (Figures 4.1 et 4.2, respectivement), il est intéressant de voir que, pour une même valeur de la variable d'endommagement d , la courbe \mathcal{F}^{iso} est inscrite dans \mathcal{F}^{K_s} , et que les deux courbes sont tangentes au point où elles sont coupées par la courbe de chargement équi-biaxial. Ainsi, si on considère deux membranes, l'une avec le potentiel ϕ^{iso} et l'autre avec le potentiel ϕ^{K_s} , et qu'on

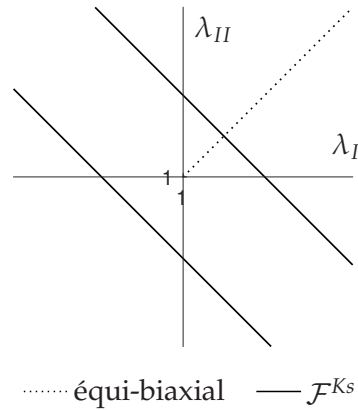


Figure 4.2 – Surface de charge \mathcal{F}^{Ks} : $f^{Ks} = 0$ dans le plan des allongements principaux $(\lambda_I, \lambda_{II})$ dans le cas des petites déformations. La courbe en trait pointillé représente le chemin suivi pour une déformation équi-biaxiale. La courbe de tension uniaxiale n'est pas représentée, mais cette courbe est la même que dans la Figure 4.1, et en particulier elle dépend du rapport B/A .

considère qu'elles sont dans le même état d'endommagement, alors si on impose le même chargement⁽⁴⁾ aux deux membranes, autre que le chargement équi-biaxial, alors, la membrane pour laquelle l'énergie libre correspond à ϕ^{iso} s'endommagera en premier car, dans l'espace $(\lambda_I, \lambda_{II})$, on va d'abord atteindre la surface de charge \mathcal{F}^{iso} , et on a alors $f^{iso} = 0$, qui est le critère d'endommagement pour la membrane ayant l'énergie libre ϕ^{iso} . C'est en particulier vrai lorsque les membranes ne sont pas encore endommagées (où $\kappa(d) = Y_D$).

5 Modèle d'endommagement sensible aux dilatations surfaciques en grandes déformations

Dans cette partie, on cherche à déterminer le modèle d'endommagement sensible aux dilatations surfaciques en grandes déformations.

Comme il l'a été détaillé dans la section 3, à partir d'un potentiel hyperélastique donné sous la forme :

$$\phi_e = \sum_i \phi_{e,i}(I_1, I_2), \quad (5.1)$$

4. On entend par chargement le fait d'imposer une certaine évolution aux allongements λ_I et λ_{II} , qui correspond alors à une courbe (le "trajet") dans l'espace $(\lambda_I, \lambda_{II})$.

on cherche à déterminer les conditions sur les coefficients $(a_i)_i$ telles que le potentiel :

$$\phi = (1 - d) \sum_i (1 - a_i) \phi_{e,i} + \sum_i a_i \phi_{e,i} \quad (5.2)$$

conduise à un modèle d'endommagement sensible aux dilatations surfaciques en grandes déformations.

Pour cela, on postule que si le potentiel ϕ permet de rendre le modèle d'endommagement sensible aux dilatations surfaciques en petites déformations, alors il est probable qu'il le soit aussi en grandes déformations. On propose donc que les valeurs des coefficients $(a_i)_i$ découlent du raccordement du développement de ϕ à l'ordre 2 avec le potentiel ϕ^{Ks} établi en petites déformations (cf. eq. (4.28)).

5.1 Méthode

On pose

$$\begin{cases} \phi_e^a = \sum_i (1 - a_i) \phi_{e,i} \\ \phi_e^b = \sum_i a_i \phi_{e,i}. \end{cases} \quad (5.3)$$

À endommagement fixé, à l'ordre 2 autour de l'état d'équilibre naturel ($\lambda_I = 1, \lambda_{II} = 1$), le potentiel ϕ (eq. (5.2)) s'écrit :

$$\begin{aligned} \phi = (1 - d) \phi_e^a(\underline{\underline{0}}) + \phi_e^b(\underline{\underline{0}}) + \left((1 - d) \frac{\partial \phi_e^a}{\partial \underline{\underline{e}}} \Big|_0 + \frac{\partial \phi_e^b}{\partial \underline{\underline{e}}} \Big|_0 \right) : \underline{\underline{e}} \\ + \frac{1}{2} \underline{\underline{e}} : \left((1 - d) \frac{\partial^2 \phi_e^a}{\partial \underline{\underline{e}}^2} \Big|_0 + \frac{\partial^2 \phi_e^b}{\partial \underline{\underline{e}}^2} \Big|_0 \right) : \underline{\underline{e}} + o(\|\underline{\underline{e}}\|^2), \end{aligned} \quad (5.4)$$

En petites déformations, pour que ϕ soit égal à ϕ^{Ks} (cf. eq. (4.28)) quelle que soit la valeur de l'endommagement, il faut tout d'abord que les termes d'ordre 0 et d'ordre 1 de ϕ_e^a et ϕ_e^b soient nuls. Par ailleurs, comme ϕ_e vérifie les équations (4.3) et (4.4), alors d'après l'équation (5.1) on a :

$$\begin{cases} \sum_i \phi_{e,i}(\underline{\underline{0}}) = 0 \\ \sum_i \left(\frac{\partial \phi_{e,i}}{\partial I_1} \Big|_0 + \frac{\partial \phi_{e,i}}{\partial I_2} \Big|_0 \right) = 0. \end{cases} \quad (5.5)$$

Ainsi, d'après les équations (5.5) et (5.3), comme les termes d'ordre 0 et d'ordre 1 des développements de ϕ_e^a et ϕ_e^b dans l'équation (5.4) sont nuls, on obtient alors les premières conditions suivantes sur les valeurs que peuvent prendre les coefficients $(a_i)_i$:

$$\begin{cases} \sum_i a_i \phi_{e,i}(\underline{\underline{0}}) = 0 \\ \sum_i a_i \left(\left. \frac{\partial \phi_{e,i}}{\partial I_1} \right|_0 + \left. \frac{\partial \phi_{e,i}}{\partial I_2} \right|_0 \right) = 0. \end{cases} \quad (5.6)$$

Ensuite, si on regarde $\phi^{(2)}$, le terme d'ordre 2 de ϕ (éq. (5.4)), on peut l'exprimer par :

$$\phi^{(2)} = \frac{(1-d)K_s^a + K_s^b}{2} tr(\underline{\underline{e}})^2 + \frac{1}{2} \underline{\underline{e}}^D : \left((1-d) \underline{\underline{\mathcal{H}}}^a + \underline{\underline{\mathcal{H}}}^b \right) : \underline{\underline{e}}^D, \quad (5.7)$$

où on a utilisé la décomposition (cf. eq. (4.25)) :

$$\begin{cases} \frac{1}{2} \underline{\underline{e}} : \left. \frac{\partial^2 \phi_e^a}{\partial \underline{\underline{e}}^2} \right|_0 : \underline{\underline{e}} = \frac{K_s^a}{2} tr(\underline{\underline{e}})^2 + \frac{1}{2} \underline{\underline{e}}^D : \underline{\underline{\mathcal{H}}}^a : \underline{\underline{e}}^D \\ \frac{1}{2} \underline{\underline{e}} : \left. \frac{\partial^2 \phi_e^b}{\partial \underline{\underline{e}}^2} \right|_0 : \underline{\underline{e}} = \frac{K_s^b}{2} tr(\underline{\underline{e}})^2 + \frac{1}{2} \underline{\underline{e}}^D : \underline{\underline{\mathcal{H}}}^b : \underline{\underline{e}}^D. \end{cases} \quad (5.8)$$

Ainsi, au second ordre autour de l'état d'équilibre naturel ($\lambda_I = 1, \lambda_{II} = 1$), le potentiel ϕ est égal à ϕ^{K_s} si :

$$\begin{cases} K_s^b = 0 \\ \underline{\underline{e}}^D : \underline{\underline{\mathcal{H}}}^a : \underline{\underline{e}}^D = 0. \end{cases} \quad (5.9)$$

En notant (A^a, B^a) et (A^b, B^b) les coefficients (A, B) (cf. eq. (4.7)) calculés pour ϕ_e^a et ϕ_e^b , respectivement, l'équation (5.9) est alors équivalente à :

$$\begin{cases} A^b + 2B^b = 0 \\ A^a = 0. \end{cases} \quad (5.10)$$

En considérant les équations (5.10) et (4.7), alors, par linéarité dans l'équation (4.7), on en déduit des conditions (qui s'ajoutent à celles établies dans l'éq. (5.6)) sur les coefficients

$(a_i)_i$:

$$\begin{cases} \sum_i a_i(A_i + 2B_i) = 0 \\ \sum_i (1 - a_i)A_i = 0, \end{cases} \quad (5.11)$$

où (A_i, B_i) désignent les coefficients (A, B) (cf. eq. (4.7)) calculés pour $\phi_{e,i}$.

5.2 Applications

Pour différents potentiels hyperélastiques ϕ_e donnés sous la forme eq. (5.1), on détermine le potentiel ϕ donné dans l'équation (5.2) à partir des conditions (5.6) et (5.11).

5.2.1 Loi de Hooke généralisée

Le potentiel hyperélastique ϕ_e est donné par :

$$\phi_e^H = \frac{G_s^H}{4} \left(2I_1 - 2I_2 + \frac{1}{1 - \nu_s} I_1^2 \right), \quad (5.12)$$

où G_s^H est le module de cisaillement surfacique et ν_s est le coefficient de Poisson surfacique ($-1 < \nu_s < 1$). En prenant chacun des trois termes de l'équation (5.12) pour les fonctions $(\phi_{e,i})_i$ définies dans l'équation (5.1), on a :

$$\begin{cases} \phi_{e,1} = \frac{G_s^H}{4} (2I_1) \\ \phi_{e,2} = \frac{G_s^H}{4} (-2I_2) \\ \phi_{e,3} = \frac{G_s^H}{4} \left(\frac{1}{1 - \nu_s} I_1^2 \right), \end{cases} \quad (5.13)$$

les conditions (5.6) et (5.11) donnent :

$$\begin{cases} a_1 = 1 \\ a_2 = 1 \\ a_3 = \frac{1 - \nu_s}{2}. \end{cases} \quad (5.14)$$

On en déduit alors l'expression de ϕ :

$$\phi^H = (1 - d) \left[\frac{G_s^H}{4} \left(\frac{1 + \nu_s}{1 - \nu_s} \frac{I_1^2}{2} \right) \right] + \left[\frac{G_s^H}{4} \left(2I_1 - 2I_2 + \frac{I_1^2}{2} \right) \right]. \quad (5.15)$$

Le taux de restitution d'énergie est alors donné par :

$$\Upsilon^H = \frac{G_s^H}{4} \left(\frac{1 + \nu_s}{1 - \nu_s} \frac{I_1^2}{2} \right). \quad (5.16)$$

Pour des valeurs suffisamment petites de $\kappa(d)/G_s^H$, la surface de charge $\mathcal{F}^H : f^H = \Upsilon^H - \kappa(d) = 0$ dans le domaine des petites déformations est représentée dans la Figure 5.1a. On obtient la surface de charge \mathcal{F}^{Ks} du modèle développé en petites déformations (Fig. 4.2). Pour de plus grandes déformations, la surface de charge \mathcal{F}^H apparaît comme l'union de deux arcs de cercle (Fig. 5.1b). En changeant la valeur de $\kappa(d)/G_s^H$ on fait varier la taille du domaine d'admissibilité (le domaine correspondant à $f^H \leq 0$) sans en changer la forme (Fig. 5.1c).

Remarque :

D'après la définition du module de dilatation surfacique donnée par l'équation (4.26), on a :

$$K_s^H = G_s^H \frac{1 + \nu_s}{1 - \nu_s}, \quad (5.17)$$

qui est bien en facteur du terme où $(1 - d)$ est en facteur (condition nécessaire du raccordement en petites déformations).

Remarque :

Pour une valeur de $\kappa(d)/G_s^H$ donnée, le coefficient de Poisson ν_s n'a pas d'influence sur la forme de la surface de charge \mathcal{F}^H mais seulement sur sa taille.

5.2.2 Loi de Skalak

On considère ici le potentiel hyperélastique qui a été proposé par Skalak *et al.* (1973) pour modéliser le comportement hyperélastique de la membrane des globules rouges. Le potentiel hyperélastique ϕ_e est dans ce cas donné par :

$$\phi_e^{Sk} = \frac{G_s^{Sk}}{4} (I_1^2 + 2I_1 - 2I_2 + CI_2^2), \quad C > -1/2, \quad (5.18)$$

où G_s^{Sk} est le module de cisaillement surfacique et C est un paramètre matériau qui, multiplié par G_s^{Sk} , s'apparente à un module de dilatation surfacique (on s'y intéresse plus bas). En prenant chacun des quatre termes de eq. (5.18) pour les fonctions $(\phi_{e,i})_i$

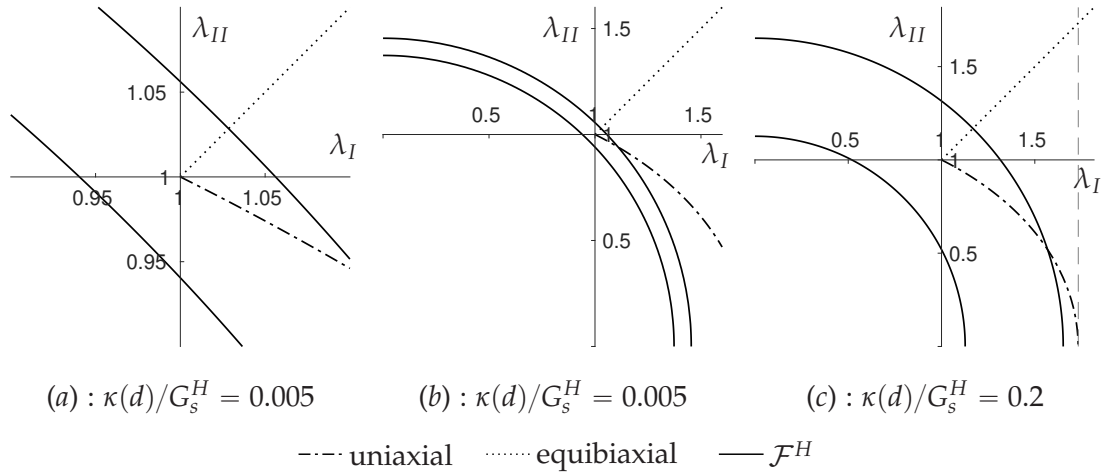


Figure 5.1 – Surface de charge \mathcal{F}^H : $f^H = Y^H - \kappa(d) = 0$ dans le plan des allongements principaux $(\lambda_I, \lambda_{II})$. La courbe en trait pointillé représente le chemin suivi pour une déformation équibiaxiale, et le trait interrompu celui suivi dans le cas d'un état de tension uniaxial où la direction de la tension principale maximum est alignée avec la direction de l'allongement λ_I et dans le cas où $d = 0$. Calculé pour $\nu_s = 0.5$.

définies dans eq. (5.1) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \phi_{e,1} = \frac{G_s^{Sk}}{4} (I_1^2) \\ \phi_{e,2} = \frac{G_s^{Sk}}{4} (2I_1) \\ \phi_{e,3} = \frac{G_s^{Sk}}{4} (-2I_2) \\ \phi_{e,4} = \frac{G_s^{Sk}}{4} (CI_2^2), \end{array} \right. \quad (5.19)$$

les conditions (5.6) et (5.11) donnent :

$$\left\{ \begin{array}{l} a_2 = 1 \\ a_3 = 1 \\ 2a_1 + 2Ca_4 = 1. \end{array} \right. \quad (5.20)$$

En choisissant $a_1 = 1$, on obtient alors une expression pour ϕ :

$$\phi^{Sk} = (1-d) \left[\frac{G_s^{Sk}}{4} \left((1+2C) \frac{I_2^2}{2} \right) \right] + \left[\frac{G_s^{Sk}}{4} \left(I_1^2 + 2I_1 - 2I_2 - \frac{I_2^2}{2} \right) \right]. \quad (5.21)$$

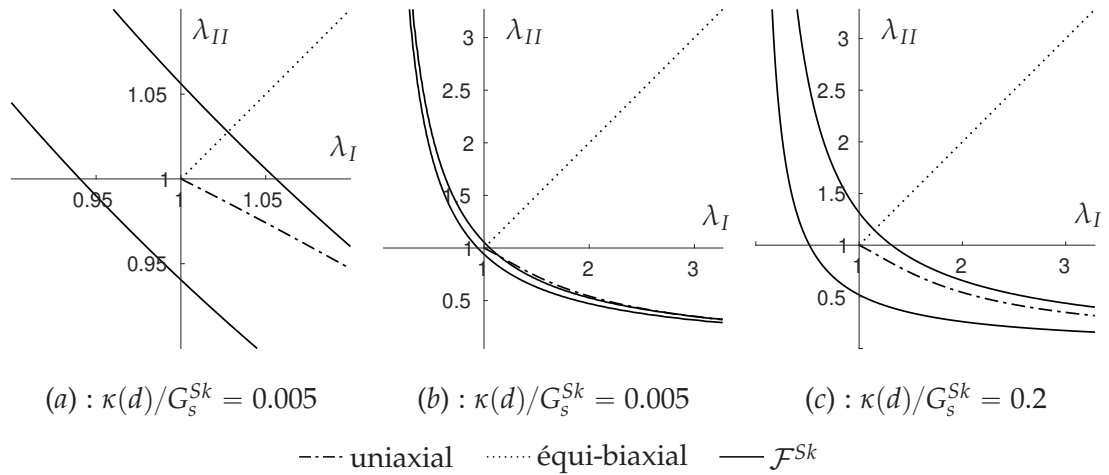


Figure 5.2 – Surface de charge \mathcal{F}^{Sk} : $f^{Sk} = \Upsilon^{Sk} - \kappa(d) = 0$ dans le plan des allongements principaux $(\lambda_I, \lambda_{II})$. La courbe en trait pointillé représente le chemin suivi pour une déformation équi-biaxiale, et le trait interrompu celui suivi dans le cas d'un état de tension uniaxial où la direction de la tension principale maximum est alignée avec la direction de l'allongement λ_I et dans le cas où $d = 0$. Calculé pour $C = 1$.

Le taux de restitution d'énergie est alors donné par :

$$\Upsilon^{Sk} = \frac{G_s^{Sk}}{4} \left((1 + 2C) \frac{I_2^2}{2} \right). \quad (5.22)$$

Pour des valeurs suffisamment petites de $\kappa(d)/G_s^{Sk}$, la surface de charge \mathcal{F}^{Sk} : $f^{Sk} = \Upsilon^{Sk} - \kappa(d) = 0$ est représentée dans le domaine des petites déformations sur la Figure 5.2a. On obtient la surface de charge \mathcal{F}^{Ks} du modèle développé en petites déformations (Fig. 4.2). Pour de plus grandes déformations, la surface de charge \mathcal{F}^{Sk} est montrée en Figure 5.2b. En changeant la valeur de $\kappa(d)/G_s^{Sk}$ on fait varier la taille et la forme du domaine d'admissibilité ($f^{Sk} \leq 0$) (Fig. 5.2c).

D'après la définition du module de dilatation surfacique donnée par l'équation (4.26), on a :

$$K_s^{Sk} = G_s^{Sk} (1 + 2C). \quad (5.23)$$

Le module de dilatation surfacique est donc directement lié au paramètre C . Plus la valeur de C augmente, plus la membrane résiste aux dilatations surfaciques et donc plus la membrane tend vers un comportement incompressible en surface. Pour les résultats qui seront présentés dans la partie 6, on peut considérer des valeurs typiques qui ont été utilisées pour C . Dans le cas du globule rouge, la présence d'une bi-couche lipidique dans la membrane la rend très résistante aux variations de surface, et les valeurs de C

identifiées sont très élevées, de l'ordre de 10^4 (Lenormand *et al.*, 2001; Dao *et al.*, 2003). Bien que la loi de Skalak *et al.* ait été à l'origine développée pour le globule rouge, il s'avère que cette loi permet de bien représenter le comportement de la membrane de certaines capsules. Ainsi, Carin *et al.* (2003) ont identifié que pour $C = 0$, la loi de Skalak permet de décrire correctement le comportement de capsules bioartificielles formées d'une membrane d'albumine réticulée. Dans la partie 6, nous allons considérer en particulier la valeur $C = 0$.

Remarque :

┌ Pour une valeur de $\kappa(d)/G_s^{Sk}$ donnée, le coefficient C a la même influence
└ que $\kappa(d)/G_s^{Sk}$ sur la taille et la forme de la surface de charge \mathcal{F}^{Sk} .

5.2.3 Loi de Mooney-Rivlin

Dans le cas de la loi de Mooney-Rivlin, le potentiel hyperélastique ϕ_e est donné par :

$$\phi_e^{MR} = \frac{G_s^{MR}}{2} \left[\psi \left(I_1 + \frac{1}{I_2 + 1} - 1 \right) + (1 - \psi) \left(\frac{I_1 + 2}{I_2 + 1} - 2 + I_2 \right) \right], \quad \psi \in [0, 1], \quad (5.24)$$

où G_s^{MR} est le module de cisaillement surfacique. Cette forme bidimensionnelle de la loi de Mooney-Rivlin est obtenue à partir de la forme 3D de la loi dans le cas où le matériau est considéré comme étant incompressible (en volume).

5.2.3.1 Cas $\psi = 1$ (néo-Hookéen)

On s'intéresse tout d'abord au cas $\psi = 1$ correspondant à un matériau néo-Hookéen. En prenant :

$$\begin{cases} \phi_{e,1} = \frac{G_s^{MR}}{2} (I_1) \\ \phi_{e,2} = \frac{G_s^{MR}}{2} \left(\frac{1}{I_2 + 1} - 1 \right), \end{cases} \quad (5.25)$$

les conditions (5.6) et (5.11) aboutissent à un système incompatible pour les coefficients $(a_i)_i$. Ainsi, d'après la méthode proposée, il n'est pas possible de définir, à partir du potentiel néo-Hookéen, un potentiel ϕ de la forme éq. (5.2) qui soit égal au potentiel ϕ^{Ks} (eq. (4.28)) en petites déformations.

5.2.3.2 Cas général

On s'intéresse au potentiel ϕ_e^{MR} de eq. (5.24) pour toutes valeurs de ψ . En prenant chacun des quatre termes de eq. (5.24) pour les fonctions $(\phi_{e,i})_i$ définies dans eq. (5.1), on

obtient :

$$\begin{cases} \phi_{e,1} = \psi \frac{G_s^{MR}}{4} (I_1) \\ \phi_{e,2} = \psi \frac{G_s^{MR}}{4} \left(\frac{1}{I_2 + 1} - 1 \right) \\ \phi_{e,3} = (1 - \psi) \frac{G_s^{MR}}{4} \left(\frac{I_1 + 2}{I_2 + 1} - 2 \right) \\ \phi_{e,4} = (1 - \psi) \frac{G_s^{MR}}{4} (I_2), \end{cases} \quad (5.26)$$

les conditions (5.6) et (5.11) donnent :

$$\begin{cases} -\psi a_2 - (1 - \psi)a_3 + (1 - \psi)a_4 = -\psi a_1 \\ -\psi a_2 - 2(1 - \psi)a_3 + (1 - \psi)a_4 = -1 \\ 3\psi a_2 + 2(1 - \psi)a_3 + (1 - \psi)a_4 = 0. \end{cases} \quad (5.27)$$

Le système est compatible uniquement pour $0 < \psi < 1$. En choisissant $a_1 = 1$, on obtient alors une expression pour ϕ :

$$\begin{aligned} \phi^{MR} = (1 - d) & \left[\frac{G_s^{MR}}{2} \left(\frac{3}{4} \left(\frac{1}{I_2 + 1} - 1 \right) + \frac{3}{4} I_2 \right) \right] + \\ & \left[\frac{G_s^{MR}}{2} \left(\psi I_1 + \left(\psi - \frac{3}{4} \right) \left(\frac{1}{I_2 + 1} - 1 \right) + (1 - \psi) \left(\frac{I_1 + 2}{I_2 + 1} - 2 \right) + \left(\frac{1}{4} - \psi \right) I_2 \right) \right]. \end{aligned} \quad (5.28)$$

Le taux de restitution d'énergie est alors donné par :

$$\gamma^{MR} = \frac{G_s^{MR}}{2} \left(\frac{3}{4} \left(\frac{1}{I_2 + 1} - 1 \right) + \frac{3}{4} I_2 \right). \quad (5.29)$$

Pour des valeurs suffisamment petites de $\kappa(d)/G_s^{MR}$, la surface de charge \mathcal{F}^{MR} : $f^{MR} = Y^{MR} - \kappa(d) = 0$ est représentée dans le domaine des petites déformations sur la Figure 5.3a. On retrouve la surface de charge \mathcal{F}^{Ks} du modèle développé en petites déformations (Fig. 4.2). Pour de plus grandes déformations, la surface de charge \mathcal{F}^{MR} est représentée en Figure 5.3b. En changeant la valeur de $\kappa(d)/G_s^{MR}$ on fait varier la taille et la forme du domaine d'admissibilité ($f^{MR} \leq 0$) (Fig. 5.3c).

La forme de la surface de charge \mathcal{F}^{MR} est semblable à \mathcal{F}^{Sk} (Fig. 5.2). Toutefois, si on considère les surfaces de charge dans le cas où $\kappa(d)/G_s = 0.2$ (Fig. 5.2c et 5.3c), on remarque que si on suit un trajet de chargement de tension uniaxiale (on suit la courbe en trait interrompu sur les deux graphes, depuis l'origine), on voit que, pour les

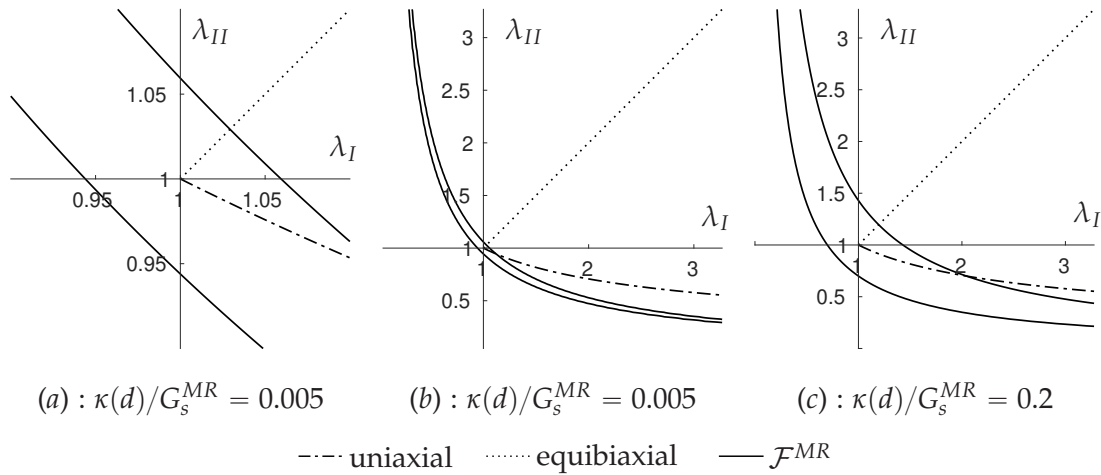


Figure 5.3 – Surface de charge \mathcal{F}^{MR} : $f^{MR} = \Upsilon^{MR} - \kappa(d) = 0$ dans le plan des allongements principaux $(\lambda_I, \lambda_{II})$. La courbe en trait pointillé représente le chemin suivi pour une déformation équibiaxiale, et le trait interrompu celui suivi dans le cas d'un état de tension uniaxial où la direction de la tension principale maximum est alignée avec la direction de l'allongement λ_I et dans le cas où $d = 0$. Calculé pour $\psi = 0.5$.

intervalles d'allongement $(\lambda_I, \lambda_{II})$ représentés, dans le cas de la loi de Skalak on reste à l'intérieur du domaine d'admissibilité ($f^{Sk} \leq 0$) et donc l'endommagement n'évolue pas, alors que dans le cas de la loi de Mooney-Rivlin, on atteint la surface de charge \mathcal{F}^{MR} : $f^{MR} = 0$, et donc l'endommagement va évoluer à partir du moment où on atteint ce point.

Remarque :

L'expression du taux de restitution d'énergie (eq. (5.29)) ne dépend pas de ψ .

5.2.4 Loi d'Evans-Skalak

On considère ici le potentiel hyperélastique qui a été proposé par Evans & Skalak (1980). Comme la loi de Skalak, c'est une loi qui avait été développée initialement pour modéliser le comportement hyperélastique de la membrane des globules rouges. Cette loi a été peu utilisée pour modéliser le comportement de la membrane des capsules artificielles, mais nous la considérons dans cette étude car elle avait été développée spécifiquement pour découpler les effets liés au cisaillement surfacique et à la dilatation surfacique.

Avec cette loi, le potentiel hyperélastique ϕ_e est donné par :

$$\phi_e^{ES} = G_s^{ES} \left(J_1 + A^{ES} \frac{J_2^2}{2} \right), \quad A^{ES} > 0, \quad (5.30)$$

où G_s^{ES} est le module de cisaillement surfacique, $G_s^{ES}A^{ES}$ correspond au module de dilatation surfacique (cf. définition eq. (4.26)), et J_1 et J_2 sont deux invariants donnés par :

$$\begin{cases} J_1 = \frac{\text{tr} \underline{\underline{C}}}{2\sqrt{\det \underline{\underline{C}}}} - 1 = \frac{I_1 + 2}{2\sqrt{I_2 + 1}} - 1, \\ J_2 = \sqrt{\det \underline{\underline{C}}} - 1 = \sqrt{I_2 + 1} - 1. \end{cases} \quad (5.31)$$

En prenant chacun des deux termes de eq. (5.30) pour les fonctions $(\phi_{e,i})_i$ définies dans eq. (5.1) :

$$\begin{cases} \phi_{e,1} = G_s^{ES} \left(\frac{I_1 + 2}{2\sqrt{I_2 + 1}} - 1 \right) \\ \phi_{e,2} = \frac{G_s^{ES} A^{ES}}{2} \left(\sqrt{I_2 + 1} - 1 \right)^2, \end{cases} \quad (5.32)$$

les conditions (5.6) et (5.11) donnent :

$$\begin{cases} a_1 = 1 \\ a_2 = 0. \end{cases} \quad (5.33)$$

On obtient alors pour l'expression de ϕ :

$$\phi^{ES} = (1 - d)G_s^{ES}A^{ES}\frac{J_2^2}{2} + G_s^{ES}J_1. \quad (5.34)$$

Le taux de restitution d'énergie est alors donné par :

$$\gamma^{ES} = G_s^{ES}A^{ES}\frac{J_2^2}{2}. \quad (5.35)$$

Pour des valeurs suffisamment petites de $\kappa(d)/G_s^{ES}$, la surface de charge \mathcal{F}^{ES} : $f^{ES} = \gamma^{ES} - \kappa(d) = 0$ est représentée dans le domaine des petites déformations sur la Figure 5.4a. On retrouve la surface de charge \mathcal{F}^{Ks} du modèle développé en petites déformations (Fig. 4.2). Pour de plus grandes déformations, la surface de charge \mathcal{F}^{ES} est représentée en Figure 5.4b. En changeant la valeur de $\kappa(d)/G_s^{MR}$ on fait varier la taille et la forme du domaine d'admissibilité ($f^{ES} \leq 0$) (Fig. 5.4c).

La forme de la surface de charge \mathcal{F}^{ES} est semblable à \mathcal{F}^{Sk} (Fig. 5.2). Toutefois, si comme dans la partie 5.2.3, on considère les surfaces de charge dans le cas où $\kappa(d)/G_s = 0.2$ (Fig. 5.2c et 5.4c), en suivant le trajet de chargement en tension uniaxiale pour les intervalles d'allongement $(\lambda_I, \lambda_{II})$ représentés, dans le cas de la loi d'Evans-Skalak, on

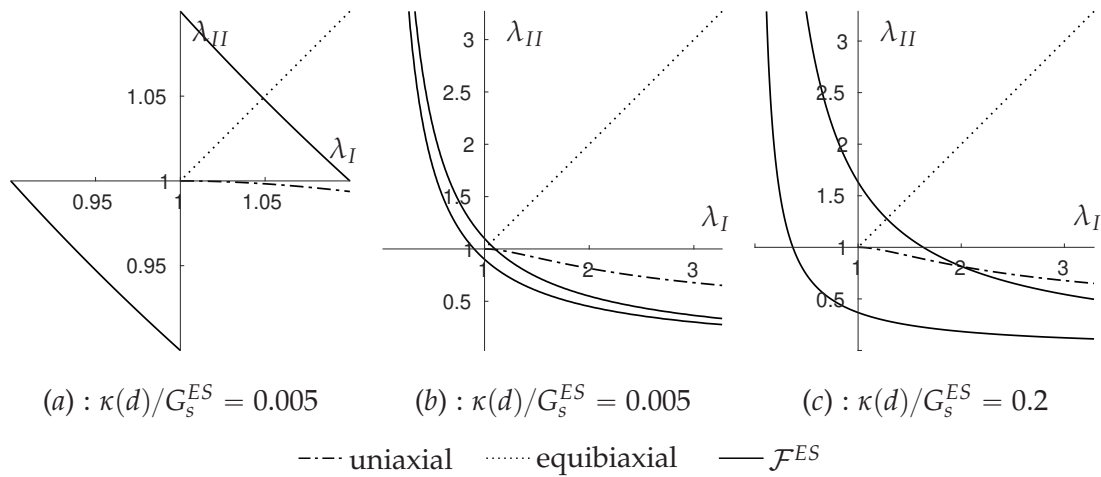


Figure 5.4 – Surface de charge \mathcal{F}^{ES} : $f^{ES} = \gamma^{ES} - \kappa(d) = 0$ dans le plan des allongements principaux $(\lambda_I, \lambda_{II})$. La courbe en trait pointillé représente le chemin suivi pour une déformation équibiaxiale, et le trait interrompu celui suivi dans le cas d'un état de tension uniaxial où la direction de la tension principale maximum est alignée avec la direction de l'allongement λ_I et dans le cas où $d = 0$. Calculé pour $A^{ES} = 1$.

atteint la surface de charge \mathcal{F}^{ES} : $f^{ES} = 0$, et donc l'endommagement va évoluer à partir du moment où on atteint ce point, alors qu'on a vu que l'endommagement n'évolue pas avec la loi de Skalak.

Remarque :

D'après la définition du module de dilatation surfacique donnée par l'équation (4.26), on a :

$$K_s^{ES} = G_s^{ES} A^{ES}, \quad (5.36)$$

qui est bien en facteur du terme où $(1 - d)$ est en facteur (condition nécessaire raccordement petites déformations).

Remarque :

Pour une valeur de $\kappa(d)/G_s^{ES}$ donnée, le coefficient A^{ES} a la même influence que $\kappa(d)/G_s^{ES}$ sur la taille et la forme de la surface de charge \mathcal{F}^{ES} .

6 Application au cas d'une capsule en écoulement de cisaillement simple

Dans cette partie, on présente une application du modèle d'endommagement au cas d'une capsule en écoulement de cisaillement simple. L'objectif est d'étudier le modèle dans les conditions pour lesquelles Chang & Olbricht (1993a) ont observé la rupture.

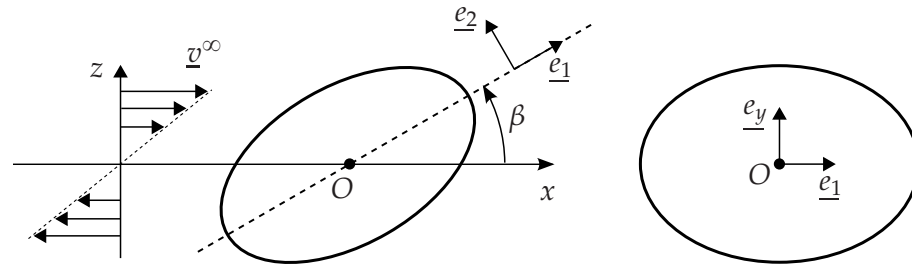


Figure 6.1 – Deux ellipses principales de l’ellipsoïde d’inertie de la capsule déformée dans l’écoulement de cisaillement simple.

6.1 Définition du problème

On applique le modèle d’endommagement développé dans ce chapitre au cas d’une capsule initialement sphérique en écoulement de cisaillement simple (Figure 6.1). Le problème d’interaction fluide-structure est le même que dans le chapitre précédent, et il est résolu selon la même méthode.

On étudie le comportement de la capsule pour la valeur du nombre capillaire $Ca = 0.3$ pour laquelle Chang et *al.* ont observé la rupture d’une capsule (il n’y a que deux capsules pour lesquelles on connaît à la fois la valeur du nombre capillaire et la valeur du paramètre de Taylor D_{12} lorsque s’initie la rupture, pour les autres capsules on ne connaît que la valeur du paramètre de Taylor). On considère aussi une valeur plus petite du nombre capillaire, $Ca = 0.05$.

Pour le comportement de la membrane, on va considérer les différents potentiels ϕ déterminés dans la section 5.2, c’est-à-dire les équations (5.15), (5.21), (5.28) et (5.34). Pour la loi de Skalak, nous allons considérer le cas $C = 0$. Le cas $C = 1$ donne des résultats semblables, mais pour $C = 0$, la valeur du paramètre de Taylor obtenue lorsqu’on se place à $Ca = 0.3$ coïncide mieux avec la valeur mesurée par Chang et *al.* pour la même valeur du nombre capillaire.

6.2 Résultats

De manière générale, comme dans le cas du chapitre 2, il existe un nombre capillaire critique Ca_c , qui ne dépend que de Y_D , à partir duquel la capsule s’endommage, et au-delà de cette valeur, la capsule atteint un état stationnaire. Si le nombre capillaire dépasse le nombre capillaire limite Ca_ℓ , qui dépend de Y_D et Y_C , la rupture s’initie ($d = 1$). Nous allons tout d’abord considérer le cas où les deux valeurs du nombre capillaire que nous avons choisies ($Ca = 0.05$, et $Ca = 0.3$) correspondent à des cas où la

capsule s'endommage sans se rompre, puis, pour la valeur $Ca = 0.3$, nous considérons le cas où la rupture s'initie.

6.2.1 Cas $Ca_c < Ca < Ca_\ell$

Dans cette partie, on considère des cas représentatifs du mode d'endommagement observé pour les différents potentiels ϕ .

Quel que soit le potentiel ϕ considéré, la capsule se déforme de la même manière que nous l'avons décrit dans le chapitre 2 : la capsule se déforme en prenant une forme ellipsoïdale et s'incline dans la direction de l'écoulement, jusqu'à atteindre l'état stationnaire où la forme et l'inclinaison de la capsule sont fixes, et la membrane est en rotation.

Les Figures 7.1 et 7.2 montrent l'état d'endommagement de la capsule pour les différents potentiels ϕ , et à deux instants, correspondant à un instant peu de temps après que l'endommagement se soit initié ($t = t_c^+$), et à un instant lorsque la capsule a atteint un état stationnaire ($t = t^\infty$).

Dans le cas où $Ca = 0.05$, lorsque le potentiel ϕ est associé aux lois de Hooke généralisé, de Mooney-Rivlin, et de Evans-Skalak, l'endommagement s'initie et se développe dans la région centrale de la capsule. Lorsque le potentiel ϕ est associé à la loi de Skalak, l'endommagement s'initie près des sommets du grand axe de la capsule, dans le plan de cisaillement, puis, à mesure que la membrane tourne, l'endommagement se développe à la fois dans la région de la membrane située dans le plan de cisaillement, et au niveau de la région centrale.

Dans le cas où $Ca = 0.3$, lorsque le potentiel ϕ est associé aux lois de Hooke généralisé, et de Skalak, l'endommagement s'initie typiquement au niveau des sommets du grand axe de la capsule, et il se développe ensuite préférentiellement dans la région de la membrane située dans le plan de cisaillement. Dans le cas où ϕ est associé à la loi de Mooney-Rivlin, l'endommagement s'initie presque en même temps au niveau des sommets du grand axe de la capsule, et dans la région centrale, puis avec la rotation de la membrane, l'endommagement se distribue de manière relativement uniforme sur l'ensemble de la membrane. Enfin, dans le cas où ϕ est associé à la loi d'Evans-Skalak, l'endommagement s'initie dans la zone centrale, puis, avec la rotation de la membrane, l'endommagement se développe sur l'ensemble de la capsule, mais reste plus important dans la région centrale.

Le modèle met donc en évidence essentiellement deux modes d'endommagement. Un premier mode où l'endommagement se développe préférentiellement dans la région centrale de la capsule, et un second mode où l'endommagement se développe préfé-

rentiellement dans le plan de cisaillement. En particulier, le cas où l’endommagement se développe préférentiellement dans le plan de cisaillement ne semble apparaître que pour des valeurs du nombre capillaire suffisamment importantes.

6.2.2 Cas $Ca > Ca_\ell$

On se place ici dans le cas où la rupture s’initie ($Ca > Ca_\ell$), et on s’intéresse uniquement au cas où $Ca = 0.3$. On présente des cas représentatifs de l’initiation de la rupture lorsque Ca_ℓ est proche de la valeur de Ca . En effet, dans leur expérience, Chang *et al.* imposent une évolution du nombre capillaire correspondant à une succession d’échelons avec des seuils croissants. Ainsi, d’après notre modèle, Ca_ℓ doit se trouver entre deux de ces valeurs successives de Ca , qui peuvent être proches.

Quel que soit le potentiel ϕ considéré, la rupture s’initie au cours de l’allongement de la capsule par l’écoulement. La Figure 7.3 représente l’état d’endommagement de la capsule à l’instant d’initiation de la rupture ($t = t_\ell$). On notera que la distribution de l’endommagement est symétrique par rapport aux deux plans selon lesquels est observée la capsule. Dans le cas où ϕ est associé aux lois de Hooke généralisé, de Skalak et de Mooney-Rivlin, la rupture s’initie près des deux sommets du grand axe de la capsule, dans le plan de cisaillement. Dans le cas où ϕ est associé à la loi d’Evans-Skalak, la rupture s’initie dans la zone centrale.

Avec la loi d’Evans-Skalak, la capsule a un comportement qui se distingue nettement des trois autres lois. En effet, la capsule est plus inclinée et plus étalée qu’avec les autres lois. On notera que c’est une loi qui a été rarement utilisée pour modéliser le comportement de la membrane des capsules.

L’endroit où s’initie la rupture dans le cas où ϕ est associé aux lois de Hooke généralisé, de Skalak, et de Mooney-Rivlin, est en bon accord avec les résultats de l’expérience de Chang *et al.*, où la rupture s’initie au niveau des sommets du grand axe de la capsule. Dans leur expérience, le paramètre de Taylor semble valoir $D_{12} = 0.4$ (la courbe d’évolution du paramètre de Taylor commence à diverger pour cette valeur là) lorsque la rupture s’initie pour la valeur du nombre capillaire considéré ici. Avec le modèle, au moment de l’initiation de la rupture, pour la loi de Hooke généralisé on a $D_{12} = 0.33$, pour la loi de Skalak $D_{12} = 0.39$, et pour la loi de Mooney-Rivlin $D_{12} = 0.43$ (pour la loi d’Evans-Skalak $D_{12} = 0.53$). Les lois de Skalak et de Mooney-Rivlin sont donc de manière générale en bon accord avec l’expérience pour prédire l’initiation de la rupture.

7 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons cherché à établir un critère d'endommagement qui permette d'expliquer le mode d'initiation de la rupture qu'ont spécifiquement observé Chang & Olbricht (1993a) pour des capsules en polyamide en écoulement de cisaillement simple.

Dans le cadre du modèle établi dans le chapitre 1, nous avons simplement adapté l'expression de la densité d'énergie libre. Nous proposons alors une méthode permettant de décomposer l'expression de l'énergie libre, telle que la densité d'énergie élastique (effective) restituée au cours de l'endommagement, qui est la force thermodynamique qui pilote l'endommagement, corresponde à une énergie qui ne dépende que de l'état de dilatation surfacique local.

Il est remarquable que ce modèle permette de prédire l'initiation de la rupture dans la région de la membrane où Chang & Olbricht (1993a) l'avaient observée, pour la plupart des lois hyperélastiques que nous avons considérées. En effet, il ne semble pas qu'il y ait sinon d'autre grandeur (tensions, déformations) définie dans le plan tangent de la membrane, qui permette d'expliquer l'initiation de la rupture dans cette zone.

Il serait intéressant d'utiliser ce critère d'endommagement dans le modèle de rupture que nous développons dans le chapitre 4 pour voir selon quel mode est prédit la rupture de la capsule.

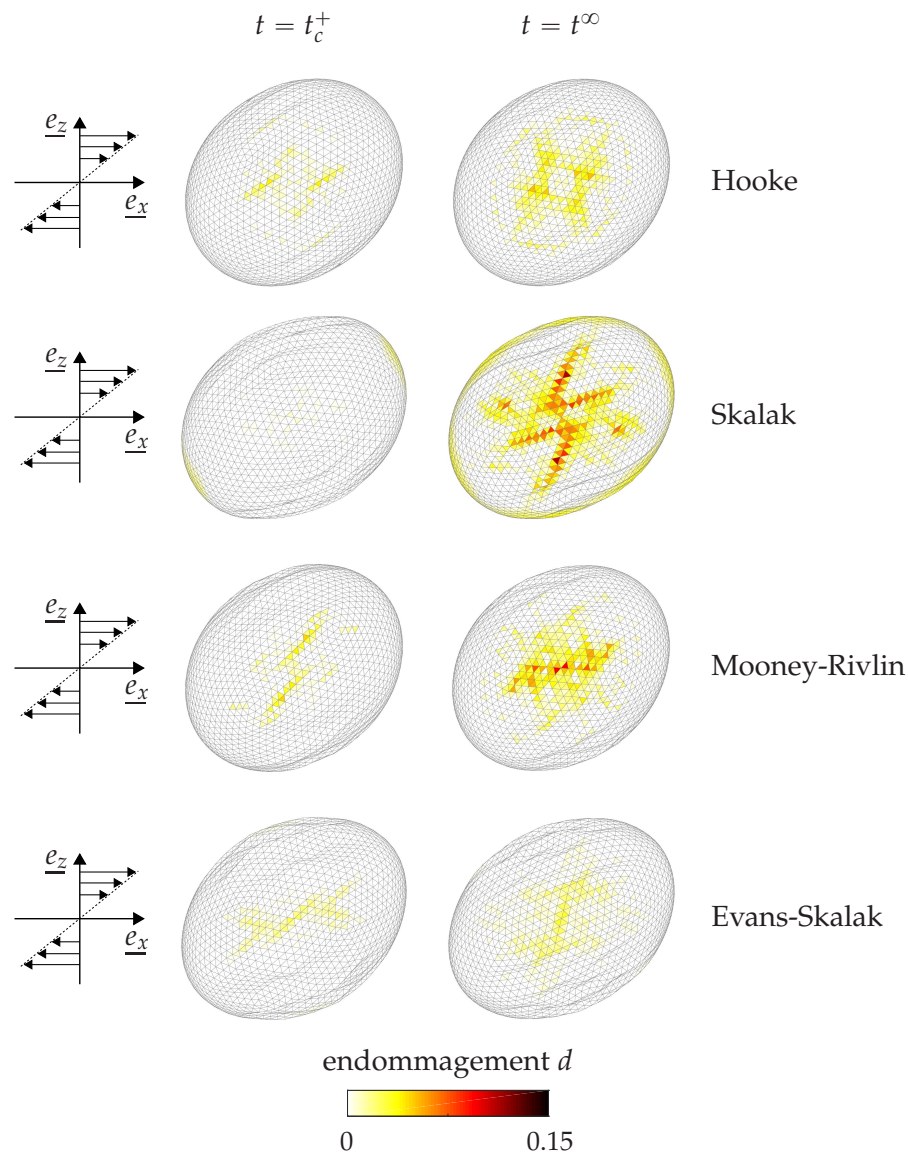


Figure 7.1 – Cartographie de l’endommagement à un instant peu de temps après l’initiation de l’endommagement t_c^+ , et à un instant lorsque la capsule a atteint un état stationnaire t^∞ . Les résultats sont obtenus pour $Ca = 0.05$. La capsule est représentée pour les lois de Hooke généralisé ($\nu_s = 0.5, Y_D = 0.002, Y_C = 0.02$), de Skalak ($C = 0, Y_D = 0.004, Y_C = 0.05$), de Mooney-Rivlin ($\psi = 0.5, Y_D = 0.0023, Y_C = 0.02$), et d’Evans-Skalak ($A^{ES} = 1, Y_D = 0.005, Y_C = 0.1$). La capsule est observée dans le plan de cisaillement ($\underline{e}_x, \underline{e}_z$). Le maillage contient 1280 éléments P2 (2562 noeuds). Toutes les images sont à la même échelle. Les valeurs de Y_D et Y_C qui sont données ici sont adimensionnées par G_s .

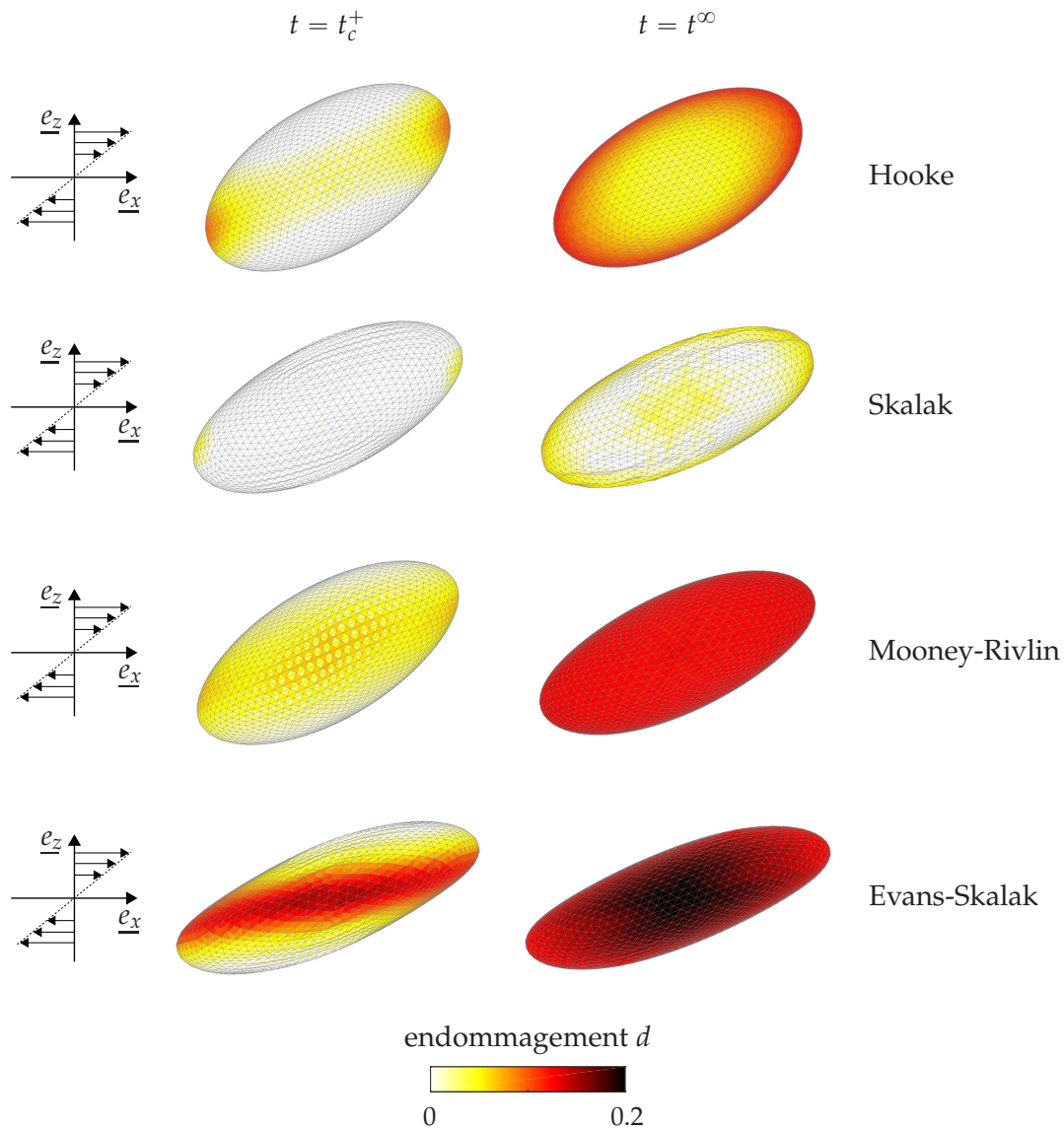


Figure 7.2 – Cartographie de l'endommagement à un instant peu de temps après l'initiation de l'endommagement t_c^+ , et à un instant lorsque la capsule a atteint un état stationnaire t^∞ . Les résultats sont obtenus pour $Ca = 0.3$. La capsule est représentée pour les lois de Hooke généralisé ($\nu_s = 0.5, Y_D = 0.01, Y_C = 0.3$), de Skalak ($C = 0, Y_D = 0.05, Y_C = 1$), de Mooney-Rivlin ($\psi = 0.5, Y_D = 0.0029, Y_C = 0.4$), et d'Evans-Skalak ($A^{ES} = 1, Y_D = 0.01, Y_C = 0.5$). La capsule est observée dans le plan de cisaillement $(\underline{e}_x, \underline{e}_z)$. Le maillage contient 1280 éléments P2 (2562 noeuds). Toutes les images sont à la même échelle. Les valeurs de Y_D et Y_C qui sont données ici sont adimensionnées par G_s .

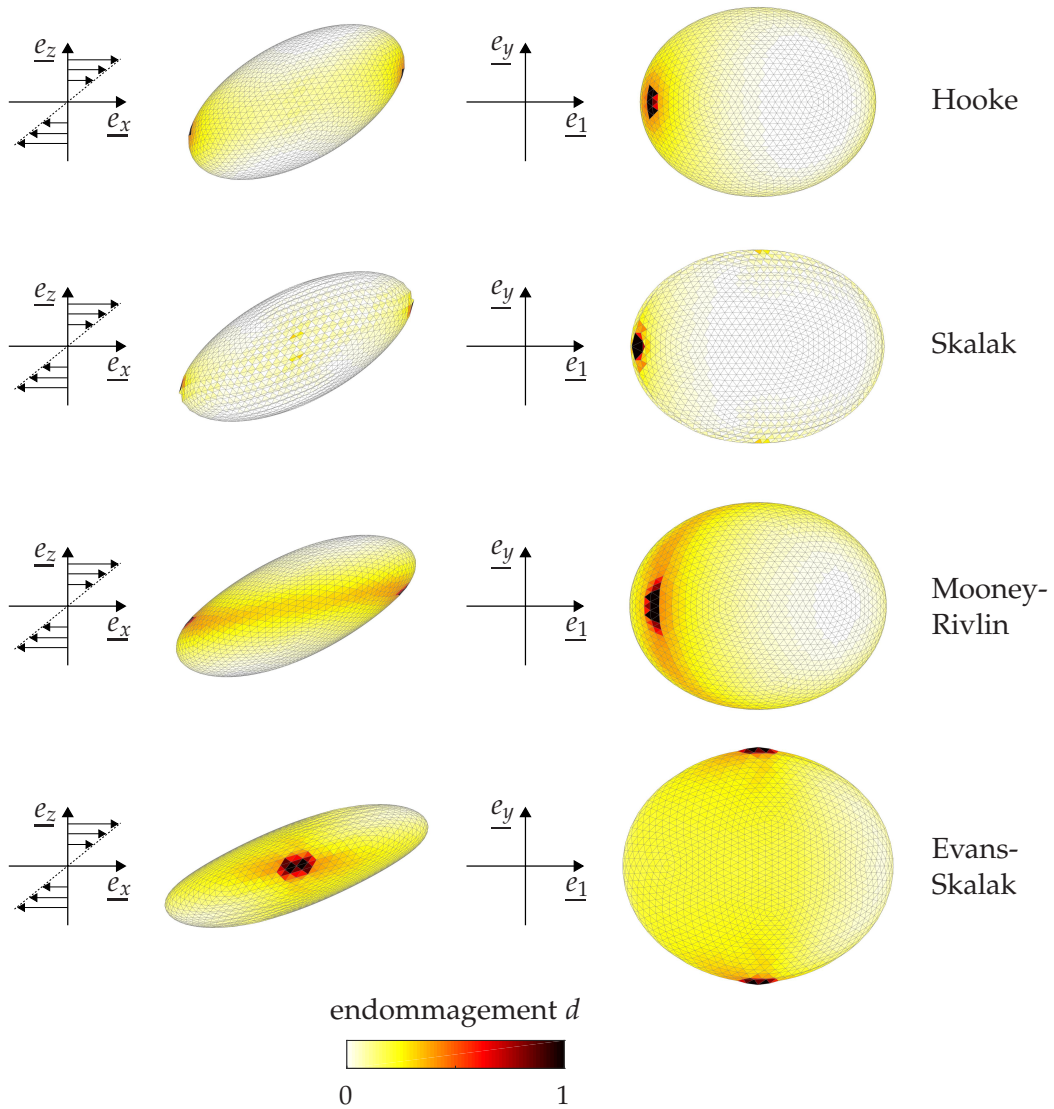


Figure 7.3 – Cartographie de l'endommagement à l'instant d'initiation de la rupture t_ℓ . Les résultats sont obtenus pour $Ca = 0.3$. La capsule est représentée pour les lois de Hooke généralisé ($\nu_s = 0.5, Y_D = 0.004, Y_C = 0.185$), de Skalak ($C = 0, Y_D = 0.0026, Y_C = 0.487$), de Mooney-Rivlin ($\psi = 0.5, Y_D = 0.0029, Y_C = 0.216$), et d'Evans-Skalak ($A^{ES} = 1, Y_D = 0.0026, Y_C = 0.387$). Les capsules représentées dans la colonne de gauche sont observées dans le plan de cisaillement $(\underline{e}_x, \underline{e}_z)$, et celles représentées dans la colonne de droite sont observées dans le plan $(\underline{e}_1, \underline{e}_y)$ défini sur la Figure 6.1. Le maillage contient 1280 éléments P2 (2562 noeuds). Toutes les images sont à la même échelle. Les valeurs de Y_D et Y_C qui sont données ici sont adimensionnées par G_s .

Chapitre 4

Vers la prise en compte de la fissuration : Régularisation du modèle d'endommagement par l'approche des discontinuités fortes

L'objectif de ce chapitre est d'étendre les modèles des chapitres précédents pour modéliser la phase de localisation, lorsque l'endommagement se concentre dans des zones de faible épaisseur, jusqu'à l'initiation d'une fissure. Après un revue succincte des méthodes existantes pour tenir compte de la localisation, on développe le modèle dans le cadre de l'approche des discontinuités fortes, on discute des conditions de stabilité, puis on valide le nouveau code dans le cas d'une capsule dans un écoulement hyperbolique plan.

1 Introduction

Dans les chapitres précédents, nous avons modélisé l'endommagement d'une microcapsule au cours de sa déformation par un écoulement. Ces modèles permettent de décrire la nucléation et la croissance de microdéfauts dans la membrane d'une microcapsule au cours de sa déformation, jusqu'à l'initiation de la rupture. Nous avons vu qu'une microcapsule en écoulement peut atteindre un état d'endommagement stable où l'endommagement n'évolue plus. En revanche, si les forces visqueuses de l'écoulement sont suffisamment importantes, l'endommagement de la capsule va finalement mener à l'initiation de la rupture.

Cependant, comme nous l'avons vu dans la partie 2 du chapitre 2, la définition de l'initiation de la rupture donnée par les modèles des chapitres précédents doit se limiter au seuil à partir duquel l'endommagement se localise (quand $d = D_c$), car au-delà, la solution n'est plus objective à cause de la perte d'unicité de la solution.

Physiquement, à partir du seuil critique d'endommagement D_c , les déformations et l'endommagement se localisent dans des zones de faible épaisseur (zones de localisation). Ce sont les phénomènes précurseurs de l'apparition de la fissuration. Il est donc important de modéliser correctement la phase de localisation pour pouvoir décrire ensuite la phase de fissuration. Pour cela, il est nécessaire de compléter le modèle d'endommagement, et de rendre le problème mathématiquement bien posé dans la phase de localisation.

Dans ce chapitre, on cherche donc à développer un modèle qui permette de compléter le modèle d'endommagement. Pour cela, nous allons étendre le modèle de manière à pouvoir représenter les zones de localisation des déformations dans la membrane.

Il est important de considérer que l'échelle associée aux zones de localisation (leur épaisseur) est bien plus petite que l'échelle de la structure. Le problème a donc un caractère *multi-échelle*. Dans notre cas, l'objectif principal est de rendre compte du comportement de la capsule en présence de zones de localisation. Nous n'allons donc pas chercher à décrire finement les zones de localisation (échelle micro), mais plutôt à rendre compte, à l'échelle de la capsule (échelle macro), de l'effet des *mécanismes dissipatifs localisés* dans ces zones.

Pour développer notre modèle dans un contexte multi-échelle, nous avons choisi de nous placer dans le cadre de l'approche des discontinuités fortes. Le principe de cette approche est de représenter une zone de localisation à l'échelle macroscopique par une surface au niveau de laquelle se concentre l'énergie dissipée localisée. Cette dissipation est gérée par un saut de déplacement *fictif* qui contrôle l'amplitude de la déformation localisée dans les zones de localisation. Les surfaces de localisation étant vues comme des fissures *cohésives*, une loi reliant le vecteur traction au saut de déplacement fictif permet de contrôler la dissipation. Le développement du modèle sera présenté dans la partie 2.

Le modèle que nous proposons dans ce chapitre est un premier modèle pour tenir compte de la localisation dans un contexte d'interaction fluide-structure. L'une des principales limites est que nous nous sommes focalisés sur la description du solide (le phénomène de localisation étant intrinsèquement lié à la membrane) mais nous n'avons pas apporté de modification à la description du fluide. Ce modèle n'est donc pas finalisé, mais il constitue une première base pour de futurs développements. En particulier, si on envisage de prendre en compte une description plus fine du fluide, ce modèle ouvrira la voie à la modélisation de la fissuration (au sens de la propagation d'une surface de discontinuité des déplacements, libre de traction).

Dans la suite de cette partie, dans la partie 1.1, nous allons décrire les phénomènes que nous cherchons à modéliser. Dans la partie 1.2, nous ferons une revue, non exhaustive, de méthodes répandues pour régulariser les modèles d'endommagement. Enfin, dans la partie 1.3, nous décrirons les méthodes couramment employées pour modéliser le comportement des zones de localisation dans le cadre de l'approche des discontinuités fortes.

Remarque :

Dans la suite, nous emploierons le terme de *rupture* pour désigner l'ensemble des phases d'endommagement et de localisation, jusqu'à l'initiation d'une fissure.

1.1 Le phénomène de localisation

Afin d'illustrer les phénomènes que nous cherchons à modéliser, on considère une éprouvette soumise à un essai de traction, déformée depuis son état sain jusqu'à sa rupture finale (Figure 1.1). L'une des extrémités de l'éprouvette est fixe, tandis qu'on impose les déplacements à l'autre extrémité libre.

Depuis l'état de référence où l'éprouvette n'est pas déformée (point O), à mesure qu'on augmente le déplacement de l'extrémité de l'éprouvette, il y a d'abord une phase de déformation élastique (du point O au point A), puis, on observe une première phase d'endommagement de l'éprouvette au cours de laquelle des microdéfauts s'initient et se développent de manière diffuse dans l'éprouvette (du point A au point B). Ce sont les phénomènes dont nous avons tenu compte jusque-là.

Alors que l'éprouvette continue d'être étirée, dans la portion de l'éprouvette la plus endommagée (il existera toujours une répartition non uniforme du chargement dans l'éprouvette), à partir d'un certain seuil d'endommagement, les déformations et l'endommagement commencent à se concentrer dans une zone de faible épaisseur : la *zone de localisation* (elle est représentée avec l'épaisseur w sur la Figure 1.1). On est alors au niveau du pic d'effort (point B), et on entre dans la phase de localisation. Dans cette phase, à mesure que l'éprouvette est étirée, l'endommagement et les déformations se concentrent de plus en plus dans la zone de localisation, tandis que le matériau se décharge élastiquement dans le reste de l'éprouvette. Au niveau de la réponse globale de l'éprouvette, le comportement est adoucissant (du point B au point C). On considère généralement que la zone de localisation est précurseur de l'apparition d'une véritable discontinuité dans la matière à l'échelle macroscopique, correspondant à l'apparition d'une macrofissure (point C).

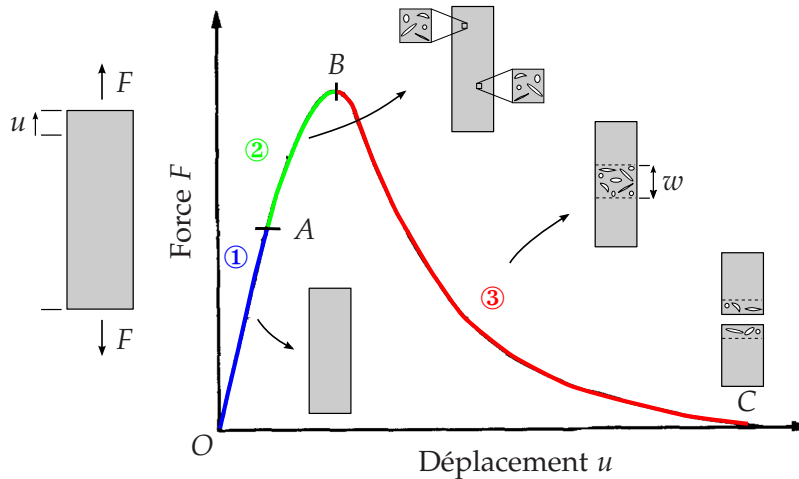


Figure 1.1 – Illustration de la réponse force / déplacement jusqu'à rupture d'une éprouvette en traction dans le cas d'une rupture quasi-fragile. L'éprouvette passe par les états successifs suivants : une phase de déformation élastique ①, suivie d'une phase où l'endommagement se développe de manière diffuse ②, puis, une phase où les déformations et l'endommagement se localisent dans une bande de faible épaisseur ③.

Ici nous avons illustré le phénomène de localisation dans le cas d'une rupture fragile, mais de manière générale, en fonction du type de rupture, ductile ou fragile, la zone de localisation correspond à une région où se localisent les déformations permanentes (dans le cas de la rupture ductile), on parle alors d'une bande de glissement, ou, à une région où se localisent les microdéfauts qui vont coalescer et initier une macrofissure qui va ensuite se propager dans la structure (dans le cas de la rupture fragile), on parle alors d'une bande de localisation.

1.2 Les méthodes de régularisation

Les modèles d'endommagement ne permettant pas de rendre compte objectivement du phénomène de localisation que nous venons de décrire, pour modéliser plus fidèlement ce phénomène dans les structures, plusieurs approches ont été développées. On dit que ces méthodes permettent de *régulariser* la formulation du problème, c'est-à-dire que le problème devient alors mathématiquement bien posé. Ces méthodes sont souvent appelées *limiteurs de localisation*. On présente dans la suite quelques unes des principales méthodes.

1.2.1 Modèles locaux

Un premier type de limiteur de localisation sont des modèles dans lesquels on conserve le caractère local du modèle de comportement. Parmi ce type de limiteur de

localisation, on peut citer les méthodes qui consistent à adapter la loi adoucissante en fonction de la taille des éléments du maillage de manière à avoir toujours la même dissipation dans un élément (Hillerborg *et al.*, 1976), ou encore celles qui consistent à intégrer un modèle de viscosité à la loi de comportement et à ajuster la valeur du paramètre de viscosité en fonction de la valeur du pas de temps, là aussi afin de conserver une dissipation constante quel que soit le pas de temps choisi (Needleman, 1988). L'une des limitations de ces modèles concerne la signification physique des paramètres physiques utilisés, qui dépendent de la taille du maillage. Par ailleurs, il réside généralement une dépendance de la solution à l'orientation du maillage.

1.2.2 Modèles non-locaux

Un deuxième type de limiteur de localisation sont les modèles non-locaux qui consistent à modifier la formulation du modèle de comportement du matériau de manière à lui conférer un caractère non local. L'idée de ces modèles est que la loi constitutive en un point ne dépend plus seulement de l'état en ce point mais aussi de l'état des points dans son voisinage. Ce sont des modèles qui introduisent donc une longueur caractéristique dans la formulation du modèle correspondant à la taille du voisinage. On ne peut alors plus séparer les échelles. On distingue les modèles non-locaux forts et faibles. Les modèles non-locaux forts sont les modèles non-locaux de type intégral, dans lesquels la loi de comportement (typiquement l'état de contraintes) en un point dépend d'une moyenne pondérée des variables d'état dans un certain voisinage (Bažant & Pijaudier-Cabot, 1988). Les modèles non-locaux faibles sont les modèles à gradient, dans lesquels les lois constitutives sont enrichies en y intégrant une dépendance à des gradients des variables d'état (Peerlings *et al.*, 1996; Francfort & Marigo, 1998; Bourdin *et al.*, 2000). Les modèles à gradient peuvent être vus comme un cas asymptotique des modèles non-locaux intégraux dans lesquels le voisinage devient le voisinage immédiat du point matériel considéré (Bažant & Jirásek, 2002). Les limitations des modèles non-locaux souvent évoquées sont la difficulté d'identifier la longueur caractéristique introduite dans le modèle, et la difficulté d'implémenter de tels modèles dans les codes de structure classiques.

1.2.3 Modèles à discontinuités

Un troisième type de limiteur de localisation sont les méthodes à discontinuités, qui sont des méthodes de régularisation intrinsèquement liées à la méthode de discrétisation par éléments finis. L'objectif de ces méthodes n'est pas de décrire finement les

mécanismes dissipatifs qui s'opèrent à l'échelle de la zone de localisation, mais plutôt leurs effets à l'échelle de la structure.

En considérant que le gradient de déformation entre la zone de localisation et le matériau hors de cette zone est important, la zone de localisation peut être considérée comme une zone sur les bords de laquelle il y a une discontinuité des déformations. On peut alors considérer qu'il est possible de modéliser une zone de localisation dans le cadre de la formulation standard des éléments finis, car dans le cadre de cette formulation, le champ de déformation est discontinu entre deux éléments. Toutefois, la limitation de la formulation classique réside dans le fait que la zone de localisation est alors restreinte à avoir la largeur d'un élément et son orientation est déterminée par l'orientation des éléments. Le principe des méthodes à discontinuités est de permettre d'avoir la zone de localisation qui puisse traverser un élément, et avec une orientation quelconque. Ainsi le maillage n'impose plus la largeur ni l'orientation de la zone de localisation.

Pour ce faire, dans les méthodes à discontinuités, on ajoute à l'interpolation classique du champ de déplacement un terme d'enrichissement qui permet d'avoir une discontinuité du champ de déformation ou de déplacement, au sein d'un élément. Le champ de déplacement \underline{u} est interpolé dans un élément sous la forme suivante :

$$\forall \underline{x} \in \text{element}, \quad \underline{u}(\underline{x}) = \sum_{a=1}^{N_n} N_a(\underline{x}) \underline{u}_a + \sum_{p=1}^{N_m} M_p(\underline{x}) \underline{\alpha}_p, \quad (1.1)$$

où la première somme du membre de droite est le terme d'interpolation classique, et la seconde somme permet d'enrichir le champ de déplacement afin d'avoir une discontinuité du champ de déformation ou du champ de déplacement à l'intérieur de l'élément. Les différents termes $M_p(\underline{x}) \underline{\alpha}_p$ correspondent à différents modes de déformation ou d'ouverture, où les vecteurs $\underline{\alpha}_p$ sont les degrés de liberté associés.

1.2.3.1 Discontinuités faibles

Les modèles qui introduisent une discontinuité du champ de déformation sont les modèles dits à discontinuités faibles. Dans ce cas, les fonctions $M_p(\underline{x})$ de l'équation (1.1) sont continues à l'intérieur de l'élément. Les premiers modèles à discontinuités faibles ont été introduits dans les travaux de Pietruszczak & Mróz (1981) et Ortiz *et al.* (1987). Dans le modèle proposé par Pietruszczak & Mróz (1981) l'ensemble de la bande de localisation des déformations traverse l'élément, tandis que dans le modèle de Ortiz *et al.* (1987), seule une ligne (éléments 2D) de discontinuité des déformations peut traverser

l'élément (la bande de localisation étant délimitée par deux lignes de discontinuités). Dans ces modèles, les déformations sont interpolées de manière classique tant que les éléments ne sont pas traversés par la bande de localisation. La bande de localisation apparaît dans un élément dès que l'instabilité matérielle associée à la loi constitutive du matériau est détectée, et l'orientation de la bande de localisation ou de la ligne de discontinuité dans l'élément est donnée par ce même critère.

Pour introduire sur un cas simple certains des concepts qui seront utilisés dans le modèle développé dans cette thèse, on propose d'illustrer la méthode des discontinuités faibles en adaptant le modèle proposé par Huespe *et al.* (2009) sur un cas unidimensionnel pour des éléments à deux nœuds.

Dans ce modèle, un élément Ω_e contenant une bande de localisation est décomposé en trois domaines, correspondant à la bande de localisation Ω_e^D , et aux domaines Ω_e^- et Ω_e^+ de part et d'autre de la bande. Le champ de déplacement dans un élément (1.1) est alors interpolé sous la forme (Figure 1.2) :

$$\forall x \in \Omega_e, \quad u(x) = \underbrace{\sum_{a=1}^2 N_a(x) u_a}_{\hat{u}} + \underbrace{(H_D(x) - N^+(x)) \alpha}_{M(x)}, \quad (1.2)$$

où N_a sont les fonctions de forme standard (linéaires) de l'élément, $N^+(x)$ est la fonction de forme associée au nœud dans Ω_e^+ , et $H_D(x)$ correspond à la fonction de forme continue donnée par :

$$\forall x \in \Omega_e, \quad H_D(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x \in \Omega_e^- \\ \frac{1}{D}(x - x_0) & \text{si } x \in \Omega_e^D, \\ 1 & \text{si } x \in \Omega_e^+ \end{cases}, \quad (1.3)$$

où x_0 est un point sur le bord de la bande de localisation, et D est le paramètre qui contrôle la largeur de la bande. La longueur D permet donc d'introduire une longueur caractéristique objective, c'est-à-dire indépendante de la taille du maillage, dans le modèle, ce qui permet de régulariser le problème.

Dans le cadre des petites perturbations, la déformation dans l'élément est alors donnée par (Figure 1.2) :

$$\forall x \in \Omega_e, \quad \varepsilon(x) = \underbrace{\sum_{a=1}^2 \frac{dN_a}{dx} u_a - \frac{dN^+}{dx} \alpha}_{\bar{\varepsilon}} + \underbrace{\frac{dH_D}{dx} \alpha}_{\bar{\varepsilon}}. \quad (1.4)$$

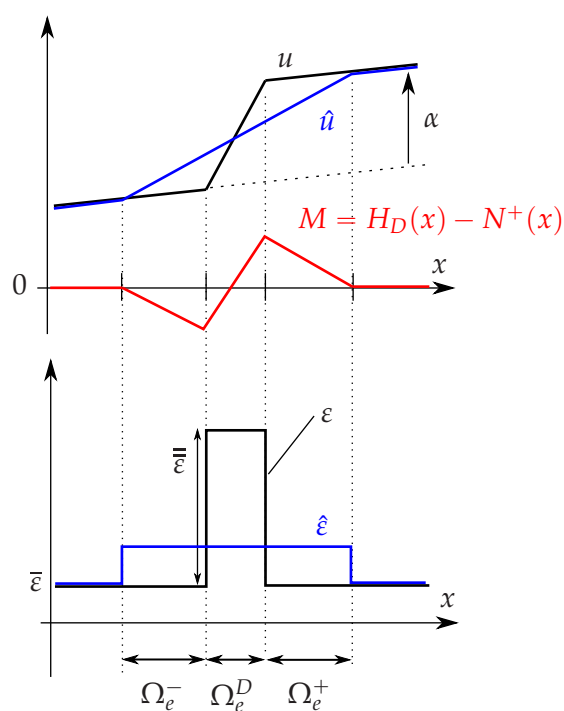


Figure 1.2 – Illustration de la méthode des discontinuités faibles. En bleu sont représentés les champs correspondant à la description macroscopique, et en noir sont représentés les champs enrichis qui donnent une description locale. Le champ de déplacement enrichi u est obtenu à partir du champ de déplacement macroscopique \hat{u} , que l'on corrige avec le terme $M\alpha$.

La déformation dans l'élément est donc donnée par :

$$\forall x \in \Omega_e, \quad \varepsilon(x) = \begin{cases} \bar{\varepsilon} & \text{si } x \in \Omega_e^- \cup \Omega_e^+ \\ \bar{\varepsilon} + \bar{\bar{\varepsilon}} & \text{si } x \in \Omega_e^D \end{cases}, \quad (1.5)$$

avec la déformation $\bar{\bar{\varepsilon}}$ donnée par :

$$\bar{\bar{\varepsilon}} = \frac{\alpha}{D}. \quad (1.6)$$

On peut aussi remettre l'équation (1.4) sous la même forme que l'équation (1.2) :

$$\forall x \in \Omega_e, \quad \varepsilon(x) = \underbrace{\sum_{a=1}^2 \frac{dN_a}{dx} u_a}_{\hat{\varepsilon}} + \underbrace{\left(\frac{dH_D}{dx} - \frac{dN^+}{dx} \right) \alpha}_{\tilde{\varepsilon}}, \quad (1.7)$$

où on peut alors interpréter $\hat{\varepsilon}$ comme correspondant à la déformation vue à un niveau global (échelle de la structure), et la déformation $\tilde{\varepsilon}$ correspond à un enrichissement local permettant de décrire les déformations à l'échelle d'un voisinage de la bande de localisation. Cette décomposition met en évidence que la déformation $\tilde{\varepsilon}$ corrige la description grossière des déformations dans l'élément donnée par la déformation globale $\hat{\varepsilon}$, en augmentant la déformation dans la bande de localisation et en relaxant la déformation hors de la bande, en effet on a :

$$\forall x \in \Omega_e, \quad \varepsilon(x) = \begin{cases} \hat{\varepsilon} - \frac{dN^+}{dx} \alpha & \text{si } x \in \Omega_e^- \cup \Omega_e^+ \\ \hat{\varepsilon} + \left(\frac{dH_D}{dx} - \frac{dN^+}{dx} \right) \alpha & \text{si } x \in \Omega_e^D \end{cases}. \quad (1.8)$$

Cet exemple montre deux des limitations principales des modèles à discontinuités faibles, qui correspondent à une largeur de la bande de localisation qui est limitée par la taille des éléments, et cette largeur est par ailleurs un paramètre du modèle qu'il reste à identifier.

Bien que les modèles à discontinuités faibles n'aient pas été très utilisés par la suite, ils ont participé au développement des méthodes à discontinuités fortes.

1.2.3.2 Discontinuités fortes

Dans le cadre de l'approche des discontinuités fortes, les zones de localisation étant de très faible épaisseur par rapport à l'échelle de la structure, elles sont alors réduites à une surface au niveau de laquelle les déformations localisées sont décrites par un champ de

déformation singulier, et l'énergie dissipée localisée est représentée par une dissipation surfacique. La singularité des déformations correspond alors à un saut de déplacement au niveau de la surface, qui est donc caractérisée comme une surface de discontinuité.

Ainsi, dans la méthode des discontinuités fortes, les fonctions $M_p(\underline{x})$ de l'équation (1.1) sont discontinues à l'intérieur d'un élément enrichi. Il y a alors un saut du vecteur déplacement à l'intérieur d'un élément enrichi. Les approches à discontinuités fortes peuvent être vues comme un cas limite des modèles à discontinuités faibles lorsque la largeur de la bande de localisation devient nulle. L'un des avantages de cette approche est donc qu'il n'y a pas de longueur caractéristique à définir dans le modèle (cette longueur caractéristique est nulle).

Les deux méthodes les plus répandues pour résoudre un modèle formulé dans le cadre de l'approche des discontinuités fortes sont souvent désignées comme étant la méthode des éléments finis intégrés (EFEM : Embedded Finite Element Method) et la méthode des éléments finis étendus (XFEM : eXtended Finite Element Method).

C'est via la méthode EFEM que l'approche des discontinuités fortes a été initialement introduite avec les travaux de Dvorkin *et al.* (1990) et de Simo & Oliver (1994). Dans le cadre de la méthode EFEM, dans l'équation (1.1), les degrés de liberté $\underline{\alpha}_p$ correspondants au terme d'enrichissement sont des degrés de libertés locaux qui n'appartiennent qu'à l'élément.

L'emploi de la méthode XFEM pour résoudre le problème des discontinuités fortes a été introduite par les travaux de Belytschko & Black (1999) et Moës *et al.* (1999). Dans le cadre de la méthode XFEM, dans l'équation (1.1), les degrés de liberté $\underline{\alpha}_p$ sont des degrés de libertés globaux, tout comme les déplacements nodaux \underline{u}_n de la même équation.

Des résultats semblables peuvent être obtenus avec les méthodes EFEM et XFEM (Oliver *et al.*, 2006). L'un des avantages de la méthode EFEM est qu'elle n'ajoute pas de degrés de libertés globaux au modèle par rapport au cas standard où les degrés de liberté correspondent aux degrés de libertés nodaux. Ainsi par rapport à la méthode XFEM qui ajoute des degrés de libertés globaux, la taille du système à résoudre au niveau global est plus petite avec la méthode EFEM, et l'implémentation de cette méthode dans un code de structure est plus aisée car les modifications ne sont apportées qu'au niveau des éléments. Toutefois, les avantages de la méthode XFEM sont que le vecteur saut de déplacement est continu au passage d'un élément à un autre, et on peut représenter plus finement le champ de déplacement aux extrémités de la discontinuité pour modéliser le comportement en pointe de fissure.

1.2.4 Autres modèles

En dehors des méthodes de régularisation évoquées ici pour modéliser la phase de localisation, il existe d'autres modèles qui incluent à la fois la modélisation de la phase d'endommagement diffuse et la phase de localisation de l'endommagement comme les méthodes thick level set (Moës *et al.*, 2011), ou encore les modèles à champs de phase (Miehe *et al.*, 2010; Kumar *et al.*, 2018). Ils ne seront pas développés ici.

1.2.5 Choix du modèle

Dans le cadre de cette thèse, on cherche à modéliser la rupture de la membrane d'une capsule en écoulement. Cette membrane subit des grands déplacements et généralement aussi des grandes déformations. Plusieurs modèles de rupture avec les discontinuités fortes ont déjà été développés dans le cadre des grandes déformations (Oliver *et al.*, 2003; Gasser & Holzapfel, 2003; Armero & Linder, 2008). En considérant par ailleurs que cette méthode permet de modéliser la rupture sans remaillage (coûteux), qu'elle n'introduit pas de degrés de libertés globaux, et qu'elle a un faible impact sur l'architecture d'un code de calcul, nous avons donc choisi de développer le modèle de rupture d'une capsule en écoulement à partir d'un modèle de discontinuités fortes intégrées (EFEM). L'originalité du modèle vient du fait que la méthode des discontinuités fortes intégrées ne semblent pas avoir été utilisée pour modéliser la rupture de membranes, notamment en grandes déformations, ni pour modéliser la rupture en interaction fluide-structure.

1.3 Comportement d'une discontinuité forte

Dans le cadre de la méthode des discontinuités fortes, deux approches, souvent qualifiées d'approches "continue" et "discrète", ont principalement été utilisées pour décrire la dissipation surfacique au niveau de la surface de discontinuité (la "discontinuité forte"). Dans les deux approches, la dissipation surfacique est décrite par une loi de comportement discrète qui relie le vecteur traction (force de cohésion surfacique) au saut de déplacement, le long de la discontinuité. Les deux approches diffèrent dans la manière de dériver ces lois.

1.3.1 Approche continue

Dans le cadre de l'approche continue, il est fait l'hypothèse qu'un champ de déplacement discontinu, et donc un champ de déformation avec une singularité, est compatible avec la loi constitutive du matériau (Oliver, 1996). En intégrant ainsi un champ de dé-

formation avec une singularité dans la loi constitutive du matériau, on obtient une loi de comportement discrète, ainsi que le critère d'introduction de la discontinuité et son orientation.

L'approche continue classique a certaines limitations. Tout d'abord, le critère d'introduction de la discontinuité qui émerge à partir de ce modèle peut se trouver être différent de la condition de localisation (ou condition d'instabilité matérielle) du modèle du milieu continu, et en particulier, la condition de localisation peut être rencontrée avant que le critère d'introduction de la discontinuité ne soit vérifié. La méthode de régularisation perd alors son intérêt car, à partir du moment où la condition de localisation du modèle du milieu continu est rencontrée, la solution n'est plus objective (il y a perte d'unicité de la solution). Par ailleurs le modèle d'endommagement a été obtenu à partir d'un modèle d'homogénéisation, il n'y a donc rien qui garantisse que la loi de traction-séparation émergeant du modèle d'endommagement en présence d'une singularité des déformations soit représentative du comportement du matériau dans la zone de localisation, où l'échelle des mécanismes dissipatifs n'est plus la même.

1.3.2 Approche discrète

Dans le cadre de l'approche discrète, on modélise le comportement de la discontinuité forte de manière indépendante de la loi constitutive du milieu continu (hors de la discontinuité). Le critère d'introduction de la discontinuité et sa direction peuvent alors être choisis de manière indépendante du critère de localisation du comportement du milieu continu. Par ailleurs, on construit la loi de comportement discrète en considérant la surface de discontinuité comme une interface cohésive (ou fissure cohésive). Cette modélisation est directement issue des modèles de zones cohésives qui ont initialement été introduits dans les travaux de Dugdale (1960), Barenblatt (1962), ou encore Hillerborg *et al.* (1976), comme une alternative à l'approche classique de la mécanique de la rupture pour modéliser la propagation d'une fissure.

Dans les modèles de zones cohésives, deux surfaces fictives initialement accolées, appelées surfaces cohésives, sont introduites dans le prolongement du plan de la fissure, dans la *process zone* (zone en amont du front de la fissure où se concentrent les mécanismes dissipatifs). La déformation de la process zone correspond à la séparation des deux surfaces. On suppose que les configurations de référence et déformée des surfaces cohésives puissent être confondues, et donc que le saut de déplacement entre les deux surfaces cohésives reste petit. Les efforts de cohésion entre les deux surfaces est alors modélisé par un vecteur traction (force de cohésion surfacique) distribué sur la surface

moyenne. Le vecteur traction est relié à l'histoire du saut de déplacement entre les deux surfaces, par une loi cohésive. Cette loi cohésive est de manière générale dérivée dans un cadre thermodynamique pour les interfaces (Mosler & Scheider, 2011). Lorsque les deux surfaces sont totalement séparées, correspondant au vecteur traction qui devient nul, on considère que la process zone se fissure sur l'unité d'aire correspondante. Le travail du vecteur traction avec le saut de déplacement jusqu'à la séparation des deux surfaces correspond alors à l'énergie dissipée dans la process zone par unité de surface de fissure créée.

On peut donc ici établir un lien entre la zone de localisation que l'on cherche à modéliser dans le cadre de la méthode des discontinuités fortes, et le concept de "process zone" habituellement utilisé dans le cadre de la mécanique de la rupture.

L'avantage de la méthode discrète est que l'on peut considérer des comportements différents (continu/discret) pour des mécanismes dissipatifs qui sont *a priori* eux aussi très différents (endommagement diffus/localisé). On peut alors choisir les critères d'introduction et d'orientation de la surface de discontinuité, ainsi que la loi de comportement discrète, par exemple à partir de mesures expérimentales ou de considérations physiques.

À partir de ces dernières considérations, et du fait que la loi discrète puisse se construire dans un cadre thermodynamique, l'approche discrète semble avoir une justification physique suffisamment fondée. Nous avons donc choisi de nous placer dans le cadre de cette approche pour développer le modèle de rupture dans ces travaux.

Dans la suite de ce chapitre, on présente d'abord le modèle de discontinuités fortes qui a été développé pour modéliser la rupture d'une capsule en écoulement. On présente ensuite des simulations réalisées sur un élément et sur une membrane en traction uniaxiale afin de valider l'implémentation du modèle, puis on présente les premiers résultats obtenus avec le modèle des discontinuités fortes pour une capsule en écoulement hyperbolique plan.

2 Formulation théorique du modèle de la rupture d'une capsule en écoulement

L'objectif de cette partie est d'étendre le modèle des chapitres précédents pour modéliser l'initiation et la propagation des zones de localisation dans la membrane. Ces zones étant le siège de la fissuration, on va modéliser leur développement jusqu'au stade correspondant à l'initiation d'une fissure (au sens d'une surface libre de traction)

à l'endroit où une zone de localisation est totalement endommagée, et l'orientation de la zone de localisation indiquera l'orientation avec laquelle se propagerait la fissure. Toutefois, nous restons dans le cadre de la mécanique de l'endommagement et nous ne cherchons donc pas à modéliser la propagation d'une fissure, qui rentre dans le cadre de la mécanique de la rupture.

Comme nous l'avons vu, nous allons développer ce modèle dans un contexte multi-échelle en nous plaçant dans le cadre de la méthode des discontinuités fortes. Dans ce cadre, les effets dissipatifs localisés sont pris en compte par l'introduction d'une surface de "discontinuité forte". Dans la section 2.1, nous allons développer les hypothèses du modèle et nous introduirons la surface de discontinuité forte pour tenir compte, à l'échelle de la structure, des déformations localisées. Dans la section 2.2 nous verrons comment nous tenons compte de la dissipation localisée par l'introduction d'une dissipation surfacique. Cette formulation introduit un découplage entre la caractérisation du comportement du matériau sur les surfaces de localisation et hors de celles-ci. Nous caractériserons chacun de ces comportements. Enfin, dans la section 2.3, nous établirons les équations d'équilibre de la membrane en présence d'une surface de discontinuité forte.

2.1 Déformation de la membrane en présence d'une discontinuité forte

L'objectif de cette partie est tout d'abord d'établir les hypothèses dans lesquelles nous allons nous placer pour décrire la membrane en présence d'une zone de localisation. Ces hypothèses vont nous permettre de justifier l'emploi de l'approche des discontinuités fortes pour décrire les mécanismes dissipatifs localisés. Dans ce cadre, nous décrirons la cinématique et la déformation de la membrane.

Comme pour les chapitres précédents, les déformations de l'enveloppe de la capsule sont celles d'une membrane. La position des points de la membrane est donc entièrement décrite par la position de la surface moyenne. On désigne par S_0 la surface moyenne de la membrane dans la configuration de référence (correspondant à l'instant $t = 0$).

Soit S_d un voisinage d'un point \underline{X} de S_0 au niveau duquel ont lieu des mécanismes dissipatifs localisés. On suppose donc qu'au niveau du point \underline{X} passe une zone de localisation Ω_0 , où Ω_0 correspond à une mesure de l'étendue de la zone de localisation (Figure 2.1). La Figure 2.2 illustre l'évolution des champs réels de déplacement \underline{u} et de déformation de Green-Lagrange \underline{g} au niveau du voisinage S_d , pour un problème unidimensionnel.

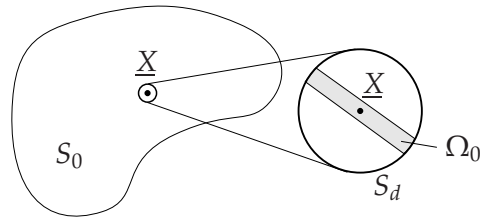


Figure 2.1 – Illustration de la présence d'une zone de localisation Ω_0 dans un voisinage S_d d'un point \underline{X} de la membrane dans la configuration de référence.

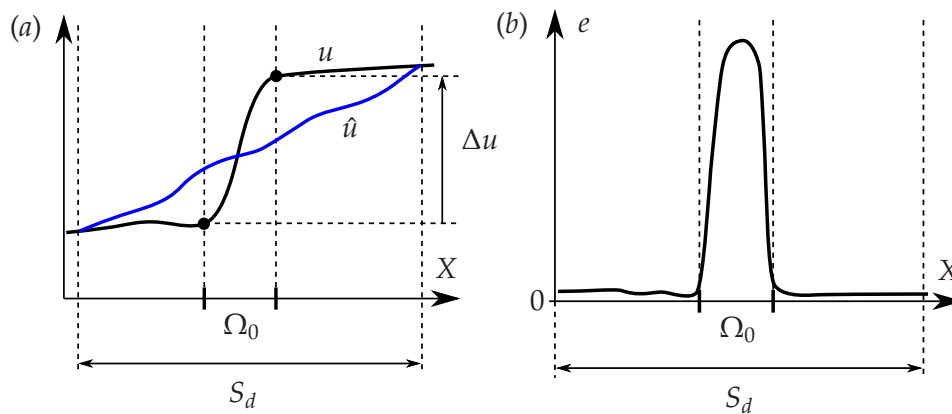


Figure 2.2 – Évolution des champs réels (a) de déplacement u , (b) et de déformation e , dans le voisinage S_d contenant la zone de localisation Ω_0 . La variation du champ de déplacement de part et d'autre de la zone de localisation correspond à Δu . Le champ de déplacement \hat{u} représente une vision du champ de déplacement à l'échelle macroscopique.

Dans le cadre de notre modèle nous allons faire les hypothèses suivantes concernant la description de la zone de localisation :

- les variations du champ de déplacement Δu de part et d'autre de la zone de localisation sont petits devant les dimensions de la structure (Figure 2.2).
- l'épaisseur de la bande de localisation Ω_0 est petite devant l'échelle de la structure, et elle est de manière générale petite devant Δu .

Par conséquent, dans la zone de localisation, il y a de manière générale un fort gradient de déplacement, mais de part et d'autre de la zone de localisation, l'amplitude de la variation des déplacements est faible.

Rappelons que, dans le cadre de notre modèle, nous ne cherchons pas à modéliser finement la zone de localisation à l'échelle du voisinage S_d , mais seulement à tenir compte de ses effets à l'échelle de la structure.

Pour le champ de déplacement, comme l'amplitude de la variation des déplacements de part et d'autre de la zone de localisation est faible et que Ω_0 est petit, on va donc considérer que la description de la cinématique de la membrane au niveau du voisinage S_d par un champ plus régulier a peu d'impact sur le fluide à l'échelle macroscopique. Nous n'allons donc pas chercher à représenter précisément toutes les variations du champ de déplacement à l'intérieur du voisinage S_d et nous allons le représenter à l'échelle macroscopique par un champ \hat{u} plus régulier. On va considérer un champ \hat{u} continu qui est égal à \underline{u} hors du voisinage S_d , et égal à \underline{u} en moyenne à l'intérieur de S_d (Figure 2.2a). On note \hat{S} la configuration courante de la surface moyenne de la membrane associée au champ de déplacement macroscopique \hat{u} .

En ce qui concerne le fluide, nous faisons l'hypothèse que le couplage cinématique entre le solide et le fluide se fait au niveau de la description macroscopique \hat{u} du solide. Ainsi, la relation entre la vitesse \underline{v} du fluide, et le déplacement macroscopique \hat{u} du point de la membrane correspondant sur \hat{S} , est donnée par :

$$\underline{v} = \frac{d\hat{u}}{dt}. \quad (2.1)$$

Il s'agit ici d'une des faiblesses du modèle, car nous introduisons une incohérence à l'échelle microscopique entre le fluide et le solide. Nous devons donc nous restreindre aux cas où les variations de vitesse tangentielles dans la zone et autour de la localisation dans le voisinage S_d , qui ne sont pas vues par le fluide, n'induiraient pas des variations importantes des efforts intérieurs dans le fluide. Autrement dit, les vitesses tangentielles macroscopique $\hat{\tau}$, vue par le fluide, et microscopique $\dot{\tau}$, correspondant au solide, sont telles que $|\hat{\tau} - \dot{\tau}| \ll 1$.

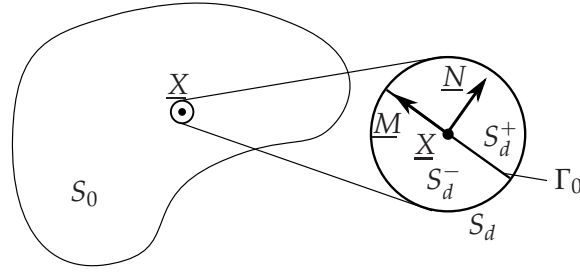


Figure 2.3 – À l'échelle macroscopique, la déformation localisée est vue comme un champ singulier distribué sur Γ_0 .

Le comportement de la membrane à l'intérieur et hors de la zone de localisation dépend de l'état de déformation local, il est donc important de tenir compte à l'échelle macroscopique des différences de gradient de déplacement dans ces deux régions dans le voisinage S_d . On va donc *enrichir* la description des déformations par rapport à celle donnée par le gradient du champ \hat{u} , que l'on a choisi pour décrire les déplacements à l'échelle macroscopique. Comme Ω_0 est petit et que l'on ne cherche pas à avoir une description fine des déformations dans le voisinage S_d , on va se placer dans le cas limite où on va considérer, à l'échelle macroscopique, que les déformations associées à la zone de localisation sont localisées sur une ligne Γ_0 , au centre de Ω_0 , sous la forme d'un champ singulier (Figures 2.3 et 2.4).

Nous décrivons les déformations enrichies à partir du gradient de transformation $\underline{\underline{F}}$. Ce champ $\underline{\underline{F}}$ doit être singulier sur Γ_0 , et il doit permettre de décrire l'état de déformation sur S_d hors de Γ_0 de manière plus réaliste que les déformations données par le champ de déplacement macroscopique \hat{u} . Pour cela, on dérive l'expression de $\underline{\underline{F}}$ à partir d'un champ de déplacement *fictif* \underline{u}^{fic} :

$$\underline{\underline{F}} = \underline{\underline{1}}_s^0 + \underline{\underline{\nabla}}_s^0 \underline{u}^{fic}, \quad (2.2)$$

où $\underline{\underline{1}}_s^0$ désigne le tenseur métrique dans la configuration de référence, et $\underline{\underline{\nabla}}_s^0(\cdot) = \partial(\cdot)/\partial \xi^\alpha \underline{A}^\alpha$ est l'opérateur gradient surfacique sur la surface moyenne de la membrane dans la configuration de référence. On construit le champ \underline{u}^{fic} de sorte qu'il soit discontinu sur Γ_0 , égal à \hat{u} hors de S_d , et dont l'allure décrit mieux le champ de déplacement réel dans S_d hors de la zone de localisation, que le champ \hat{u} . Pour cela, on construit \underline{u}^{fic} sous la forme suivante (Figure 2.4) :

$$\underline{u}^{fic}(\underline{X}, t) = \hat{u}(\underline{X}, t) + M(\underline{X}) \bar{\bar{u}}(\underline{X}, t), \quad (2.3)$$

où \underline{X} est la position d'un point matériel de S_d , le champ $\overline{\underline{u}}$ est dans le plan de la membrane, par construction, et la fonction M est donnée par :

$$M(\underline{X}) = \mathcal{H}^+(\underline{X}) - \varphi(\underline{X}). \quad (2.4)$$

Dans cette dernière équation, la fonction \mathcal{H}^+ désigne la fonction de Heaviside telle que :

$$\mathcal{H}^+(\underline{X}) = \begin{cases} 1 & \text{si } \underline{X} \in S_d^+ \\ 0 & \text{si } \underline{X} \in S_d^-, \end{cases} \quad (2.5)$$

où S_d^+ et S_d^- désignent les deux sous-parties de S_d séparées par Γ_0 (Figure 2.3), et φ est une fonction C^1 sur S_d .

Le saut de déplacement (fictif) de \underline{u}^{fic} le long de Γ_0 est alors donné par $[[\underline{u}^{fic}]]_{\Gamma_0} = \overline{\underline{u}}(\underline{X})$ pour $\underline{X} \in \Gamma_0$. Ce saut de déplacement a uniquement pour but de représenter l'amplitude des déformations localisées comme nous allons le voir dans la suite.

Il est important ici de bien voir que dans l'équation (2.3), le terme $M(\underline{X})\overline{\underline{u}}(\underline{X}, t)$ permet d'enrichir la description du champ de déplacement dans le voisinage S_d , ou, autrement dit, il corrige la description grossière du champ de déplacement $\hat{\underline{u}}$ dans S_d .

À partir de l'expression de \underline{u}^{fic} donnée par l'équation (2.3), on dérive l'expression de $\underline{\underline{F}}$ d'après l'équation (2.2) :

$$\underline{\underline{F}} = \underbrace{\underline{1}_s^0 + \underline{\underline{\nabla}}_s^0 \hat{\underline{u}} + M \underline{\underline{\nabla}}_s^0 \overline{\underline{u}} - \overline{\underline{u}} \otimes \underline{\underline{\nabla}}_s^0 \varphi}_{\text{terme régulier}} + \underbrace{\delta_{\Gamma_0} \overline{\underline{u}} \otimes \underline{N}}_{\text{terme singulier}}, \quad (2.6)$$

où δ_{Γ_0} est la fonction de Dirac distribuée sur Γ_0 , et le vecteur \underline{N} est défini le long de Γ_0 tel qu'il est unitaire, normal à Γ_0 , tangent à S_0 et dirigé vers S_d^+ (Figure 2.3). Dans l'équation (2.6), comme le saut de déplacement $\overline{\underline{u}}$ varie lentement par rapport à φ , on peut négliger $M \underline{\underline{\nabla}}_s^0 \overline{\underline{u}}$ par rapport à $\underline{\underline{\nabla}}_s^0 \varphi$.

Ainsi, la partie régulière de $\underline{\underline{F}}$, que l'on note $\overline{\underline{\underline{F}}}$, est continue dans S_d , et elle est donnée par :

$$\overline{\underline{\underline{F}}} = \underline{1}_s^0 + \underline{\underline{\nabla}}_s^0 \hat{\underline{u}} - \overline{\underline{u}} \otimes \underline{\underline{\nabla}}_s^0 \varphi. \quad (2.7)$$

On introduit par ailleurs le tenseur $\overline{\underline{\underline{F}}}$ pour la partie singulière de $\underline{\underline{F}}$:

$$\overline{\underline{\underline{F}}} = \delta_{\Gamma_0} \overline{\underline{u}} \otimes \underline{N}. \quad (2.8)$$

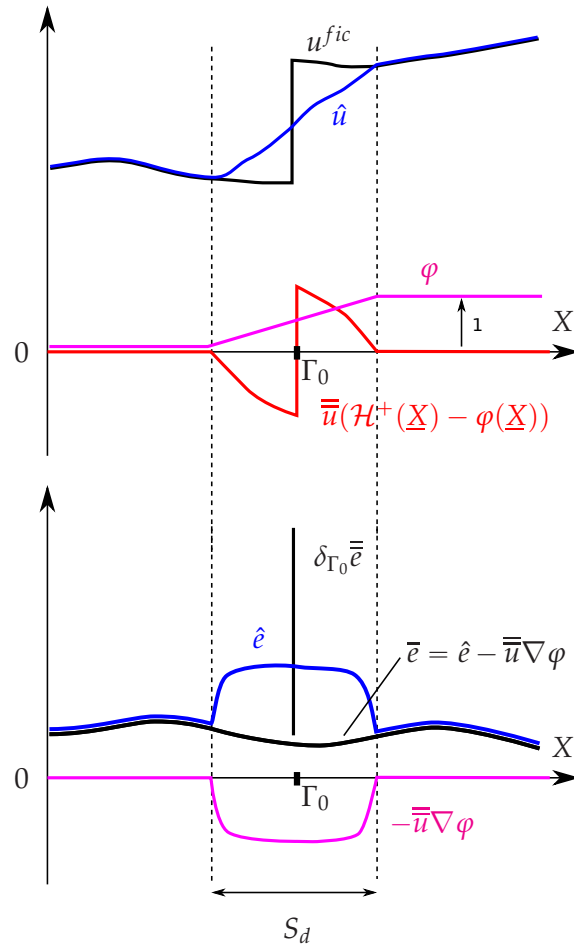


Figure 2.4 – Le champ de déplacement fictif u^{fic} , à partir duquel est dérivé le gradient de transformation $\underline{\underline{E}}$, est construit à partir du champ de déplacement macroscopique \hat{u} que l'on corrige en ajoutant le champ $\bar{u}(\mathcal{H}^+(\underline{X}) - \varphi(\underline{X}))$. Dans le voisinage S_d , la déformation \bar{e} hors de la discontinuité Γ_0 correspond alors à la déformation macroscopique \hat{e} corrigée par le terme $-\bar{u}\nabla\varphi$. D'après l'équation (2.6), l'amplitude \bar{e} de la déformation localisée $\delta_{\Gamma_0}\bar{e}$ correspond à \bar{u} .

Le gradient de transformation $\underline{\underline{\bar{F}}}$ correspond aux déformations localisées, dont l'amplitude est donnée par $\underline{\underline{\bar{u}}}$ au niveau de Γ_0 (éq. (2.8)). Pour interpréter l'amplitude des déformations localisées, on considère le cas unidimensionnel représenté en Figure 2.2. L'ordre de grandeur des déformations réelles dans la zone de localisation est :

$$e = \frac{\Delta u}{|\Omega_0|}. \quad (2.9)$$

Dans le cadre de nos hypothèses, on a considéré $|\Omega_0|$ petit devant Δu . En se plaçant dans le cas limite qu'on a considéré, on a alors :

$$\begin{aligned} e &= \lim_{|\Omega_0| \rightarrow 0} \frac{\Delta u}{|\Omega_0|} \\ &= \delta_{\Gamma_0} \Delta u. \end{aligned} \quad (2.10)$$

Sur la Figure 2.4, on identifie donc $\bar{e} = \Delta u$. Il faut donc interpréter le saut de déplacement fictif $\underline{\underline{\bar{u}}}$ comme l'amplitude de la variation des déplacements réels Δu de part et d'autre de la zone de localisation. Ainsi, pour être en accord avec nos hypothèses, on va considérer que $\underline{\underline{\bar{u}}}$ reste petit devant les dimensions de la structure ($|\underline{\underline{\bar{u}}}| \ll L$).

D'après l'équation (2.7), on peut mettre $\underline{\underline{\bar{F}}}$ sous la forme :

$$\underline{\underline{\bar{F}}} = \hat{\underline{\underline{F}}} - \underline{\underline{\bar{u}}} \otimes \underline{\underline{\nabla}}_s^0 \varphi, \quad (2.11)$$

où $\hat{\underline{\underline{F}}}$ correspond au gradient de transformation associé au champ de déplacement macroscopique \hat{u} . Ainsi, le gradient de transformation $\underline{\underline{\bar{F}}}$ est construit à partir de $\hat{\underline{\underline{F}}}$ auquel on retranche un terme impliquant la fonction φ qui permet de corriger la description grossière des déformations donnée par $\hat{\underline{\underline{F}}}$, en tenant compte des déformations induites par $\underline{\underline{\bar{u}}}$ hors de Γ_0 . Ainsi, le terme de correction impliquant φ permet de relaxer les déformations sur $S_d \setminus \Gamma_0$ (la Figure 2.4 illustre cet aspect, sur le cadran du bas).

Dans cette partie, nous nous sommes focalisés sur la caractérisation de la cinématique et de la déformation de la membrane en présence d'une zone de localisation dans un voisinage S_d . De manière générale il peut y avoir plusieurs voisinages S_d contenant une zone de localisation. Toutefois, nous faisons l'hypothèse que ces voisinages sont disjoints, et qu'un voisinage ne peut pas contenir plusieurs zones de localisation. Dans le cadre de l'approche des discontinuités fortes résolue par la méthode EFEM, nous allons voir que le voisinage S_d correspond au domaine d'un élément fini. Il y aura donc autant de domaines S_d contenant une surface de localisation, qu'il y a d'éléments traversés par une surface de localisation.

Pour la suite, on note \bar{S} la configuration courante associée au milieu continu hors de Γ_0 qui a pour gradient de transformation le tenseur $\bar{\underline{E}}$. Ainsi, \hat{S} correspond à la configuration vue par le fluide, et \bar{S} correspond à la configuration de la membrane. Ainsi, on le rappelle, pour que le modèle reste pertinent, il faut que $\underline{\hat{E}} - \bar{\underline{E}}$ soit infinitésimal pour espérer que le comportement moyen du fluide soit le moins perturbé possible par la description grossière qu'il a du solide.

Remarque :

Dans la suite de ce chapitre, nous désignerons généralement le domaine $S_d \setminus \Gamma_0$ comme le "milieu continu", et la surface de localisation Γ_0 comme la "discontinuité". On notera toutefois que l'emploi du qualificatif "discontinuité" est abusif dans notre cas, car nous avons considéré un champ de déplacement macroscopique continu.

2.2 Comportement de la membrane

L'objectif de cette partie est de décrire le comportement de la membrane en présence de discontinuités fortes. Comme nous l'avons vu dans la partie 1.3, nous allons décrire ce comportement dans le cadre de l'approche discrète, qui permet de dissocier le comportement du milieu continu et de la discontinuité, et de construire chacun des deux modèles de comportement sur des bases thermodynamiques. Nous allons donc commencer par justifier comment est introduit le découplage entre les comportements des deux milieux, puis, dans les parties suivantes, nous établirons chacun des deux comportements.

2.2.1 Énergie localisée

Dans la partie 2.1, nous avons tenu compte des déformations localisées en introduisant une surface de discontinuité forte. De la même manière, nous allons tenir compte de l'énergie dissipée localisée, et du comportement spécifique du matériau au niveau de la zone de localisation, en supposant que les différentes formes d'énergie associées à la zone de localisation sont localisées sur la surface de discontinuité forte.

Ainsi, au niveau du voisinage S_d , on suppose que la densité d'énergie libre de Helmholtz se décompose sous la forme suivante :

$$\phi(\underline{E}, E) = \bar{\phi}(\underline{\bar{e}}, \bar{E}) + \delta_{\Gamma_0} \bar{\bar{\phi}}(\underline{\bar{u}}, \bar{E}), \quad (2.12)$$

où la partie régulière $\bar{\phi}$ correspond à la densité surfacique d'énergie libre hors de la discontinuité, et la partie singulière $\bar{\bar{\phi}}$ correspond à la densité linéique d'énergie libre

localisée sur Γ_0 . Le tenseur $\underline{\underline{\bar{e}}}$ correspond aux déformations de Green-Lagrange associées à $\underline{\underline{\bar{E}}}$, et $E = (\bar{E}, \bar{\bar{E}})$ désigne des variables internes, avec \bar{E} désignant celles associées au milieu continu, et $\bar{\bar{E}}$ désigne celles associées à Γ_0 . Les expressions des énergies libres et des variables d'état seront détaillées dans les parties suivantes.

À partir de l'expression de ϕ , on peut expliciter la dissipation. Dans un cas isotherme (c'est là sûrement une hypothèse restrictive), la puissance dissipée au niveau du voisinage S_d est donnée par :

$$\mathcal{D}_{S_d} = \int_{S_d} \underline{\underline{P}} : \dot{\underline{\underline{E}}} - \dot{\phi} \, dS_0, \quad (2.13)$$

où $\underline{\underline{P}}$ désigne le premier tenseur des tensions de Piola-Kirchhoff, et $(\dot{\cdot})$ désigne la dérivée temporelle matérielle. Soit \underline{t}_{Γ_0} le vecteur traction nominal sur Γ_0 ⁽¹⁾, alors, l'équilibre de la discontinuité impose :

$$\underline{t}_{\Gamma_0} = \underline{\underline{P}}_{\Gamma_0} \cdot \underline{N}, \quad (2.14)$$

où $\underline{\underline{P}}_{\Gamma_0}$ désigne la restriction de $\underline{\underline{P}}$ à Γ_0 .

D'après les équations (2.6) et (2.7), la dissipation se met donc sous la forme :

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{S_d} &= \int_{S_d} \underline{\underline{P}} : \dot{\underline{\underline{E}}} - \dot{\phi} \, dS_0 + \int_{\Gamma_0} \underline{\underline{P}} : \left(\dot{\underline{\underline{u}}} \otimes \underline{N} \right) - \dot{\bar{\phi}} \, d\Gamma_0 \\ &= \int_{S_d} \underbrace{\underline{\underline{P}} : \dot{\underline{\underline{E}}} - \dot{\phi}}_{\bar{\mathcal{D}}} \, dS_0 + \int_{\Gamma_0} \underbrace{\underline{t}_{\Gamma_0} \cdot \dot{\underline{\underline{u}}} - \dot{\bar{\phi}}}_{\bar{\bar{\mathcal{D}}}} \, d\Gamma_0. \end{aligned} \quad (2.15)$$

La dissipation se décompose donc sous la forme d'une dissipation volumique $\bar{\mathcal{D}}$ associée à la dissipation hors de la discontinuité, et une dissipation surfacique $\bar{\bar{\mathcal{D}}}$ sur Γ_0 , qui correspond à l'énergie dissipée localisée. Par ailleurs, l'expression de la dissipation localisée met en évidence que le comportement au niveau de la surface de localisation est caractérisé par le vecteur traction \underline{t}_{Γ_0} et le saut de déplacement $\underline{\underline{u}}$. Toutefois, \underline{t}_{Γ_0} et $\underline{\underline{u}}$ ne sont pas des grandeurs objectives, et nous devons donc en tenir compte lorsque nous allons caractériser le comportement de la surface de localisation.

La décomposition de l'énergie libre sous la forme donnée dans l'équation (2.12) nous a donc permis d'associer la dissipation localisée à une dissipation surfacique. Par ailleurs, elle permet de caractériser séparément le comportement de la zone de

1. \underline{t}_{Γ_0} correspond aux tensions nominales qui sont transmises à travers l'interface Γ_0 , où on entend par tensions nominales les tensions correspondant au tenseur des tensions de Piola-Kirchhoff I, qui sont les tensions en configuration actuelle par unité de longueur mesurée en configuration de référence.

localisation et le comportement du milieu continu hors de la discontinuité. L'objectif de la suite de cette partie est de caractériser chacun de ces deux comportements.

2.2.2 Comportement du milieu continu (hors discontinuité)

En faisant l'hypothèse que la présence de la surface de discontinuité ne modifie pas le comportement du milieu continu, le comportement du milieu continu hors de la surface de discontinuité va donc rester le même avant et après l'apparition d'une discontinuité. On choisit ici de modéliser le comportement du milieu continu de la membrane hors de la surface de discontinuité avec le modèle d'endommagement développé dans le chapitre 2, mais on aurait pu très bien considérer aussi celui du chapitre 3. Nous allons en rappeler ici seulement les grandes lignes. L'objectif est de mettre en évidence comment les grandeurs introduites dans la cinématique de la membrane développée dans la section 2.1 sont introduites dans le modèle de comportement du milieu continu.

De manière générale, dans toute la suite, nous noterons les grandeurs associées au milieu continu surmontées d'une barre ($\overline{\{\cdot\}}$).

Le milieu continu hors de la surface de discontinuité est le domaine $S_0 \setminus \Gamma_0$. Nous avons vu que sur ce domaine le gradient de transformation est donné par $\underline{\underline{F}} = \overline{\underline{\underline{F}}}$ (équ. 2.7). Le tenseur des déformations de Green-Lagrange $\underline{\underline{e}}$ associé au milieu continu est défini hors de Γ_0 et est alors donné par :

$$\underline{\underline{e}} = \frac{1}{2}(\overline{\underline{\underline{F}}}^T \cdot \overline{\underline{\underline{F}}} - \underline{\underline{1}}_s^0). \quad (2.16)$$

On conserve donc le modèle d'endommagement du chapitre 2, en tenant simplement compte du fait que la variable d'état qui caractérise l'état de déformation est le tenseur $\underline{\underline{e}}$, car il tient compte de l'influence qu'ont les sauts de déplacements sur les déformations, dans le voisinage de la discontinuité (ce voisinage étant la surface S_d introduite dans la partie 2.1).

Les variables d'état sont donc le tenseur des déformations $\underline{\underline{e}}$ et la variable d'endommagement d . La densité surfacique d'énergie libre de Helmholtz $\overline{\varphi}$ sur la configuration de référence est définie hors de la discontinuité Γ_0 par :

$$\forall \underline{\underline{X}} \in S_0 \setminus \Gamma_0, \quad \overline{\varphi}(\underline{\underline{e}}, d) = (1 - d)\overline{\varphi}_e(\underline{\underline{e}}), \quad (2.17)$$

où $\overline{\varphi}_e$ est la densité surfacique d'énergie libre de Helmholtz d'une membrane hyperélastique.

Les variables duales de $\bar{\underline{\underline{e}}}$ et d sont données par les équations d'état :

$$\begin{cases} \underline{\underline{\pi}} = \frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial \bar{\underline{\underline{e}}}} = (1-d) \frac{\partial \bar{\Phi}_e}{\partial \bar{\underline{\underline{e}}}} \\ Y = -\frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial d} = \bar{\Phi}_e \end{cases} \quad (2.18)$$

où $\underline{\underline{\pi}}$ est la variable associée à $\bar{\underline{\underline{e}}}$ et correspond au second tenseur des tensions de Piola-Kirchhoff (résultante de la contrainte interne de Piola-Kirchhoff le long de l'épaisseur), et Y est la variable associée à d et correspond à la densité surfacique de taux de restitution d'énergie.

Il est important de noter que la relation (2.18)₁ implique que les tensions sont transportées cinématiquement par $\bar{\underline{\underline{E}}}$.

La fonction seuil d'endommagement est donnée par :

$$\bar{f} = Y - \kappa(d), \quad (2.19)$$

où κ est toujours la fonction d'endommagement donnée par :

$$\kappa(d) = Y_D + Y_C d. \quad (2.20)$$

Dans le cadre standard de la mécanique de l'endommagement continu, on a vu dans le chapitre 2 que la loi d'évolution de l'endommagement est alors donnée par :

$$\begin{cases} d = [\kappa^{-1}(Y^{max})]^+ \\ Y^{max}(t) = \max \{Y(\tau), \tau \leq t\}, \end{cases} \quad (2.21)$$

où κ^{-1} désigne la fonction réciproque de κ et $[\cdot]^+$ désigne les crochets de Macauley définis par :

$$\begin{cases} [X]^+ = X \text{ si } X > 0 \\ [X]^+ = 0 \text{ si } X \leq 0. \end{cases} \quad (2.22)$$

2.2.3 Comportement de la surface de discontinuité

La partie 2.2.1 a mis en évidence l'analogie qu'il y a entre la description du comportement du milieu continu et de la discontinuité, où pour cette dernière on a introduit des variables d'état, un potentiel d'état, et on a explicité la dissipation surfacique associée. Ainsi, en appliquant les mêmes principes thermodynamiques que pour le mi-

lieu continu, on va construire de façon similaire le modèle de comportement de la discontinuité. À la différence du milieu continu, il faudra toutefois ajouter les conditions d’introduction de la discontinuité et son orientation. La condition d’introduction de la discontinuité devra coïncider avec la fonction seuil qu’on choisit pour la discontinuité.

Le développement du modèle de comportement de la discontinuité va nous permettre d’établir la loi cohésive qui relie le vecteur traction au saut de déplacement. Une difficulté se pose alors, car, dans notre cas où la membrane subit de grands déplacements et de grandes déformations, il faut garantir l’objectivité de la loi (invariance par changement de référentiel). Différentes approches ont été proposées pour définir des lois cohésives dans le cas de grands déplacements et de grandes déformations (Wells *et al.*, 2002; Gasser & Holzapfel, 2003; Armero & Linder, 2008).

Pour définir la loi cohésive, nous employons la méthode proposée par Armero & Linder (2008). Leur approche consiste à définir la loi cohésive sur la configuration matérielle (configuration de référence). L’opération de *push-forward* (Abraham *et al.*, 1988) permet ensuite d’obtenir les vecteurs de traction et de saut de déplacement spatiaux (ou physiques). Le saut de déplacement spatial correspond au saut de déplacement que nous avons introduit dans la cinématique d’une discontinuité forte, et le vecteur traction spatial doit vérifier les relations d’équilibre que nous établirons dans la partie 2.3.

Dans la suite de cette partie, nous définissons donc tout d’abord les vecteurs tractions et de saut de déplacement matériels (objectifs). Nous définissons ensuite les lois cohésives. Enfin nous établirons les critères d’introduction et d’orientation de la discontinuité.

2.2.3.1 Transport du vecteur traction et du saut de déplacement

L’objectif de cette partie est de définir les grandeurs objectives associées au vecteur traction \underline{t}_{Γ_0} et au saut de déplacement $\overline{\underline{u}}$, qui vont nous permettre de caractériser le comportement de la discontinuité.

Depuis la configuration courante $\overline{\mathcal{S}}$, on peut appliquer une opération de *pull-back* à $\overline{\underline{u}}$ pour définir un vecteur saut de déplacement matériel $\overline{\underline{U}}$. Dans ce modèle nous avons choisi de prendre $\overline{\underline{F}}$ comme opérateur de *pull-back* et *push-forward* sur Γ_0 . Ce choix a des conséquences que nous soulignerons par la suite.

On définit alors le vecteur saut de déplacement matériel $\overline{\underline{U}}$ par :

$$\overline{\underline{U}} = \overline{\underline{F}}^{-1} \cdot \overline{\underline{u}}. \quad (2.23)$$

Dans la partie 2.2.1, nous avons introduit la densité linéique d'énergie libre de Helmholtz $\bar{\phi}$ associée à la discontinuité dans la configuration de référence. À partir des lois d'état on définit alors la variable duale de $\bar{\underline{U}}$ qui est le vecteur traction matériel \underline{T}_{Γ_0} . À partir d'une opération de *push-forward* on obtient alors le vecteur traction nominal \underline{t}_{Γ_0} (on emploie le terme nominal pour désigner le fait qu'il s'agit de tensions définies par unité de longueur dans la configuration de référence) dans la configuration courante $\bar{\underline{S}}$:

$$\underline{t}_{\Gamma_0} = \bar{\underline{F}}^{-T} \cdot \underline{T}_{\Gamma_0}. \quad (2.24)$$

Remarque :

Dans les équations (2.23) et (2.24), on emploie des opérateurs différents pour transporter les sauts de déplacement et les vecteurs tractions, car les sauts de déplacement sont des vecteurs covariants, tandis que les vecteurs tractions sont des vecteurs contravariants.

2.2.3.2 Loi cohésive

Nous allons développer le modèle de la loi cohésive de la discontinuité dans le cadre de la thermodynamique des processus irréversibles pour les interfaces. Le formalisme est analogue à celui de la thermodynamique des processus irréversibles pour les milieux continus, qui s'applique en particulier à la mécanique de l'endommagement continu.

Nous souhaitons modéliser une rupture quasi-fragile de la membrane. On suppose donc que les mécanismes dissipatifs dans la zone de localisation correspondent à la formation de microfissures et de microporosités, et à leur coalescence. Pour cela, on modélise le comportement de l'interface avec une loi cohésive rigide-endommageable adoucissante. On modélise le comportement de l'interface avec deux lois cohésives indépendantes pour la séparation des surfaces cohésives selon les modes I (ouverture) et II (glissement).

Dans la suite, on détaille la formulation des lois cohésives, puis, dans la partie suivante, on définit les critères d'apparition (activation) et d'orientation de l'interface.

Afin d'assurer l'objectivité du modèle de l'interface, on se place dans la configuration matérielle S_0 . Pour distinguer le comportement de l'interface selon les deux modes de séparation (I et II), on va distinguer les composantes du vecteur saut de déplacement et du vecteur traction selon les directions normales (pour le mode I) et tangentielles (mode II). Dans la partie 2.1 on a introduit le vecteur normal \underline{N} , on introduit ici le vecteur \underline{M} qui est unitaire et tangent à Γ_0 (Figure 2.3). On décompose alors le saut de déplacement

et le vecteur traction matériels suivant ces deux directions :

$$\begin{cases} \bar{\underline{U}} = \alpha_N \underline{N} + \alpha_M \underline{M} \\ T_{\Gamma_0} = t_N \underline{N} + t_M \underline{M}. \end{cases} \quad (2.25)$$

Remarque :

Il est important de noter ici que, à cause du choix que nous avons fait d'utiliser $\bar{\underline{F}}$ pour appliquer les opérations de *pull-back* et *push-forward*, alors, α_N et α_M , et leur duales t_N et t_M , ne sont pas liés à des modes d'ouverture et de glissement de la fissure cohésive, car celle-ci est transportée, non pas par $\bar{\underline{F}}$, mais par $\hat{\underline{F}}$.

Pour modéliser un comportement rigide-endommageable adoucissant de l'interface, on choisit les variables d'états associées à l'interface comme étant le saut de déplacement matériel $\bar{\underline{U}}$, les modules de souplesse Q_N et Q_M associés aux directions \underline{N} et \underline{M} , respectivement, et les variables d'érouissage (ou d'adoucissement) $\bar{\bar{\zeta}}_N$ et $\bar{\bar{\zeta}}_M$ associées aux directions \underline{N} et \underline{M} , respectivement.

On définit ensuite le potentiel d'état. Dans la partie 2.2.1, nous avons introduit $\bar{\bar{\phi}}$, la densité linéique d'énergie libre de l'interface, définie par unité de longueur de la ligne moyenne Γ_0 . Elle est donnée par :

$$\bar{\bar{\phi}}(\bar{\underline{U}}, Q_N, Q_M, \bar{\bar{\zeta}}_N, \bar{\bar{\zeta}}_M) = \frac{1}{2} \bar{\underline{U}} \cdot \underbrace{(Q_N \underline{N} \otimes \underline{N} + Q_M \underline{M} \otimes \underline{M})^{-1}}_{\bar{\bar{Q}}^{-1}} \cdot \bar{\underline{U}} + \Xi(\bar{\bar{\zeta}}_N, \bar{\bar{\zeta}}_M). \quad (2.26)$$

avec Ξ le potentiel d'érouissage que l'on choisit de la forme :

$$\Xi(\bar{\bar{\zeta}}_N, \bar{\bar{\zeta}}_M) = - \sum_{i=N,M} t_c \bar{\bar{\zeta}}_i - G_c \exp\left(-\frac{t_c}{G_c} \bar{\bar{\zeta}}_i\right) \quad (2.27)$$

où t_c est la tension maximum en mode I et II, sa valeur est calculée automatiquement en fonction du critère d'activation de l'interface, que nous introduisons plus bas, et G_c est la densité linéique d'énergie de fissuration, elle correspond à l'énergie dissipée pour séparer entièrement une unité de surface de la discontinuité. L'expression que nous avons choisie pour Ξ dans l'équation (2.27), est classiquement utilisée pour modéliser une rupture quasi-fragile (de Borst *et al.*, 2004). Nous avons choisi les mêmes paramètres G_c pour les modes I et II. Il s'agit ici seulement d'un premier choix, et on pourra par la suite considérer des valeurs différentes.

Les équations d'état permettent alors de définir les variables duales associées aux variables d'états :

$$\left\{ \begin{array}{l} T_{\Gamma_0} = \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial \bar{U}} = \underbrace{\frac{\partial \bar{\phi}}{\partial \alpha_N}}_{t_N} N + \underbrace{\frac{\partial \bar{\phi}}{\partial \alpha_M}}_{t_M} M = \frac{\alpha_N}{Q_N} N + \frac{\alpha_M}{Q_M} M \\ \bar{Y}_i = -\frac{\partial \bar{\phi}}{\partial Q_i} = \frac{1}{2} t_i^2, \quad i \in \{N, M\} \\ \bar{q}_i = -\frac{\partial \bar{\phi}}{\partial \bar{\xi}_i} = t_c \left(1 - \exp \left(-\frac{t_c}{G_c} \bar{\xi}_i \right) \right), \quad i \in \{N, M\}. \end{array} \right. \quad (2.28)$$

On établit les lois d'évolution des variables d'état internes dans le cadre d'un modèle non-associé. Dans le cadre d'un modèle non-associé, les fonctions seuils, qui indiquent quand a lieu la dissipation, et les potentiels de dissipation, qui indiquent comment s'opère la dissipation, sont distincts⁽²⁾. On définit une fonction seuil \bar{f}_i et un potentiel de dissipation \bar{F}_i pour chacun des deux modes de séparation de l'interface :

$$\left\{ \begin{array}{l} \bar{f}_N(t_N, \bar{q}_N) = t_N - (t_c - \bar{q}_N) \\ \bar{f}_M(t_M, \bar{q}_M) = |t_M| - (t_c - \bar{q}_M) \\ \bar{F}_i(t_i, \bar{q}_i) = |t_i| \left(2 - \ln \left(\frac{|t_i|}{t_c} \right) \right) - (t_c - \bar{q}_i), \quad i \in \{N, M\}. \end{array} \right. \quad (2.29)$$

Les lois d'évolution des variables d'état internes sont alors données par les lois normales :

$$\left\{ \begin{array}{l} \dot{\bar{\xi}}_i = \bar{\lambda}_i \frac{\partial \bar{F}_i}{\partial \bar{q}_i} = \bar{\lambda}_i, \quad i \in \{N, M\} \\ \dot{Q}_i = \bar{\lambda}_i \frac{\partial \bar{F}_i}{\partial Y_i} = \frac{\bar{\lambda}_i}{t_i} \frac{\partial \bar{F}_i}{\partial t_i} = \frac{\bar{\lambda}_i}{|t_i|} \left(1 - \ln \left(\frac{|t_i|}{t_c} \right) \right), \quad i \in \{N, M\}, \end{array} \right. \quad (2.30)$$

associées aux conditions de charge-décharge :

$$\forall i \in \{N, M\}, \quad \left\{ \begin{array}{l} \bar{\lambda}_i \geq 0 \\ \bar{f}_i \leq 0 \\ \bar{\lambda}_i \bar{f}_i = 0, \end{array} \right. \quad (2.31)$$

où \dot{v} désigne la dérivée temporelle matérielle de la grandeur v .

2. Dans le cadre des modèles dits *associés*, les fonctions seuils et les potentiels de dissipation sont les mêmes fonctions. C'est l'hypothèse qui est faite dans le cadre standard.

Dans notre cas, nous intégrons analytiquement les lois d'évolution données dans l'équation (2.30). En condition de charge dans un mode donné ($\bar{\lambda}_i > 0$), c'est-à-dire lorsque la dissipation a lieu pour ce mode de séparation de l'interface, d'après l'équation (2.31)₃, on a :

$$\bar{f}_i = 0. \quad (2.32)$$

D'après les équations (2.28)₃, (2.29)₁, et (2.29)₂, on a alors :

$$|t_i| = t_c \exp\left(-\frac{t_c}{G_c} \bar{\xi}_i\right) \quad i \in \{N, M\}. \quad (2.33)$$

Ainsi, d'après l'équation (2.30), la loi d'évolution des modules de souplesse est donnée par :

$$\dot{Q}_i = \frac{\dot{\bar{\xi}}_i}{t_c} \exp\left(\frac{t_c}{G_c} \bar{\xi}_i\right) \left(1 + \frac{t_c}{G_c} \bar{\xi}_i\right) \quad i \in \{N, M\}. \quad (2.34)$$

Après intégration, les lois d'évolution des modules $\{Q_i\}_{i \in \{N, M\}}$ sont données par :

$$Q_i = \frac{\bar{\xi}_i}{t_c} \exp\left(\frac{t_c}{G_c} \bar{\xi}_i\right) \quad i \in \{N, M\}. \quad (2.35)$$

Les fonctions seuils sont alors données par :

$$\bar{f}_i = \left(\frac{|\alpha_i|}{\bar{\xi}_i} - 1\right) t_c \exp\left(-\frac{t_c}{G_c} \bar{\xi}_i\right). \quad (2.36)$$

On a alors :

$$\bar{\xi}_i(t) = \max_{\tau \leq t} \{|\alpha_i(\tau)|\}. \quad (2.37)$$

Les équations d'évolution de Q_i et $\bar{\xi}$ données par (2.35) et (2.37) sont équivalentes aux équations d'évolution données par (2.30) et (2.31). Toutefois, lorsque les lois de comportement sont approximées numériquement, le choix de l'une ou l'autre de ces formes des équations d'évolution ne mène pas nécessairement aux mêmes modèles.

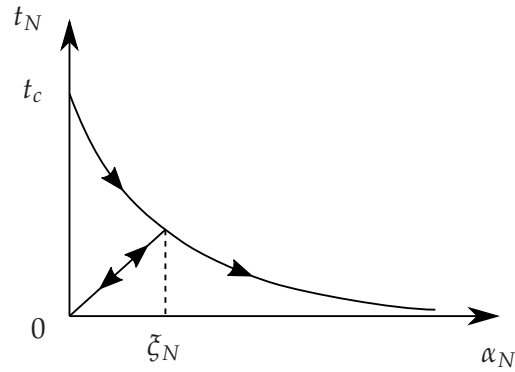


Figure 2.5 – Loi cohésive associée au mode I. Les flèches représentent le sens de parcours sur la courbe pour une évolution de α_N donnée.

Enfin, on exprime la loi cohésive dans la configuration courante à partir de l'opération de *push-forward*. On obtient alors la décomposition des vecteurs spatiaux suivante :

$$\begin{cases} \bar{\underline{u}} = \alpha_N \underline{n}^\# + \alpha_M \underline{m}^\# \\ \underline{t}_{\Gamma_0} = t_N \underline{n}^b + t_M \underline{m}^b, \end{cases} \quad (2.38)$$

où sont introduites les bases suivantes :

$$\begin{aligned} \underline{n}^\# &= \underline{\underline{F}} \cdot \underline{N}, & \underline{m}^\# &= \underline{\underline{F}} \cdot \underline{M}, \\ \underline{n}^b &= \underline{\underline{F}}^{-T} \cdot \underline{N}, & \underline{m}^b &= \underline{\underline{F}}^{-T} \cdot \underline{M}. \end{aligned} \quad (2.39)$$

La loi cohésive associée à l'ouverture de la discontinuité selon la direction \underline{N} (mode I) est illustrée en Figure 2.5. Il y est représenté l'évolution de t_N en fonction de α_N dans le cas où l'interface est initialement intacte ($t_N = t_c$) et on impose une évolution de α_N avec un cycle. Le sens de parcours sur la courbe est représenté par les flèches. Au départ, l'interface s'ouvre jusqu'à $\alpha_N = \zeta_N$, on se déplace sur la courbe enveloppe de forme exponentielle car l'interface s'ouvre pour la première fois et elle s'endommage donc. Puis, l'interface se referme jusqu'à $\alpha_N = 0$, elle ne s'endommage pas, son comportement est élastique, l'évolution de t_N en fonction de α_N est linéaire. Puis, lorsque l'interface s'ouvre à nouveau, au départ, son comportement est élastique jusqu'à la précédente valeur maximum de α_N ($\alpha_N = \zeta_N$), puis, au-delà, l'interface s'endommage à nouveau.

2.2.3.3 Critères d'activation et d'orientation de l'interface

Il reste à choisir les critères qui déterminent à quel moment est introduit la surface de discontinuité et quelle est son orientation. Comme nous l'avons vu, dans le cadre de

l'approche que nous avons qualifiée de "discrète", les lois de comportement du milieu continu et de l'interface sont indépendantes. On peut donc choisir un critère d'introduction de la discontinuité qui soit différent de la condition de localisation donnée par la loi de comportement du milieu continu.

Comme nous l'avons vu, on considère des microcapsules formées d'une membrane ayant un endommagement quasi-fragile (i.e. sans déformations permanentes). Nous faisons ici le choix d'un critère classique pour l'activation de l'interface en considérant que la surface de discontinuité apparaît (et donc la localisation), lorsque la variable d'endommagement d atteint une valeur critique d_c (Lemaitre & Desmorat, 2005, p. 31) :

$$d = d_c \Rightarrow \text{localisation.} \quad (2.40)$$

On considère donc que c'est à partir d'un certain seuil de densité de microdéfauts que la localisation se produit. Pour la plupart des matériaux, il est considéré généralement que $0.2 \leq d_c \leq 0.5$ (Lemaitre & Desmorat, 2005, p. 65). Classiquement, la valeur de d_c est déterminée à partir d'un essai de traction sur le matériau (Lemaitre & Desmorat, 2005, p. 31). Toutefois, dans notre cas, un tel essai ne peut pas être réalisé. On choisit donc une valeur de d_c proche de la valeur de d correspondant à la condition de localisation donnée par le modèle d'endommagement (on détermine ce seuil seulement à partir de résultats de simulations et non en faisant une étude complète de localisation). On s'assurera toutefois de prendre d_c inférieur au seuil de localisation D_c pour que la localisation associée au modèle d'endommagement ne précède pas l'introduction de la surface de discontinuité.

On choisit un critère d'orientation de la surface de discontinuité classiquement utilisé pour les modèles d'endommagement isotrope (Lemaitre & Desmorat, 2005, p. 75) : à l'instant et à l'endroit où elle est introduite, la surface de discontinuité est perpendiculaire à la direction de la tension principale maximale du tenseur des tensions de Cauchy. Il s'agit d'un critère particulièrement pertinent pour les matériaux ayant un comportement quasi-fragile comme le type de membrane que l'on considère. Pour des matériaux ayant un comportement plus ductile, on choisit classiquement l'orientation de la surface de discontinuité telle que celle-ci soit dans le plan où la contrainte de cisaillement est maximum.

On peut alors déterminer le vecteur normal unitaire \underline{N} à Γ_0 dans la configuration de référence. En effet, à l'instant où la surface de discontinuité est introduite, comme $\overline{\underline{u}} = \underline{0}$, alors d'après l'équation (2.6) on a $\underline{F} = \hat{\underline{F}}$, qui est continue (en considérant $\hat{\underline{u}} \in C^1$ localement), et donc la discontinuité et sa normale sont définies sans ambiguïté sur la

configuration courante. Sachant que $\hat{\underline{\underline{F}}}^{-T} \cdot \underline{N}$ est un vecteur normal à la discontinuité dans la configuration courante à l'instant d'introduction de la discontinuité, alors, si \underline{n}_I est un vecteur orienté dans la direction de la tension principale maximale du tenseur des tensions de Cauchy, le vecteur \underline{N} est donné par :

$$\underline{N} = \frac{\hat{\underline{\underline{F}}}^T \cdot \underline{n}_I}{|\hat{\underline{\underline{F}}}^T \cdot \underline{n}_I|}. \quad (2.41)$$

Par ailleurs, le critère d'activation (éq. (2.40)) doit coïncider avec le critère d'endommagement de l'interface en mode I donné par $f_N = 0$ (éq. (2.29)). Pour cela, à l'activation, on calcule la valeur de t_c telle que $f_N = 0$. Comme $\bar{\bar{q}}_N = 0$ au moment de l'activation, on a alors :

$$t_c = t_N. \quad (2.42)$$

Or, au moment de l'activation de l'interface, la continuité des tensions au passage de la ligne de discontinuité dans la configuration courante, que l'on notera Γ , donne la relation suivante⁽³⁾ :

$$t_N = \underline{n}^\sharp \cdot \underline{\underline{P}}_{|\Gamma} \cdot \underline{N}, \quad (2.43)$$

avec $\underline{\underline{P}}$ le premier tenseur des tensions de Piola-Kirchhoff, et où $\underline{\underline{P}}_{|\Gamma}$ désigne la restriction de $\underline{\underline{P}}$ à Γ . Ainsi, au moment de l'activation, on a :

$$t_c = \underline{n}^\sharp \cdot \underline{\underline{P}}_{|\Gamma} \cdot \underline{N}. \quad (2.44)$$

Finalement, les paramètres du modèle de comportement de l'interface sont donc d_c et G_c .

2.3 Équilibre de la membrane

Comme dans les chapitres précédents, on suppose que la membrane suit une évolution quasi-statique. Pour clore la formulation théorique du modèle, il reste donc à déterminer les équations d'équilibre de la membrane en présence de discontinuités fortes.

Dans la partie 2.1, nous avons établi le couplage cinématique entre les fluides et la membrane à l'échelle macroscopique. De la même manière, pour le couplage dynamique

3. Nous allons établir plus généralement la relation entre le vecteur traction et les tensions dans le milieu continu, dans la partie 2.3

entre les fluides et la membrane, nous ne considérons qu'une description macroscopique des contraintes visqueuses des fluides interne et externe. Nous considérons donc que de ne pas modéliser finement les variations des contraintes visqueuses au niveau des zones de localisation sur la membrane n'a pas d'impact sur les comportements des fluides et de la membrane à l'échelle macroscopique.

Le saut des contraintes visqueuses de part et d'autre de la membrane correspond au chargement surfacique \underline{q} défini sur la surface moyenne de la membrane. D'après les hypothèses formulées, nous considérons que le chargement \underline{q} est appliqué sur la surface moyenne de la membrane correspondant à la configuration macroscopique \hat{S} . On peut noter ici qu'on considère que le chargement extérieur \underline{q} s'applique sur toute la membrane, et en particulier au niveau des voisinages S_d contenant une discontinuité forte (Figure 2.3). Cette formulation n'est pas classique, car dans la plupart des études avec les discontinuités fortes, le chargement extérieur est souvent considéré comme étant appliqué en dehors des régions où sont présentes les surfaces de discontinuité.

L'équilibre de la membrane implique l'équilibre local du milieu continu, et de la discontinuité. Concernant l'équilibre local de la partie continue, il faut considérer le fait que le tenseur des tensions de Cauchy \underline{T} (résultante de la contrainte interne de Cauchy le long de l'épaisseur) et le vecteur des contraintes surfaciques externes \underline{q} ne sont pas définis sur la même configuration. En effet, nous avons vu que \underline{q} est défini sur la configuration macroscopique \hat{S} (associée au gradient de transformation $\hat{\underline{F}}$) alors que \underline{T} est défini sur la configuration \bar{S} (associée au gradient de transformation $\bar{\underline{F}}$). On écrit donc l'équation d'équilibre local de la partie continue de la membrane sur la configuration de référence :

$$\forall \underline{X} \in S_0 \setminus \Gamma_0, \quad \nabla_s^0 \cdot \underline{P} + \underline{q}_0 = \underline{0}, \quad (2.45)$$

avec ∇_s^0 l'opérateur divergence surfacique sur la configuration de référence, \underline{P} le premier tenseur des tensions de Piola-Kirchhoff correspondant au transport de \underline{T} par $\bar{\underline{F}}$, et \underline{q}_0 est le chargement surfacique par unité de surface dans la configuration de référence, *i.e.* $\underline{q}_0 = \underline{q} \hat{J}_s$ avec \hat{J}_s le jacobien de la transformation de S_0 à \hat{S} .

En ce qui concerne l'équilibre de la discontinuité, il y a continuité du vecteur traction au passage de la discontinuité. Là encore, on écrit cette condition de continuité dans la configuration de référence, et donc on impose la continuité du vecteur traction nominale sur Γ_0 :

$$\forall \underline{X} \in \Gamma_0, \quad \underline{t}_{\Gamma_0} = \underline{P}^+ \cdot \underline{N} = \underline{P}^- \cdot \underline{N}, \quad (2.46)$$

où $\underline{\underline{P}}^+$ et $\underline{\underline{P}}^-$ correspondent aux valeurs limites de $\underline{\underline{P}}$ sur Γ_0 depuis S_d^+ et S_d^- (Figure 2.3), respectivement.

Nous venons de formuler les équations d'équilibre sous forme forte. Comme nous allons discrétiser le problème par la méthode des éléments finis, nous allons reformuler l'équation d'équilibre (2.45) sous forme faible :

$$\forall \hat{\underline{\underline{w}}} \in H^1, \quad \int_{S_0} \underline{\underline{\nabla}}_s^0 \hat{\underline{\underline{w}}} : \underline{\underline{P}} \, dS_0 - \int_{S_0} \hat{\underline{\underline{w}}} \cdot \underline{\underline{q}}_0 \, dS_0 = 0, \quad (2.47)$$

où nous avons intégré sur l'ensemble du domaine S_0 , car il n'y a pas de singularité dans les intégrandes et Γ_0 est de mesure nulle. Pour la suite, on considérera la forme équivalente à l'équation (2.47) donnée par :

$$\forall \hat{\underline{\underline{w}}} \in H^1, \quad \int_{S_0} \underline{\underline{\nabla}}_s^{sym} \hat{\underline{\underline{w}}} : \underline{\underline{\tau}} \, dS_0 - \int_{\hat{S}} \hat{\underline{\underline{w}}} \cdot \underline{\underline{q}} \, d\hat{S} = 0 \quad (2.48)$$

avec $\underline{\underline{\nabla}}_s^{sym} \hat{\underline{\underline{w}}} = (\underline{\underline{\nabla}}_s^0 \hat{\underline{\underline{w}}} \cdot \underline{\underline{F}}^{-1})^{sym}$, où $(\cdot)^{sym}$ désigne la partie symétrique, et $\underline{\underline{\tau}}$ est le tenseur des tensions de Kirchhoff, relié aux tensions nominales $\underline{\underline{P}}$ par la relation :

$$\underline{\underline{\tau}} = \underline{\underline{P}} \cdot \underline{\underline{F}}^T. \quad (2.49)$$

3 Discrétisation du modèle de la membrane

Dans cette partie, on détaille la méthode de discrétisation spatiale du problème de la membrane par la méthode des éléments finis intégrés (EFEM). Comme nous avons développé le modèle de la loi cohésive dans le cadre de la formulation proposée par Armero & Linder (2008), on retrouvera certaines similarités avec leurs développements. Toutefois, l'originalité du développement réalisé ici tient en particulier à ce qu'il s'applique au cas d'une variété différentielle, qu'est la membrane.

La formulation faible du problème d'équilibre de la membrane donnée par l'équation (2.48) est le point de départ de l'application de cette méthode de discrétisation. Nous allons voir que la particularité de la méthode EFEM est que les degrés de libertés associés au saut de déplacement au niveau de la discontinuité ont un caractère local car ils sont associés à un élément, mais les éléments ne partagent pas entre eux ces degrés de libertés (contrairement aux degrés de libertés nodaux). Comme nous l'avons vu, l'approche de cette méthode est donc différente de celle de la méthode XFEM où les degrés de libertés associés au saut de déplacement sont des degrés de libertés globaux partagés entre les éléments.

Dans la suite, on gardera les mêmes notations pour désigner les formes discrétisées des grandeurs introduites jusque là dans ce chapitre.

3.1 Choix des interpolations

La surface S_0 est discrétisée avec N_e éléments triangulaires à trois nœuds S_0^e :

$$S_0 = \bigcup_{n=1}^{N_e} S_0^e. \quad (3.1)$$

Les fonctions de forme nodales N_a sont les fonctions de forme standards, qui sont linéaires dans chaque élément.

La position \underline{X} d'un point dans S_0 est interpolée de manière standard par :

$$\underline{X} = \sum_{a=1}^{N_n} N_a \underline{X}_a. \quad (3.2)$$

où N_n est le nombre de nœuds du maillage, et \underline{X}_a désigne la position \underline{X} du nœud a .

La spécificité de la méthode EFEM est de tenir compte du saut de déplacement induit par la présence d'une discontinuité forte uniquement au niveau des déformations, et non au niveau du champ de déplacement. Cette méthode d'approximation convient donc pour notre formulation, où nous avons considéré que les déplacements macroscopiques $\underline{\hat{u}}$ et le gradient de transformation $\underline{\hat{F}}$ ne sont pas compatibles. Le champ de déplacement peut donc rester de classe $H^1(S_0)$ tandis que les déformations vont porter la singularité induite par la discontinuité forte. La régularité du champ de déplacement est ici en particulier importante pour l'interaction avec le fluide.

On choisit donc d'interpoler $\underline{\hat{u}}$, et le champ test associé $\underline{\hat{w}}$, avec les fonctions de forme standards :

$$\begin{aligned} \underline{\hat{u}} &= \sum_{a=1}^{N_n} N_a \underline{\hat{u}}_a \\ \underline{\hat{w}} &= \sum_{a=1}^{N_n} N_a \underline{\hat{w}}_a \end{aligned} \quad (3.3)$$

où $\underline{\hat{u}}_a$ (respectivement $\underline{\hat{w}}_a$) désigne le déplacement $\underline{\hat{u}}$ (respectivement $\underline{\hat{w}}$) du nœud a . En notant $\underline{\hat{x}}$ la position d'un point matériel sur la configuration courante \hat{S} associée au

champ de déplacement $\underline{\hat{u}}$, on a alors

$$\underline{\hat{x}} = \sum_{a=1}^{N_n} N_a(\underline{X}_a + \underline{\hat{d}}_a). \quad (3.4)$$

Pour le chargement surfacique externe \underline{q} , comme on a choisi de l'associer à la description macroscopique de la membrane, on choisit d'interpoler \underline{q} avec les fonctions de forme standards :

$$\underline{q} = \sum_{a=1}^{N_n} N_a \underline{q}_a, \quad (3.5)$$

où \underline{q}_a désigne la valeur de \underline{q} au niveau du nœud a . Il reste à déterminer l'interpolation pour le saut de déplacement, et pour le gradient de transformation $\underline{\bar{F}}$.

Pour un élément traversé par une discontinuité forte, on doit enrichir l'interpolation du gradient de déplacement. On désignera un tel élément comme un élément *localisé* et on notera un tel élément $S_0^{e,loc}$. On notera par ailleurs $\{S_0^{e,loc}\}$ l'ensemble des éléments localisés. À ce stade, il est important de préciser un point déjà évoqué en remarque dans la partie 2.1 : il faut voir la cinématique introduite dans la partie 2.1 comme la cinématique qui va permettre d'enrichir le gradient de déplacement seulement au niveau d'un élément localisé. Ainsi pour chaque élément localisé, on associe une surface de discontinuité qui lui est propre. En particulier, rien n'impose la continuité de la ligne de discontinuité entre les éléments localisés, ni celle du saut de déplacement.

Comme on introduit autant de surfaces de discontinuités que d'éléments localisés, on adapte ici les notations génériques introduites dans la partie 2.1. Un élément localisé est traversé par une ligne de discontinuité Γ_0^e qui est un segment passant par construction par le centre de l'élément (Figure 3.1). On note $n^{+,e}$ le nœud séparé des deux autres nœuds de l'élément par Γ_0^e (on le qualifera de nœud isolé). Le segment Γ_0^e partage l'élément en deux parties $S_0^{+,e}$ et $S_0^{-,e}$, tel que $S_0^{+,e}$ contient le nœud $n^{+,e}$. Le vecteur \underline{N} est orienté vers $n^{+,e}$. Enfin, on considérera que le saut de déplacement est constant dans l'élément. Les degrés de libertés de l'élément associés au saut de déplacement sont α_N^e et α_M^e tels que :

$$\underline{\bar{U}}_e = \alpha_N^e \underline{N} + \alpha_M^e \underline{M}, \quad (3.6)$$

où $\underline{\bar{U}}_e$ est le saut de déplacement matériel dans l'élément, dont l'unité est en mètre. Les degrés de liberté α_N^e et α_M^e correspondent donc à l'amplitude du saut de déplacement.

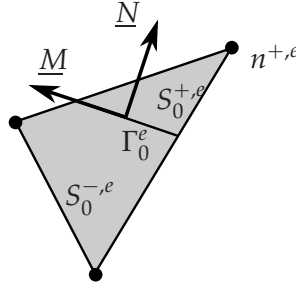


Figure 3.1 – Élément triangulaire à 3 noeuds traversé par la discontinuité Γ_0^e dans la configuration de référence.

ment dans les directions normale et tangentielle, respectivement (dans la configuration matérielle).

Pour l'interpolation de $\underline{\underline{F}}$, dans l'équation (2.7), on choisit d'interpoler φ au niveau d'un élément par :

$$\varphi = N^+, \quad (3.7)$$

où N^+ désigne la fonction de forme associée au nœud isolé $n^{+,e}$. Ainsi, au niveau d'un élément on a :

$$\underline{\underline{F}} = \underline{\underline{1}}_s^0 + \underbrace{\sum_{a=1}^3 \hat{d}_a \otimes \nabla^0 N_a}_{\hat{\underline{\underline{F}}}} - \underline{\underline{F}} \cdot \overline{\underline{\underline{U}}}_e \otimes \nabla^0 N^+, \quad (3.8)$$

où ∇^0 désigne le gradient sur S_0 .

On peut réécrire l'équation (3.8) sous la forme :

$$\underline{\underline{F}} = \hat{\underline{\underline{F}}} + \underline{\underline{F}} \cdot \underline{\underline{F}}, \quad (3.9)$$

avec $\underline{\underline{F}} = -\overline{\underline{\underline{U}}}_e \otimes \nabla^0 N^+$. En explicitant $\underline{\underline{F}}$ on a :

$$\underline{\underline{F}} = \hat{\underline{\underline{F}}}(\hat{d}_a)(\underline{\underline{1}}_s^0 - \underline{\underline{F}}(\alpha_N^e, \alpha_M^e))^{-1}, \quad (3.10)$$

où la dépendance aux degrés de libertés nodaux (\hat{d}_a) et élémentaires (α_N^e, α_M^e) a été explicitée. On obtient finalement une expression explicite de $\underline{\underline{F}}$ au niveau d'un élément :

$$\underline{\underline{F}} = \hat{\underline{\underline{F}}} \cdot \left(\underline{\underline{1}}_s^0 - \frac{1}{1 + \overline{\underline{\underline{U}}}_e \cdot \nabla^0 N^+} \overline{\underline{\underline{U}}}_e \otimes \nabla^0 N^+ \right). \quad (3.11)$$

Remarque :

On notera que dans l'équation (3.11), on retrouve pour $\underline{\underline{F}}$ la même expression que celle obtenue par Armero & Linder (2008, p. 3150).

3.2 Détermination de la base tangente à \bar{S}

Avant de réécrire les équations d'équilibre (2.48) sous forme discrétisée, nous allons déterminer la base tangente locale associée à la configuration courante \bar{S} . En effet, comme plusieurs grandeurs sont de rang deux et tangentes à \bar{S} , et que les dérivées spatiales sont le long de \bar{S} , il est alors plus aisé de mener les calculs dans la base tangente locale. On note $(\bar{a}_\alpha)_\alpha$ la base tangente locale associée à la configuration \bar{S} . Elle est définie par :

$$\bar{a}_\alpha = \underline{\underline{F}} \cdot A^\alpha. \quad (3.12)$$

Avant de développer l'expression de \bar{a}_α , on introduit aussi la base tangente associée à la configuration \hat{S} :

$$\hat{a}_\alpha = \frac{\partial \hat{x}}{\partial \hat{\zeta}_\alpha}, \quad (3.13)$$

avec \hat{x} donné par l'équation (3.4). À partir de l'expression de $\underline{\underline{F}}$ établie dans l'équation (3.11), on obtient alors :

$$\bar{a}_\alpha = \hat{a}_\alpha - \frac{N_{,\alpha}^+}{1 + \mathbf{N}_\bullet^+ T [\mathbf{N}_\bullet \mathbf{M}_\bullet] \alpha^e} \sum_{\gamma=1}^2 [N^\gamma M^\gamma] \alpha^e \hat{a}_\gamma, \quad (3.14)$$

avec $\mathbf{N}_\bullet^+ T = [N_{,1}^+ N_{,2}^+]$, $\mathbf{N}_\bullet T = [N^1 N^2]$, $\mathbf{M}_\bullet T = [M^1 M^2]$, et $\alpha^e = [\alpha_N^e \alpha_M^e]^T$, où $(N^\alpha)_\alpha$ et $(M^\alpha)_\alpha$ désignent les composantes contravariantes de \underline{N} et \underline{M} , respectivement, dans la base tangente $(\underline{A}_\alpha)_\alpha$ associée à la configuration de référence.

3.3 Discrétisation des équations d'équilibre

On peut à présent réécrire les équations d'équilibre données dans les équations (2.46) et (2.48) sous leurs formes discrétisées. Pour l'équation d'équilibre locale au niveau des discontinuités, on peut continuer de l'écrire sous forme forte au niveau de chaque élément localisé, car les déformations, les sauts de déplacement, et le vecteur normal à la discontinuité, sont constants dans l'élément. Les équations d'équilibre globale et locale

sous forme discrétisée sont donc données par :

$$\forall \hat{w}_a^{x_i}, \begin{cases} \sum_{e=1}^{N_e} \hat{w}_a^{x_i} \int_{S_0^e} \bar{\chi}_{a,\alpha\beta}^{x_i} \tau^{\alpha\beta} dS_0 - \sum_{e=1}^{N_e} \hat{w}_a^{x_i} \int_{\hat{S}^e} N_a N_b d\hat{S} q_b^{x_i} = 0 \\ \underline{h}^e := -\underline{\tau}(\underline{\bar{F}}) \cdot \underline{n}^b(\underline{\bar{F}}) + \underline{t}_{r_0}(\underline{\bar{U}}_e) = \underline{0}, \quad \forall e \in \{S_0^{e,loc}\}, \end{cases} \quad (3.15)$$

où $(\cdot)^{x_i}$ désigne les composantes dans une base cartésienne, $(\cdot)_\alpha$ et $(\cdot)^\alpha$ désignent les composantes covariantes et contravariantes dans les bases $(\bar{a}^\alpha)_\alpha$ et $(\bar{a}_\alpha)_\alpha$, respectivement, et :

$$\bar{\chi}_{a,\alpha\beta}^{x_i} = (\bar{a}_\alpha^{x_i} N_{a,\beta})^{sym}, \quad (3.16)$$

où $\bar{a}_\alpha^{x_i}$ désigne les composantes cartésiennes de \bar{a}_α . En projetant les équations (3.15)₂ sur la base $(\underline{n}^\#, \underline{m}^\#)$, on peut réécrire le problème (3.15) sous la forme :

$$\begin{cases} \underbrace{\sum_{e=1}^{N_e} \int_{S_0^e} \mathbf{B}_{\bullet\bullet}^T \boldsymbol{\tau}^{\bullet\bullet} dS_0}_{\mathbf{F}^{int}} - \underbrace{\sum_{e=1}^{N_e} \int_{\hat{S}^e} \mathbf{N}^T \mathbf{N} d\hat{S}}_{\mathbf{M}} \mathbf{q} = \mathbf{0} \\ \mathbf{h}^e := -\underbrace{[\mathbf{n}_\bullet^\# \mathbf{m}_\bullet^\#]^T}_{\boldsymbol{\tau}} \mathbf{n}_\bullet^b \boldsymbol{\tau}^{\bullet\bullet} + \underbrace{[t_N \ t_M]^T}_{\mathbf{t}} = \mathbf{0}, \quad \forall e \in \{S_0^{e,loc}\}, \end{cases} \quad (3.17)$$

avec :

$$\mathbf{B}_{\bullet\bullet} = [\mathbf{B}_{\bullet\bullet 1} \dots \mathbf{B}_{\bullet\bullet N_n}], \quad \boldsymbol{\tau}^{\bullet\bullet T} = [\tau^{11} \ \tau^{22} \ \tau^{12}], \quad \mathbf{N} = [\mathbf{N}_1 \dots \mathbf{N}_{N_n}], \quad \mathbf{q}^T = [\mathbf{q}_1^T \dots \mathbf{q}_{N_n}^T], \quad \mathbf{n}_\bullet^{\# T} = [n_1^\# \ n_2^\#], \quad \mathbf{m}_\bullet^{\# T} = [m_1^\# \ m_2^\#], \quad \text{et } \mathbf{n}_\bullet^b = \begin{bmatrix} n_1^b & 0 \\ 0 & n_2^b \\ n_2^b & n_1^b \end{bmatrix},$$

où :

$$\mathbf{B}_{\bullet\bullet a} = \begin{bmatrix} N_{a,1} & 0 \\ 0 & N_{a,2} \\ N_{a,2} & N_{a,1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1^x & a_1^y & a_1^z \\ a_2^x & a_2^y & a_2^z \end{bmatrix}, \quad \mathbf{N}_a = \begin{bmatrix} N_a & 0 & 0 \\ 0 & N_a & 0 \\ 0 & 0 & N_a \end{bmatrix}, \quad \text{et } \mathbf{q}_a^T = [q_a^x \ q_a^y \ q_a^z].$$

Enfin, dans l'équation (3.17)₁, dans l'expression de \mathbf{F}^{int} , l'intégrande est constante par élément et donc l'intégrale est calculée directement sur chaque élément, et pour \mathbf{M} , pour calculer les intégrales sur chaque élément on utilise une règle de quadrature de Hammer avec six points de Hammer.

3.4 Bilan

À ce stade, résumons les variables et les équations qui constituent le modèle de la membrane.

Les variables qui déterminent l'état de la membrane sont :

- pour la géométrie : les déplacements nodaux $(\hat{d}_a)_{a \in [1, N_n]}$
- pour le milieu continu : la variable d'endommagement d , et les déformations $\bar{\underline{\underline{\epsilon}}}$
- pour les discontinuités : les sauts de déplacement $(\alpha_N^e, \alpha_M^e)_{e \in [1, N_e]}$, et les variables internes (Q_N, Q_M) et $(\bar{\bar{\xi}}_N, \bar{\bar{\xi}}_M)$.

Les équations du modèle de la membrane sont :

- pour l'équilibre : l'équation d'équilibre global (3.17)₁ et les équations d'équilibre des discontinuités (3.17)₂
- pour la "compatibilité cinématique" : la compatibilité entre la déformation du milieu continu, portée par $\bar{\underline{\underline{\epsilon}}}$, les sauts de déplacement $(\alpha_N^e, \alpha_M^e)_{e \in [1, N_e]}$, et la géométrie de la membrane, portée par $(\hat{d}_a)_{a \in [1, N_n]}$, est donnée par l'équation (3.11)
- pour le modèle de comportement du milieu continu : les déformations⁽⁴⁾ sont déterminées à partir de l'équation (2.16), la loi constitutive (qui relie les tensions aux variables d'état) est donnée par l'équation (2.18), et la loi d'évolution de l'endommagement est donnée par l'équation (2.21)
- pour le modèle de comportement des discontinuités : la loi constitutive (qui relie le vecteur traction aux variables d'état) est donnée par l'équation (2.28)₁, et les lois d'évolution des variables internes sont données par les équations (2.37) et (2.35).

Pour la suite, on notera :

$$\hat{\mathbf{d}} = [\hat{\mathbf{d}}_1^T \dots \hat{\mathbf{d}}_{N_n}^T], \boldsymbol{\alpha} = [\alpha^{1,T} \dots \alpha^{N_e,T}]^T, \bar{\bar{\mathbf{Q}}} = [Q_N \ Q_M], \text{ et } \bar{\bar{\boldsymbol{\xi}}} = [\bar{\bar{\xi}}_N \ \bar{\bar{\xi}}_M],$$

avec :

$$\hat{\mathbf{d}}_a = [\hat{d}_a^x \ \hat{d}_a^y \ \hat{d}_a^z]^T, \text{ et } \alpha^e = [\alpha_N^e \ \alpha_M^e]^T.$$

4 Étude de la stabilité de l'équilibre local et régularisation

Dans les chapitres précédents, le problème à résoudre au niveau des éléments de la membrane était le problème d'évolution des variables d'états du milieu continu pour les déplacements des nœuds imposés. Dans ce chapitre, le problème d'évolution local inclus en plus les variables d'état de la discontinuité.

Dans cette partie, nous allons tout d'abord déterminer les conditions dans lesquelles le problème d'évolution local a une unique solution. Nous nous restreignons au cas où l'élément est en traction uniaxiale, et la discontinuité est parallèle à un côté de l'élément.

4. L'équation de compatibilité (3.11) implique qu'au niveau d'un élément, les déformations $\bar{\underline{\underline{\epsilon}}}$ sont complètement déterminées par les déplacements nodaux $(\hat{d}_a)_{a \in [1, N_n]}$ et les sauts de déplacements $(\alpha_N^e, \alpha_M^e)_{e \in [1, N_e]}$.

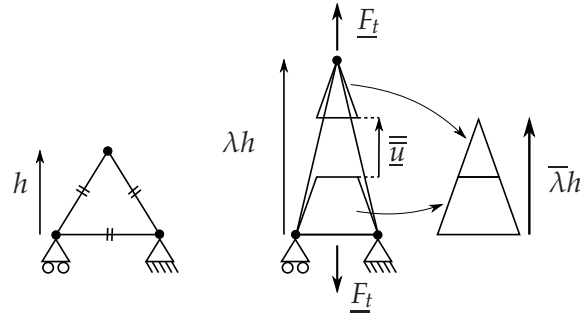


Figure 4.1 – Représentation d'un élément en traction uniaxiale (milieu) selon la direction d'une de ses hauteurs, depuis un état de référence non localisé (gauche). À droite est représenté l'état de déformation du milieu continu associé à l'élément déformé.

À partir de cette étude, nous énumérerons alors plusieurs raisons qui nous amènent à régulariser le problème local. Nous présenterons alors brièvement le problème d'instabilité des structures associé à la nucléation d'une fissure cohésive et présenterons les principales méthodes de régularisation. Nous mettrons alors en œuvre une méthode de régularisation visqueuse.

4.1 Unicité des solutions du problème d'équilibre local

Lorsqu'un élément est localisé, le problème local au niveau de l'élément consiste à déterminer l'évolution du saut de déplacement \bar{u} , des variables internes (ζ_N, ζ_M) , et de l'endommagement d , vérifiant l'équation d'équilibre locale (3.17)₂, et les équations de comportement du milieu continu et de la discontinuité établies dans la section 2.2, pour une évolution donnée de la déformation $\underline{\hat{F}}$ de l'élément.

L'objectif de cette partie est de déterminer les conditions pour lesquelles il y a une unique solution à ce problème. Nous allons ici nous restreindre au cas où l'élément est en traction uniaxiale, et lorsque la discontinuité est parallèle au côté opposé au nœud isolé. Cette étude va permettre d'avoir des premiers éléments quantitatifs sur les conditions d'unicité. Une étude plus générale pour laquelle l'évolution de $\underline{\hat{F}}$ et l'orientation de la discontinuité sont quelconques, reste à être menée.

On considère un élément de hauteur h dans la configuration de référence, auquel on impose une sollicitation de traction uniaxiale dans la direction perpendiculaire à l'un des côtés de l'élément (Figure 4.1). On contrôle l'allongement λ de l'élément dans la direction de traction. On cherche à déterminer les conditions d'unicité des solutions $\alpha_N, \alpha_M, \bar{\zeta}_N, \bar{\zeta}_M$ et de l'endommagement d , une fois que la discontinuité a été introduite, pour une évolution donnée de λ .

Au niveau de la discontinuité, seule la composante normale du tenseur des tensions de Kirchhoff τ_N est non nulle. Ainsi, d'après l'équation d'équilibre locale (3.17)₂, la composante tangentielle du vecteur traction t_M est nulle tout au long du chargement, et donc à tout instant on a $\alpha_M = \bar{\bar{\xi}}_M = 0$. On cherche donc à déterminer les conditions d'unicité de l'évolution de α_N , de $\bar{\bar{\xi}}_N$, et de d .

Dans le cas d'un chargement en traction uniaxiale, les équations du problème local s'écrivent sous les formes suivantes. Tout d'abord, l'équation d'équilibre associée à la direction normale, s'écrit :

$$-\tau_N + t_N = 0. \quad (4.1)$$

Soit $\bar{\lambda}$ l'allongement correspond à la composante du gradient de transformation $\bar{\underline{\underline{F}}}$ dans la direction de traction (Figure 4.1). D'après l'expression de $\bar{\underline{\underline{F}}}$ donnée par l'équation (3.11), l'allongement $\bar{\lambda}$ est lié à l'allongement de l'élément λ et au saut de déplacement normal α_N par la relation :

$$\bar{\lambda} = \frac{\lambda}{1 + \frac{\alpha_N}{h}}. \quad (4.2)$$

Le modèle de comportement du milieu continu (développé dans la section 2.2.2) appliqué au cas considéré ici donne :

$$\left\{ \begin{array}{l} \tau_N = (1 - d)G_s(\bar{\lambda}^2 - \frac{1}{\bar{\lambda}}) \\ d = \frac{[Y^{max} - Y_D]^+}{Y_C} \\ Y^{max} = Y(\bar{\lambda}^{max}) \\ Y = \frac{G_s}{2}(\bar{\lambda}^2 + \frac{2}{\bar{\lambda}} - 3) \\ \bar{\lambda}^{max}(t) = \max \{ \bar{\lambda}(\tau), \tau \leq t \}. \end{array} \right. \quad (4.3)$$

Enfin, le modèle de comportement de la discontinuité (développé dans la section 2.2.3) est donné par les équations suivantes :

$$\begin{cases} t_N = \frac{\alpha_N}{Q_N(\bar{\xi}_N)}, \\ Q_N = \frac{\bar{\xi}_N}{t_c} \exp\left(\frac{t_c}{G_c} \bar{\xi}_N\right), \\ \bar{f}_N = t_N - (t_c - \bar{q}_N), \\ \bar{q}_N = t_c \left(1 - \exp\left(-\frac{t_c}{G_c} \bar{\xi}_N\right)\right), \\ \dot{\bar{\xi}}_N \geq 0, \quad \bar{f}_N \leq 0, \quad \dot{\bar{\xi}}_N \bar{f}_N = 0, \end{cases} \quad (4.4)$$

où la notation \dot{x} désigne la dérivée temporelle de x .

On suppose que la valeur critique de l'endommagement d_c , pour laquelle la discontinuité est introduite, est inférieure à la valeur pour laquelle le modèle d'endommagement est instable. On pourrait montrer que, dans ce cas là, en traction uniaxiale, l'endommagement n'évolue plus une fois que la discontinuité a été introduite. Ainsi, à partir de l'instant t_{loc} d'introduction de la discontinuité, on a $d = d_c$, et le matériau hors discontinuité a un comportement élastique. Les conditions d'unicité vont donc porter uniquement sur l'évolution de α_N et $\bar{\xi}_N$.

Pour établir les conditions d'unicité de l'évolution de α_N et $\bar{\xi}_N$, nous allons suivre la méthode proposée par Jirásek (2000).

On cherche alors à déterminer les conditions pour lesquelles dans un état courant et pour $\dot{\lambda}$ donnés, il existe une unique solution pour $\dot{\alpha}_N$ et $\dot{\bar{\xi}}_N$, tel que les équations (4.1), (4.2), (4.3), et (4.4), soient vérifiées sous leur forme dérivée temporellement. Ainsi, pour la suite, nous allons en particulier considérer l'équation d'équilibre (4.1) sous sa forme dérivée temporellement :

$$-\dot{\tau}_N + \dot{t}_N = 0. \quad (4.5)$$

Dans le chapitre 2, nous avons présenté les quatre cas qui peuvent être rencontrés pour l'évolution de l'endommagement, en fonction des valeurs du multiplicateur de Lagrange $\dot{\eta}$, de la fonction seuil f , et de sa dérivée \dot{f} (voir la Table 2 du chapitre 2). Nous allons réutiliser ces notions dans cette partie où, d'après l'équation (4.4)₅, $\dot{\bar{\xi}}_N$ correspond à $\dot{\eta}$, et \bar{f}_N correspond à f . Ainsi, pour établir les conditions d'unicité, nous allons nous placer dans les quatre cas possibles.

On peut tout d'abord séparer l'étude de l'unicité en deux cas en fonction de la valeur courante de \bar{f}_N :

- si $\bar{f}_N < 0$, la discontinuité se charge et se décharge élastiquement.
- si $\bar{f}_N = 0$, la discontinuité se décharge élastiquement et s'endommage en charge.

On étudie les conditions d'unicité données par le premier cas dans la partie 4.1.1, et celles données par le second cas dans la partie 4.1.2.

Pour la suite, d'après les équations (4.2), (4.3) et (4.5), lorsqu'on écrit $\frac{\partial \tau_N}{\partial \lambda}$ (resp. $\frac{\partial \tau_N}{\partial \alpha_N}$), cela sous-entend qu'on dérive τ_N à α_N (resp. λ) fixé, et lorsqu'on écrit $\frac{\partial t_N}{\partial \alpha_N}$ (resp. $\frac{\partial t_N}{\partial \bar{\xi}_N}$), cela sous-entend qu'on dérive t_N à $\bar{\xi}_N$ (resp. α_N) fixé.

4.1.1 Cas 1 : charge/décharge élastique ($\bar{f}_N < 0$)

On considère ici qu'on est dans un état courant où la discontinuité se charge ou se décharge élastiquement, c'est-à-dire qu'on est dans le cas $\bar{f}_N < 0$.

D'après l'équation (4.4)₅, on a donc :

$$\dot{\bar{\xi}}_N = 0. \quad (4.6)$$

La solution pour $\dot{\bar{\xi}}_N$ est donc unique.

Pour α_N , l'équation d'équilibre (4.5) nous donne :

$$\frac{\partial \tau_N}{\partial \lambda} \dot{\lambda} + \left(\frac{\partial \tau_N}{\partial \alpha_N} - \frac{\partial t_N}{\partial \alpha_N} \right) \dot{\alpha}_N = 0. \quad (4.7)$$

On obtient alors :

$$\dot{\alpha}_N = - \left(\frac{\partial \tau_N}{\partial \alpha_N} - \frac{\partial t_N}{\partial \alpha_N} \right)^{-1} \frac{\partial \tau_N}{\partial \lambda} \dot{\lambda}. \quad (4.8)$$

Pour que $\dot{\alpha}_N$ soit unique, il faut que $\left(\frac{\partial \tau_N}{\partial \alpha_N} - \frac{\partial t_N}{\partial \alpha_N} \right)^{-1}$ ne soit pas singulier.

Or, d'après l'équation (4.4)₁, on a tout d'abord :

$$\frac{\partial t_N}{\partial \alpha_N} = \frac{1}{Q_N}. \quad (4.9)$$

Ainsi :

$$\left(\frac{\partial \tau_N}{\partial \alpha_N} - \frac{\partial t_N}{\partial \alpha_N} \right)^{-1} = \frac{Q_N}{Q_N \frac{\partial \tau_N}{\partial \alpha_N} - 1}. \quad (4.10)$$

Par ailleurs, d'après l'équation (4.3)₁, on a :

$$\frac{\partial \tau_N}{\partial \alpha_N} = -\frac{(1-d_c)G_s}{h} \left(2 \frac{\lambda^2}{\left(1 + \frac{\alpha_N}{h}\right)^3} + \frac{1}{\lambda} \right), \quad (4.11)$$

et comme $\lambda > 0$ et $\alpha_N \geq 0$, on a donc :

$$\frac{\partial \tau_N}{\partial \alpha_N} < 0. \quad (4.12)$$

Ainsi, comme $Q_N \geq 0$ (voir éq. (4.4)₂, sachant que $\xi_N \geq 0$), dans l'équation (4.10) on a donc finalement :

$$Q_N \frac{\partial \tau_N}{\partial \alpha_N} - 1 < 0. \quad (4.13)$$

Finalement, les solutions pour $\dot{\alpha}_N$ et $\dot{\xi}_N$ sont uniques dans le cas où $\bar{f}_N < 0$, et elles sont données par les équations (4.8) et (4.6), respectivement.

4.1.2 Cas 2 : décharge élastique et charge avec endommagement ($\bar{f}_N = 0$)

On considère ici qu'on est dans un état courant où la discontinuité peut se décharger élastiquement, ou s'endommager en charge, c'est-à-dire qu'on est dans le cas où $\bar{f}_N = 0$.

D'après l'équation (4.4)₅, on a donc :

$$\begin{cases} \dot{\xi}_N \geq 0 \\ \dot{f}_N \leq 0. \end{cases} \quad (4.14)$$

On va chercher les solutions du problème, en séparant l'étude en deux cas complémentaires :

$$\begin{aligned} \dot{\xi}_N = 0 \quad \text{et} \quad \dot{f}_N \leq 0 & \quad : \text{décharge élastique} \\ \dot{\xi}_N \geq 0 \quad \text{et} \quad \dot{f}_N = 0 & \quad : \text{charge avec endommagement (de la discontinuité)} \end{aligned} \quad (4.15)$$

où ces deux cas sont les mêmes seulement lorsque $\dot{\xi}_N = 0$ et $\dot{f}_N = 0$ (chargement neutre).

Nous allons voir que les solutions associées à ces deux cas ne sont pas les mêmes de manière générale, mais elles sont uniques dans chacun des cas. Ainsi, pour qu'il y ait une unique solution au problème, il faut que les solutions en charge et en décharge

n'existent pas en même temps, mais, il faut qu'il y ait au moins une des deux solutions qui existe, et il faut que les deux solutions se raccordent dans le cas du chargement neutre.

L'objectif des parties suivantes est donc de montrer que les solutions en charge et en décharge sont différentes, et de déterminer leurs conditions d'existence. Nous déterminerons ensuite les conditions d'unicité de la solution.

4.1.2.1 Cas 2.1 : décharge élastique ($\dot{\bar{\xi}}_N = 0, \dot{\bar{f}}_N \leq 0$)

On considère ici le cas où la discontinuité se décharge élastiquement. On cherche donc les solutions qui vérifient les équations du problème dans le cas où :

$$\dot{\bar{\xi}}_N = 0 \quad (4.16)$$

D'après l'équation d'équilibre (4.5), l'évolution de $\dot{\alpha}_N$ est alors donnée par :

$$\dot{\alpha}_N = - \left(\frac{\partial \tau_N}{\partial \alpha_N} - \frac{\partial t_N}{\partial \alpha_N} \right)^{-1} \frac{\partial \tau_N}{\partial \lambda} \dot{\lambda}. \quad (4.17)$$

D'après le cas de la partie 4.1.1, la solution $\dot{\alpha}_N$ est unique si elle existe.

Enfin, pour que les solutions $\dot{\alpha}_N$ et $\dot{\bar{\xi}}_N$ existent, il faut qu'elles vérifient la dernière équation du problème que nous n'avons pas utilisée, c'est-à-dire la condition d'admissibilité (4.4)₅ :

$$\dot{\bar{f}}_N \leq 0 \quad (4.18)$$

Ainsi, les solutions $\dot{\alpha}_N$ et $\dot{\bar{\xi}}_N$ que nous avons déterminées sont solutions du problème si l'inégalité suivante est vérifiée :

$$-\frac{\partial t_N}{\partial \alpha_N} \left(\frac{\partial \tau_N}{\partial \alpha_N} - \frac{\partial t_N}{\partial \alpha_N} \right)^{-1} \frac{\partial \tau_N}{\partial \lambda} \dot{\lambda} \leq 0, \quad (4.19)$$

où on a utilisé les équations (4.4)₁, (4.4)₃, (4.4)₄, (4.16), (4.17), et (4.18).

4.1.2.2 Cas 2.2 : charge avec endommagement ($\dot{\bar{\xi}}_N \geq 0, \dot{\bar{f}}_N = 0$)

On considère ici le cas où la discontinuité se charge en s'endommageant. On cherche donc les solutions qui vérifient les équations du problème dans le cas où :

$$\dot{\bar{f}}_N = 0. \quad (4.20)$$

Déterminons les expressions de $\dot{\alpha}_N$ et $\dot{\bar{\zeta}}_N$. D'après l'équation d'équilibre (4.5), on a :

$$\dot{\alpha}_N = - \left(\frac{\partial \tau_N}{\partial \alpha_N} - \frac{\partial t_N}{\partial \alpha_N} \right)^{-1} \left(\frac{\partial \tau_N}{\partial \lambda} \dot{\lambda} - \frac{\partial t_N}{\partial \bar{\zeta}_N} \dot{\bar{\zeta}}_N \right). \quad (4.21)$$

Par ailleurs, d'après les équations (4.4)₁, (4.4)₃, (4.4)₄, et (4.20), on a :

$$\dot{\bar{\zeta}}_N = - \left(\frac{\partial t_N}{\partial \bar{\zeta}_N} + \frac{d\bar{q}_N}{d\bar{\zeta}_N} \right)^{-1} \frac{\partial t_N}{\partial \alpha_N} \dot{\alpha}_N. \quad (4.22)$$

Ainsi, d'après les équations (4.21) et (4.22) on obtient les évolutions de $\dot{\alpha}_N$:

$$\dot{\alpha}_N = - \left[\frac{\partial \tau_N}{\partial \alpha_N} - \frac{\partial t_N}{\partial \alpha_N} + \frac{\partial t_N}{\partial \bar{\zeta}_N} \left(\frac{\partial t_N}{\partial \bar{\zeta}_N} + \frac{d\bar{q}_N}{d\bar{\zeta}_N} \right)^{-1} \frac{\partial t_N}{\partial \alpha_N} \right]^{-1} \frac{\partial \tau_N}{\partial \lambda} \dot{\lambda}, \quad (4.23)$$

et de $\dot{\bar{\zeta}}_N$:

$$\dot{\bar{\zeta}}_N = \left(\frac{\partial t_N}{\partial \bar{\zeta}_N} + \frac{d\bar{q}_N}{d\bar{\zeta}_N} \right)^{-1} \frac{\partial t_N}{\partial \alpha_N} \left[\frac{\partial \tau_N}{\partial \alpha_N} - \frac{\partial t_N}{\partial \alpha_N} + \frac{\partial t_N}{\partial \bar{\zeta}_N} \left(\frac{\partial t_N}{\partial \bar{\zeta}_N} + \frac{d\bar{q}_N}{d\bar{\zeta}_N} \right)^{-1} \frac{\partial t_N}{\partial \alpha_N} \right]^{-1} \frac{\partial \tau_N}{\partial \lambda} \dot{\lambda}. \quad (4.24)$$

Les solutions pour $\dot{\alpha}_N$ et $\dot{\bar{\zeta}}_N$ sont alors uniques si les termes que nous avons inversés sont bien réguliers.

Enfin, pour que les solutions $\dot{\alpha}_N$ et $\dot{\bar{\zeta}}_N$ existent, il faut qu'elles vérifient la dernière équation du problème que nous n'avons pas utilisée, c'est-à-dire, d'après l'équation (4.4)₅ :

$$\dot{\bar{\zeta}}_N \geq 0. \quad (4.25)$$

Ainsi, les solutions $\dot{\alpha}_N$ et $\dot{\bar{\zeta}}_N$ que nous avons déterminées sont solutions du problème si l'inégalité suivante est vérifiée :

$$\left(\frac{\partial t_N}{\partial \bar{\zeta}_N} + \frac{d\bar{q}_N}{d\bar{\zeta}_N} \right)^{-1} \frac{\partial t_N}{\partial \alpha_N} \left[\frac{\partial \tau_N}{\partial \alpha_N} - \frac{\partial t_N}{\partial \alpha_N} + \frac{\partial t_N}{\partial \bar{\zeta}_N} \left(\frac{\partial t_N}{\partial \bar{\zeta}_N} + \frac{d\bar{q}_N}{d\bar{\zeta}_N} \right)^{-1} \frac{\partial t_N}{\partial \alpha_N} \right]^{-1} \frac{\partial \tau_N}{\partial \lambda} \dot{\lambda} \geq 0. \quad (4.26)$$

où on a utilisé les équations (4.24) et (4.25).

4.1.3 Condition d'unicité

Le problème central est de déterminer les conditions pour lesquelles, pour un état courant et pour une valeur de $\dot{\lambda}$ donnée, les équations du problème ont une unique solution pour α_N et $\bar{\zeta}_N$.

Dans le cas où $\bar{f}_N < 0$, nous avons vu qu'il y a une seule solution pour toute valeur de $\dot{\lambda}$.

Dans le cas où $\bar{f}_N = 0$, nous avons mis en évidence deux solutions dont l'existence dépend de la valeur de $\dot{\lambda}$, d'après les inégalités (4.19) et (4.26).

Il reste donc à expliciter les conditions pour lesquelles il y a une unique solution dans le cas où $\bar{f}_N = 0$.

Pour qu'il y ait unicité de la solution dans le cas où $\bar{f}_N = 0$, il faut que les conditions d'existence des deux solutions soient complémentaires. C'est-à-dire, pour une évolution donnée de $\dot{\lambda}$, il faut que seule l'une des deux conditions (4.19) ou (4.26) soit vérifiée au sens d'une inégalité stricte, ou qu'elles soient toutes les deux vérifiées au sens d'une égalité (qui correspond au cas particulier du chargement neutre, lorsque les deux solutions vérifient les mêmes équations).

Pour déterminer dans quel cas les conditions (4.19) et (4.26) sont complémentaires, il suffit de déterminer dans quel cas leurs membres de gauche sont de même signe.

Pour établir plus facilement cette condition de complémentarité, on réécrit l'équation (4.26) sous la forme :

$$-\left(\frac{\partial t_N}{\partial \bar{\zeta}_N} + \frac{d\bar{q}_N}{d\bar{\zeta}_N}\right)^{-1} \frac{-\frac{\partial t_N}{\partial \alpha_N} \left(\frac{\partial \tau_N}{\partial \alpha_N} - \frac{\partial t_N}{\partial \alpha_N}\right)^{-1} \frac{\partial \tau_N}{\partial \lambda} \dot{\lambda}}{1 + \left(\frac{\partial \tau_N}{\partial \alpha_N} - \frac{\partial t_N}{\partial \alpha_N}\right)^{-1} \frac{\partial t_N}{\partial \bar{\zeta}_N} \left(\frac{\partial t_N}{\partial \bar{\zeta}_N} + \frac{d\bar{q}_N}{d\bar{\zeta}_N}\right)^{-1} \frac{\partial t_N}{\partial \alpha_N}} \geq 0, \quad (4.27)$$

où l'on a simplement utilisé la relation :

$$(X + YZ)^{-1} = \frac{X^{-1}}{1 + X^{-1}YZ}, \quad (4.28)$$

en prenant $X = \left(\frac{\partial \tau_N}{\partial \alpha_N} - \frac{\partial t_N}{\partial \alpha_N}\right)$, $Y = \frac{\partial t_N}{\partial \bar{\zeta}_N} \left(\frac{\partial t_N}{\partial \bar{\zeta}_N} + \frac{d\bar{q}_N}{d\bar{\zeta}_N}\right)^{-1}$, et $Z = \frac{\partial t_N}{\partial \alpha_N}$.

En comparant les membres de gauche des équations (4.19) et (4.27), ils sont de même signe si :

$$\frac{-\left(\frac{\partial t_N}{\partial \bar{\zeta}_N} + \frac{d\bar{q}_N}{d\bar{\zeta}_N}\right)^{-1}}{1 + \left(\frac{\partial \tau_N}{\partial \alpha_N} - \frac{\partial t_N}{\partial \alpha_N}\right)^{-1} \frac{\partial t_N}{\partial \bar{\zeta}_N} \left(\frac{\partial t_N}{\partial \bar{\zeta}_N} + \frac{d\bar{q}_N}{d\bar{\zeta}_N}\right)^{-1} \frac{\partial t_N}{\partial \alpha_N}} \geq 0. \quad (4.29)$$

Or, d'après les équations (4.4)₁, (4.4)₂, et (4.4)₄, on a :

$$-\left(\frac{\partial t_N}{\partial \bar{\zeta}_N} + \frac{d\bar{q}_N}{d\bar{\zeta}_N}\right)^{-1} = \frac{\bar{\zeta}_N}{t_c} \exp\left(\frac{t_c}{G_c} \bar{\zeta}_N\right), \quad (4.30)$$

et comme d'après l'équation (4.4)₅ on a $\bar{\zeta}_N \geq 0$, alors :

$$-\left(\frac{\partial t_N}{\partial \bar{\zeta}_N} + \frac{d\bar{q}_N}{d\bar{\zeta}_N}\right)^{-1} \geq 0. \quad (4.31)$$

Ainsi, la condition de complémentarité (4.29) se réécrit :

$$-\left(\frac{\partial \tau_N}{\partial \alpha_N} - \frac{\partial t_N}{\partial \alpha_N}\right)^{-1} \frac{\partial t_N}{\partial \bar{\zeta}_N} \left(\frac{\partial t_N}{\partial \bar{\zeta}_N} + \frac{d\bar{q}_N}{d\bar{\zeta}_N}\right)^{-1} \frac{\partial t_N}{\partial \alpha_N} < 1. \quad (4.32)$$

Explicitons les différents termes intervenant dans l'équation (4.32). Tout d'abord, d'après les équations (4.4)₁, (4.4)₂, et (4.4)₄, on a :

$$\frac{\partial t_N}{\partial \bar{\zeta}_N} \left(\frac{\partial t_N}{\partial \bar{\zeta}_N} + \frac{d\bar{q}_N}{d\bar{\zeta}_N}\right)^{-1} = 1 + \bar{\zeta}_N \frac{t_c}{G_c}. \quad (4.33)$$

Par ailleurs, d'après l'équation (4.4)₁, on a :

$$-\frac{\partial t_N}{\partial \alpha_N} \left(\frac{\partial \tau_N}{\partial \alpha_N} - \frac{\partial t_N}{\partial \alpha_N}\right)^{-1} = \frac{1}{1 - Q_N \frac{\partial \tau_N}{\partial \alpha_N}}. \quad (4.34)$$

Ainsi, la condition de complémentarité (4.32) se réécrit sous la forme :

$$\frac{1 + \bar{\zeta}_N \frac{t_c}{G_c}}{1 - Q_N \frac{\partial \tau_N}{\partial \alpha_N}} < 1. \quad (4.35)$$

Comme le dénominateur de l'équation (4.35) est positif, et d'après l'expression de Q_N donnée dans l'équation (4.4)₂, la condition de complémentarité se réécrit :

$$-\frac{t_c^2}{G_c} \exp\left(-\frac{t_c}{G_c} \bar{\xi}_N\right) > \frac{\partial \tau_N}{\partial \alpha_N}. \quad (4.36)$$

Or, d'après l'équation (2.33), on peut réécrire l'équation (4.36) sous la forme :

$$\frac{d\tilde{t}_N}{d\alpha_N} > \frac{\partial \tau_N}{\partial \alpha_N}, \quad (4.37)$$

où \tilde{t}_N correspond à l'expression de la courbe enveloppe de la loi cohésive :

$$\tilde{t}_N = t_c \exp\left(-\frac{t_c}{G_c} \alpha_N\right). \quad (4.38)$$

On aboutit donc à une condition d'unicité (4.37) qui a une interprétation simple : pour qu'il y ait une solution unique dans le cas où $\bar{f}_N = 0$, il faut que, au niveau de l'état actuel, la pente de la courbe de la loi cohésive soit moins négative que celle de la courbe de τ_N , lorsqu'on les représente en fonction de α_N , pour la valeur de λ actuelle.

Pour illustrer le critère d'unicité obtenu, sur la Figure 4.2 sont représentées les courbes de t_N et de τ_N en fonction de α_N à un instant où $\bar{f}_N = 0$. Dans le cas où la condition d'unicité est vérifiée (Figure 4.2a), pour une évolution de $\dot{\lambda}$ donnée, on a :

- si $\dot{\lambda} < 0$: la courbe de τ_N translate horizontalement vers la gauche. Depuis le point A , on se déplace alors sur la branche de décharge de t_N .
- si $\dot{\lambda} > 0$: la courbe de τ_N translate horizontalement vers la droite. Depuis le point A , on se déplace alors sur la branche de charge.
- si $\dot{\lambda} = 0$: on reste au niveau du point A .

Sinon, si la condition d'unicité n'est pas vérifiée (Figure 4.2b), on a :

- si $\dot{\lambda} < 0$: la courbe de τ_N translate horizontalement vers la gauche. Depuis le point A , on peut se déplacer sur la branche de décharge, sur la branche de charge, ou "sauter" jusqu'au point B .
- si $\dot{\lambda} > 0$: la courbe de τ_N translate horizontalement vers la droite. Depuis le point A , il n'y a qu'une solution instable où on "saute" jusqu'au point B .
- si $\dot{\lambda} = 0$: on reste au niveau du point A .

A travers cet exemple, on a introduit des solutions avec des "sauts" (Chaboche *et al.*, 2001), c'est-à-dire que la perte d'unicité correspond à l'apparition d'une instabilité. Nous reviendrons sur cet aspect dans la partie suivante.

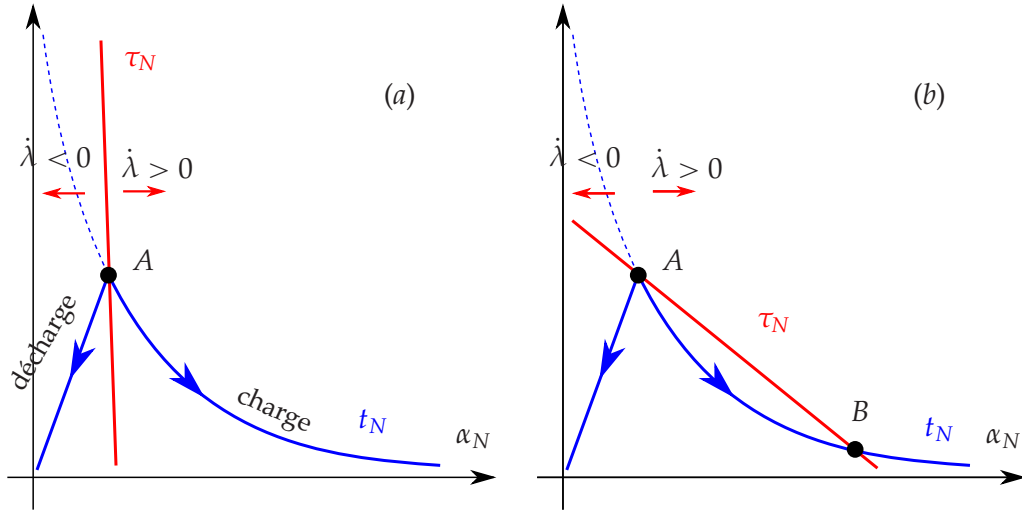


Figure 4.2 – Illustration des deux cas possibles selon que la condition d'unicité (4.37) est vérifiée (a) ou non (b).

Explicitons l'inégalité associée à la condition d'unicité (4.37) pour faire apparaître les paramètres importants :

$$-\frac{t_c^2}{G_c} \exp\left(-\frac{t_c}{G_c} \alpha_N\right) > -\frac{d\tau_N}{d\bar{\lambda}} \frac{\bar{\lambda}}{h} \frac{1}{1 + \frac{\alpha_N}{h}}. \quad (4.39)$$

Le terme $\frac{d\tau_N}{d\bar{\lambda}}$ dépend essentiellement des propriétés élastiques du matériau hors discontinuité. Ainsi, en terme d'analyse dimensionnelle, la condition d'unicité s'écrit :

$$-\frac{t_c^2}{G_c} > -\frac{G_s}{h}. \quad (4.40)$$

Le critère d'unicité sous sa forme dimensionnelle (4.40) met en évidence qu'il existe une taille caractéristique $\ell_c = G_c G_s / t_c^2$ que la taille de l'élément ne doit pas dépasser pour que la solution du problème d'équilibre local soit unique. De manière générale, comme $-t_c^2/G_c$ représente la pente à l'origine de la loi cohésive, alors, plus la pente à l'origine de la loi cohésive est importante, plus la taille caractéristique ℓ_c est petite.

La tension maximum t_c (tension au niveau du pic de la loi cohésive) dépend des paramètres Y_D , Y_C et d_c (plus généralement elle dépend aussi de l'état de tension, qui est ici uniaxial). Comme t_c est une fonction croissante de ces trois paramètres, alors, plus Y_D , Y_C et d_c sont grands, et plus G_c est petit, plus la taille caractéristique ℓ_c est petite. Autrement dit, plus le matériau est fragile (t_c élevé et G_c petit), et plus ℓ_c est petite.

Pour une capsule en écoulement, nous déterminerons des valeurs de tailles maximum d'éléments qu'impose le critère (4.40) pour une capsule en écoulement hyperbolique plan dans la partie 4.3.2.

Cette étude de l'unicité a été réalisée dans le cas où l'élément est en traction uniaxiale avec la discontinuité orientée parallèlement à un côté de l'élément. La condition d'unicité peut se rapporter à une taille maximum de l'élément. De manière générale, d'après l'étude réalisée par Jirásek (2000) en petites déformations, on peut s'attendre à ce que cette taille maximum de l'élément diminue en fonction de l'angle d'inclinaison de l'orientation de la discontinuité par rapport au côté de l'élément opposé au nœud isolé. L'étude présentée ici donne donc un ordre de grandeur de la taille maximum de l'élément permettant d'avoir l'unicité de la solution, et une étude plus générale reste à être menée.

Dans la partie suivante, nous discutons plus en détail du problème d'instabilité.

4.2 Problème d'instabilité de la nucléation des fissures cohésives

L'objectif de cette partie est de mettre en évidence brièvement les différentes problématiques physiques et numériques qu'implique le problème d'instabilité, et de présenter brièvement les principales approches de régularisation utilisées dans les modèles de structures.

Le problème d'instabilité que nous avons mis en évidence se retrouve de manière générale dans les modèles éléments finis de structures lorsqu'on cherche à modéliser la nucléation d'une fissure cohésive avec un comportement adoucissant, dans un cadre quasi-statique.

De manière générale, l'instabilité se présente si, pour une évolution continue des déplacements imposés sur les bords de la structure, l'énergie élastique restituée par le milieu continu est supérieure à l'énergie consommée par la fissure. Il y a alors un saut de l'ouverture de la fissure (et donc un saut de la déformation des éléments), vers un nouvel équilibre entre la fissure et le milieu continu.

D'un point de vue local (élément cohésif, ou élément intégré), l'instabilité induit une discontinuité temporelle du saut de déplacement. D'un point de vue global, l'instabilité se caractérise par le fait que le seul chemin quasi-statique que l'on peut suivre pour aller d'une branche stable à l'autre est de type snap-back (les efforts et les déplacements diminuent), mais il n'est pas compatible avec les déplacements imposés au bord du domaine.

Ce problème d'instabilité soulève alors des questions sur la physique du problème de nucléation d'une fissure cohésive, et il pose des problèmes de convergence d'un point de vue numérique.

D'un point de vue physique, d'après certains auteurs, l'instabilité associée au problème de nucléation d'une fissure traité dans un cadre quasi-statique est lié au fait qu'il manque la prise en compte de l'inertie dans le modèle, et le phénomène est en fait intrinsèquement dynamique : le surplus d'énergie élastique restituée et qui n'est pas consommé par la fissure est essentiellement transformé en énergie cinétique. Pour d'autres, le phénomène est bien quasi-statique, et l'instabilité est uniquement due au fait que la méthode des éléments finis standard (contrôle en déplacement) ne permet pas de suivre le chemin quasi-statique (snap-back).

D'un point de vue numérique, la méthode des éléments finis implicite échoue à passer l'instabilité avec la méthode de Newton standard. La difficulté de convergence peut apparaître soit uniquement au niveau global, soit aussi au moment de la résolution du problème d'équilibre local.

Il y a alors principalement trois types de méthodes pour résoudre le problème numériquement. Dans le premier type de méthode, on suppose qu'il faut suivre un chemin quasi-statique tout le long du chargement, et on utilise alors généralement la méthode de Riks (algorithme arc-length). Dans le deuxième type de méthode, on cherche seulement à converger vers la nouvelle branche stable. On ne cherche donc pas à modéliser ce qui se passe pendant l'instabilité. La méthode la plus classique consiste alors à régulariser le problème avec un modèle de viscosité, qui est justifié par le fait que la viscosité est capable de consommer le surplus d'énergie élastique restitué pendant la phase instable. Avec ces modèles, la viscosité a généralement pour but uniquement de régulariser le problème pour converger, et on cherche à ce que la viscosité n'ait pas trop d'effet pendant les phases stables. Enfin dans le troisième type de méthode, on considère que le problème est dynamique et non quasi-statique (le surplus d'énergie élastique restituée doit être consommé par l'énergie cinétique), et donc une analyse dynamique est réalisée.

Si le problème d'instabilité est connu dans les modèles de structure, il ne semble pas avoir été étudié dans le cas où la structure est en interaction avec un fluide. Il se pose donc la question du statut de l'instabilité dans notre cas. En effet, dans notre modèle où la membrane est en évolution quasi-statique avec le fluide, tout le surplus d'énergie élastique restitué par la membrane au moment de l'ouverture de l'interface devrait pouvoir être dissipé par la viscosité du fluide. Il n'y a donc a priori pas d'instabilité. Ainsi, l'instabilité locale dans notre cas, qui apparaît après discrétisation, semble donc plutôt

mettre en évidence une des limites de notre modèle dû au fait que nous n'avons pas tenu compte de la description fine du fluide au voisinage d'une discontinuité. Il peut alors exister une instabilité locale lorsqu'un élément qui contient une discontinuité restitue plus d'énergie élastique que ne peut en consommer la discontinuité. Cette solution instable induit un saut du saut de déplacement.

Dans notre cas, l'instabilité semble restreinte au niveau local. Ainsi, d'après la condition d'unicité, en réduisant la taille des éléments, on peut retrouver une solution stable. Cela semble cohérent avec le fait qu'en raffinant le maillage, on tient mieux compte de la présence du fluide au voisinage de la discontinuité.

Dans la partie suivante nous allons donc étudier la taille des éléments du maillage qui doivent permettre d'assurer la condition d'unicité par rapport aux valeurs des paramètres matériaux que l'on considère. Nous verrons que les tailles des éléments maximum imposés par le critère n'est pas nécessairement trop contraignante. Toutefois, nous mettrons en évidence qu'une autre contrainte opérationnelle s'ajoute quant à la taille maximum des éléments, après discrétisation temporelle. On pourrait considérer cette contrainte comme une source d'instabilité supplémentaire. Ceci nous amènera alors à justifier le besoin de régulariser le problème d'équilibre local.

4.3 Justification du besoin de régularisation

Dans cette partie, nous allons commencer par déterminer les ordres de grandeur de la taille des éléments qui satisfont la condition d'unicité du problème local. Pour cela, nous allons considérer des valeurs des paramètres matériaux permettant d'étudier la rupture quasi-fragile d'une capsule en écoulement. Comme nous ne disposons pas à ce stade de valeurs pour les paramètres matériaux, nous allons établir un critère qui permette de choisir des valeurs de paramètres qui soient cohérentes avec un modèle de rupture quasi-fragile.

En anticipant la méthode de résolution du problème d'équilibre local que nous développerons dans la partie 5, nous mettrons ensuite en évidence une deuxième contrainte quant à la taille maximum des éléments, due cette fois-ci à des difficultés de convergence après que le problème ait été discrétisé en temps.

Ces deux études vont nous amener finalement dans une dernière partie à justifier le besoin de régulariser le problème d'équilibre local.

4.3.1 Définition d'un critère pour le choix des paramètres matériaux

À ce stade, comme nous ne disposons pas de valeurs des paramètres matériaux du modèle, l'objectif de cette partie est d'établir un critère qui permette de choisir des valeurs pour ces paramètres qui soient cohérentes avec le modèle de rupture quasi-fragile.

Pour cela, nous allons imposer comme critère que le saut de déplacement pour lequel l'interface est complètement endommagée, reste petit devant les dimensions de la microcapsule. Pour cela, nous allons considérer qu'un ordre de grandeur de la valeur de ce saut de déplacement est donné par l'abscisse à laquelle la tangente à l'origine de la courbe de la loi cohésive coupe l'axe des abscisses. Si on note α_{N0} cet abscisse, on a alors :

$$\alpha_{N0} = \frac{G_c}{t_c}. \quad (4.41)$$

Si a désigne une dimension caractéristique de la capsule, on veut donc :

$$\alpha_{N0} \ll a, \quad (4.42)$$

où $x \ll y$ signifie que x est petit devant y . Ainsi, le critère permettant d'assurer le caractère quasi-fragile du modèle de comportement de la membrane est donné par :

$$\frac{G_c}{t_c} \ll a. \quad (4.43)$$

La valeur de la tension t_c est déterminée par les paramètres Y_D et Y_C , la valeur de d_c , et l'état de tension au moment de la localisation. L'état de tension va avoir une influence sur la valeur de t_c mais pas sur son ordre de grandeur. Étant donné qu'un ordre de grandeur de t_c est suffisant pour l'équation (4.43), on va donc établir ici la relation qu'il y a entre t_c et les trois paramètres Y_D , Y_C , et d_c , dans le cas d'un état de tension uniaxial.

Pour le modèle de comportement du milieu continu, on considère que le potentiel hyperélastique $\bar{\phi}_e$ (éq. (2.17)) correspond à une loi néo-Hookéenne :

$$\bar{\phi}_e = \frac{G_s}{2} \left(I_1 + \frac{1}{I_2 + 1} \right), \quad (4.44)$$

où I_1 et I_2 sont les invariants définis dans l'équation (3.2) du chapitre 3.

Soit λ_c la valeur de l'allongement dans la direction uniaxiale pour laquelle le critère de localisation donné par l'équation (2.40) est vérifié, alors, d'après les équations (2.18)₂,

(2.20), et (2.21), l'allongement λ_c vérifie l'équation :

$$\lambda_c^3 - \lambda_c \left(2 \left(\frac{Y_C}{G_s} d_c + \frac{Y_D}{G_s} \right) + 3 \right) + 2 = 0. \quad (4.45)$$

Enfin, d'après les équations (2.44) et (2.18)₁, et sachant que le premier tenseur des tensions de Piola-Kirchhoff $\underline{\underline{P}}$ est lié au second tenseur des tensions de Piola-Kirchhoff $\underline{\underline{\pi}}$ par la relation $\underline{\underline{P}} = \underline{\underline{F}} \cdot \underline{\underline{\pi}}$, la valeur de t_c est finalement donnée par :

$$t_c = (1 - d_c) G_s \left(\lambda_c^2 - \frac{1}{\lambda_c} \right). \quad (4.46)$$

Finalement, en adimensionnant les tensions par le module de cisaillement surfacique G_s , et en notant \tilde{t}_c la valeur adimensionnée de t_c , les équations (4.45) et (4.46), permettent de réécrire, en terme d'ordre de grandeur, le critère (4.43) sous la forme :

$$\frac{G_c}{G_s a} \ll \tilde{t}_c \left(\frac{Y_D}{G_s}, \frac{Y_C}{G_s}, d_c \right). \quad (4.47)$$

Le critère écrit sous la forme (4.47) nous sera surtout utile pour la suite pour estimer la valeur limite de G_c , pour des valeurs de Y_D , Y_C , et d_c données.

4.3.2 Taille maximum des éléments d'après la condition d'unicité

L'objectif de cette partie est de déterminer quelques ordres de grandeur de la taille maximum que peuvent avoir les éléments vis-à-vis du critère d'unicité (4.40) établi dans la section 4.1, lorsque l'on considère une capsule en écoulement.

D'après le critère d'unicité, la valeur maximum h^{max} de la taille d'un élément localisé dépend des valeurs de t_c et G_c . Comme nous l'avons vu, la valeur de t_c dépend de Y_D , Y_C , et d_c , et de l'état de tension dans l'élément localisé au moment où $d = d_c$. Ici on va considérer le cas d'une capsule qui s'endommage dans l'écoulement, et on calcule la valeur de t_c dans le premier élément où $d = d_c$. On va considérer différentes valeurs de Y_D , Y_C , et d_c , de manière à initier la localisation ($d = d_c$) pour différentes forces d'écoulement. À partir de la valeur de t_c déterminée pour chaque force d'écoulement, on peut alors calculer la valeur de h^{max} pour différentes valeurs de G_c . On calcule aussi $G_c^{max} = t_c/10$ (forme adimensionnée), qui donne l'ordre de grandeur de la valeur maximum de G_c d'après le critère (4.43).

On considère une capsule initialement sphérique de rayon a en écoulement hyperbolique plan (Figure 4.3). Hormis la forme de l'écoulement, on se place sinon dans les mêmes hypothèses que le problème d'interaction fluide-structure du chapitre 2. On uti-

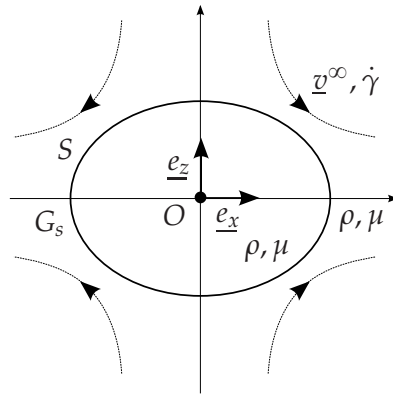


Figure 4.3 – Capsule en suspension dans un écoulement hyperbolique plan.

lise aussi les mêmes notations, en particulier $\dot{\gamma}$ désigne toujours le taux de cisaillement. Le paramètre adimensionnel qui contrôle le problème d'interaction fluide-structure est toujours le nombre capillaire $Ca = \mu\dot{\gamma}a/G_s$.

La valeur de t_c est directement liée à la valeur du nombre capillaire limite Ca_ℓ que nous avons introduit dans le chapitre 2, puisqu'il correspond au nombre capillaire pour lequel la rupture d'une capsule s'initie ($d = d_c$). On va donc choisir les valeurs de Y_D , Y_C , et d_c , de manière à initier la localisation pour différentes valeurs du nombre capillaire.

La capsule ayant une membrane obéissant à une loi hyperélastique néo-Hookéenne, comme il n'existe pas d'état d'équilibre pour une valeur du nombre capillaire supérieure à $Ca_\infty = 0.35$ (Walter *et al.*, 2010), nous allons imposer des valeurs du nombre capillaire allant de $Ca = 0.01$ à $Ca = 0.3$. On ne cherche pas spécifiquement à se placer au niveau du seuil de rupture $Ca = Ca_\ell$, mais les valeurs de Ca sont seulement légèrement supérieures aux valeurs de Ca_ℓ .

Pour les simulations, le choix du maillage a peu d'influence sur les valeurs de t_c obtenues. Ici on considère un maillage de 2048 éléments P1. Le tableau 4.1 donne les valeurs de h^{max} en fonction des autres paramètres. Les valeurs numériques correspondent à des valeurs adimensionnées, où les longueurs sont adimensionnées par le rayon a de la capsule, et les tensions par G_s . Le paramètre G_c , dont l'unité est en J/m (Joule/mètre), est adimensionné par $G_s a$. Par ailleurs, le tableau 4.2 donne les valeurs de la taille caractéristique des éléments pour différents maillages composés d'éléments P1.

De manière générale, le critère d'unicité (4.40) impose les valeurs de h^{max} les plus faibles lorsque la membrane a une résistance t_c élevée, et une faible tenacité G_c , ainsi, pour une valeur de G_c donnée, les valeurs de h^{max} les plus faibles sont obtenues lorsque la capsule résiste à des forces d'écoulement (Ca) élevées. Si on considère les valeurs de

Tableau 4.1 – Valeurs de la taille maximum h^{max} (adimensionnée par le rayon de la capsule) d'un élément satisfaisant le critère d'unicité (4.40) établi dans la section 4.1, où t_c est calculé dans le premier élément localisé pour une capsule en écoulement hyperbolique plan.

Ca	Y_D	Y_C	d_c	t_c	G_c^{max}	G_c	h^{max}
0.3	0.4	2	0.2	2.4	0.24	0.01	0.002
						0.05	0.009
						0.1	0.017
						0.2	0.035
0.1	0.025	0.25	0.2	0.63	0.063	0.01	0.03
						0.05	0.13
						0.1	0.25
0.05	0.01	0.1	0.2	0.4	0.04	0.01	0.06
						0.05	0.31
						0.1	0.63
0.01	0.001	0.005	0.2	0.1	0.01	0.01	1.0
						0.05	5.0
						0.1	10.0

Tableau 4.2 – Tailles caractéristiques (adimensionnées) des éléments pour différents maillages composés d'éléments P1.

nombre d'éléments	512	1280	2048	5120	8192
taille de l'élément	0.21	0.13	0.10	0.06	0.05

G_c inférieures à G_c^{max} , on voit que pour la valeur de Ca la plus importante, les maillages que l'on considère (voir tableau 4.2), ont des éléments de trop grande taille par rapport à h^{max} . Pour les autres valeurs de Ca , on trouve des valeurs de G_c inférieures à G_c^{max} pour lesquelles la taille caractéristique des éléments de certains maillages est inférieure à h^{max} .

Les résultats obtenus ici montrent que la condition d'unicité (4.40) peut être vérifiée pour une gamme relativement étendue de valeurs du nombre capillaire, avec les maillages pour lesquels les temps de calcul ont un coût raisonnable. Si le fait de vérifier la condition d'unicité permet d'avoir un problème bien posé, cela ne garanti toutefois pas que le schéma numérique de résolution du problème puisse converger. C'est ce que nous allons mettre en évidence dans la prochaine partie.

4.3.3 Difficulté de convergence pour résoudre le problème local

L'objectif de cette partie est de mettre en évidence qu'une contrainte supplémentaire quant à la taille maximum des éléments du maillage provient des conditions de convergence du schéma numérique pour résoudre le problème l'équilibre local. En particulier,

après discrétisation temporelle des équations, le fait d'avoir un problème bien posé au niveau continu, c'est-à-dire lorsque la condition d'unicité (4.40) est vérifiée, ne garantit pas que le schéma numérique converge. Dans cette partie, on va anticiper sur ce qui sera présenté plus en détail dans la partie 5 concernant la discrétisation temporelle du problème local et la méthode de résolution.

On considère à nouveau le cas de l'élément en traction uniaxiale introduit dans la section 4.1. On va considérer les équations sous leur forme discrétisée temporellement. Nous verrons que le problème local est discrétisé avec un schéma temporel implicite. Connaissant l'état du système au pas de temps n , et l'incrément d'allongement $\Delta\lambda_{n+1}$ imposé à l'élément au pas de temps $n + 1$, le problème local consiste alors à déterminer le saut de déplacement $\alpha_{N,n+1}$ et l'évolution des variables internes au pas de temps $n + 1$ satisfaisant l'équation d'équilibre local, l'équation de compatibilité entre les déformations et le saut de déplacement, et les équations des modèles de comportement. À partir des équations sous forme discrétisées, la tension de Kirchhoff τ_N et la composante normale du vecteur traction t_N , peuvent alors s'écrire comme fonctions de λ_{n+1} , $\alpha_{N,n+1}$, et de l'état des variables internes au pas de temps n . Le problème local consiste alors à déterminer $\alpha_{N,n+1}$ solution de l'équation d'équilibre local :

$$-\tau_N(\lambda_{n+1}, \alpha_{N,n+1}, E_n) + t_N(\alpha_{N,n+1}, E_n) = 0, \quad (4.48)$$

où E_n désigne l'ensemble des variables d'état interne au pas de temps n . On résout alors cette équation en $\alpha_{N,n+1}$ à partir d'un algorithme de Newton-Raphson.

L'objectif ici est de montrer que l'algorithme peut ne pas converger même si la condition d'unicité (4.40) établie dans la partie 4.1 est vérifiée. Le problème se pose à l'incrément temporel suivant l'introduction de la discontinuité. On se place donc au pas de temps n où l'élément vient de s'activer (le critère (2.40) est vérifié pour ce pas de temps). On impose alors un incrément d'allongement $\Delta\lambda_{n+1} = 0.05$.

La Figure 4.4 illustre les courbes de $\tau_N(\lambda_{n+1}, \alpha_N, E_n)$ et $t_N(\alpha_N, E_n)$ en fonction de α_N qu'on obtient dans un cas où on a pris des valeurs des paramètres qui vérifient la condition d'unicité (4.40). On voit que contrairement au problème sous forme continu en temps, après discrétisation, sur la courbe de τ_N , la branche correspondant à une évolution avec endommagement existe pour des valeurs de α_N positives. En effet, comme on impose un incrément d'allongement de l'élément, il faut que la discontinuité s'ouvre d'une valeur α_N finie (positive) pour relaxer suffisamment le milieu continu et ne pas qu'il s'endommage. La présence de cette branche rend la convergence de l'algorithme de Newton difficile.

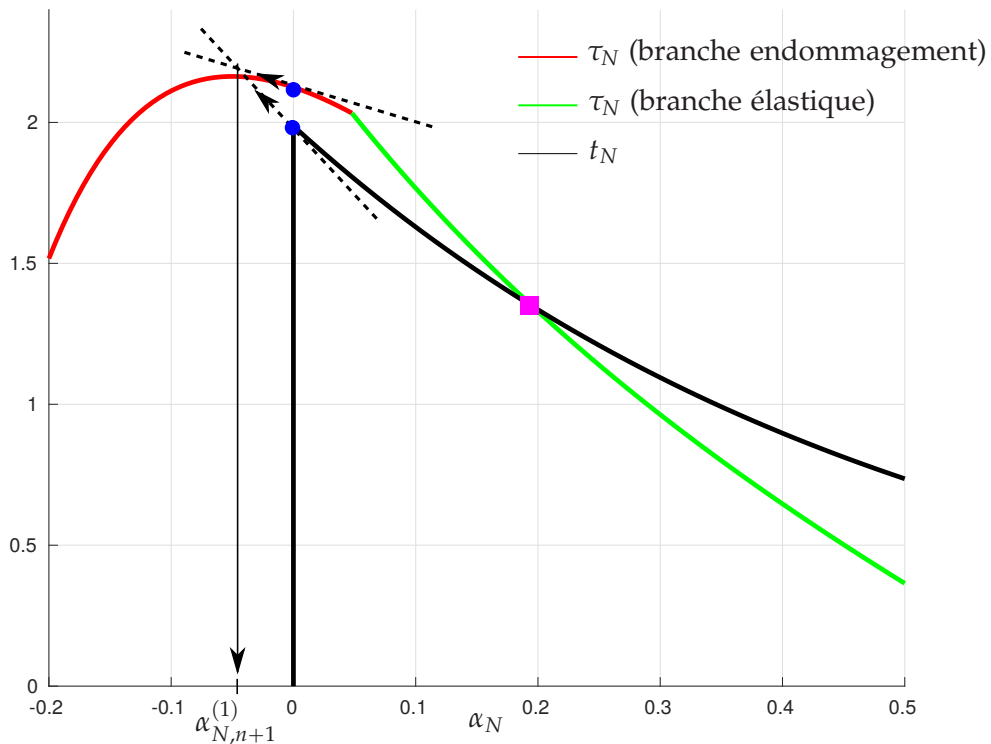


Figure 4.4 – Illustration du problème de convergence avec l'algorithme de Newton à l'incrément suivant l'introduction de la discontinuité dans un élément en traction uniaxiale. Les points bleus correspondent aux valeurs de τ_N et t_N à l'initialisation de l'algorithme ($\alpha_{N,n+1}^{(0)} = 0$), et le carré mauve correspond à la solution, qui ne peut pas être atteinte avec l'initialisation considérée.

Étudions comment l'algorithme de Newton se comporte à la première itération. L'algorithme est initialisé avec la valeur de $\alpha_{N,n}$ au pas de temps n , c'est-à-dire $\alpha_{N,n+1}^{(0)} = 0$ (où $\alpha_{N,n+1}^{(i)}$ désigne la valeur de $\alpha_{N,n+1}$ à l'itération i). Il doit converger vers la solution $\alpha_{N,n+1}$ correspondant à l'intersection des deux courbes de τ_N et t_N . La solution obtenue à la première itération correspond à l'intersection des tangentes aux deux courbes de τ_N et t_N en $\alpha_N = \alpha_{N,n+1}^{(0)}$. La solution à la première itération correspond donc à une valeur de α_N négative. L'algorithme de Newton ne va alors pas converger. Pour améliorer les conditions de convergence, on peut réduire la taille de l'élément, ce qui va rendre la pente de la tangente à τ_N en $\alpha_N = 0$ plus négative, et donc permettre d'avoir une solution pour $\alpha_{N,n+1}$ à la première itération qui corresponde à une valeur de α_N positive, auquel cas, l'algorithme pourra converger.

À travers cet exemple, nous avons donc mis en évidence que des difficultés de convergence pour résoudre la problème d'équilibre local imposent de choisir des tailles d'élément qui soient plus petites que la taille maximum qu'impose la condition d'unicité (4.40).

Remarque :

Le même problème de convergence se pose si on modélise la loi cohésive avec une méthode de pénalisation.

4.3.4 Justification du besoin de régularisation

Dans la partie 4.3.2, nous avons vu qu'il est a priori possible d'étudier la rupture de capsules en écoulement avec un problème d'équilibre local bien posé (solution unique) avec des maillages pour lesquels les temps de calcul ont un coût raisonnable.

Bien que le fait de se placer dans les conditions où le problème continu est bien posé permet généralement d'avoir de bonnes propriétés de convergence des schémas numériques, la discrétisation du problème dégrade ces propriétés. Par ailleurs, le critère d'unicité que nous avons développé dans la section 4.1 est valable dans le cas en traction uniaxiale, et en appliquant ce critère pour le cas d'états de tension quelconques, on surestime la valeur de la taille maximum que peut avoir l'élément pour que le problème soit bien posé.

Dans la pratique, après une première tentative d'implémentation du modèle développé dans ce chapitre dans un code, il semble difficile de trouver des cas (maillage et force d'écoulement) dans lesquels l'algorithme de Newton local parvient à converger lorsque nous considérons des valeurs des paramètres matériaux qui permettent d'étudier une rupture quasi-fragile (au sens du critère défini par l'équation (4.43)) d'une

capsule en écoulement. Comme ce type de rupture correspond généralement au comportement observé pour les capsules, nous souhaitons pouvoir l'étudier.

À ce stade, nous n'avons pas pu élucider si le problème se pose plutôt à cause du fait que l'on soit dans des conditions où le problème local est mal posé mais que le critère d'unicité que l'on utilise majore trop largement la valeur maximum de la taille des éléments, ou bien si le problème est plutôt dû à la difficulté de convergence après l'introduction de la discontinuité dans un élément, comme nous l'avons présenté dans la partie 4.3.3.

Comme le problème de convergence limite trop notre modèle, nous avons choisi de régulariser le problème d'équilibre local. Si le problème de convergence est dû au fait que nous nous trouvons dans des conditions où le problème local n'est pas bien posé, cela signifie que nous sommes dans un cas où il y a une instabilité. Dans notre cas, nous cherchons alors seulement à passer l'instabilité pour atteindre l'état stable. On considère que cette solution a un sens et qu'elle correspond à la solution qu'on atteindrait de manière stable si on raffinaient le maillage de manière à tenir compte plus finement de l'interaction avec le fluide. Pour atteindre cette solution, on régularise le problème d'équilibre local avec un modèle de viscosité. On peut considérer que l'énergie qui est consommée fictivement par cette viscosité (surplus d'énergie élastique restituée), serait celle consommée par la viscosité du fluide si on raffinaient le maillage. Par ailleurs, on s'attend à ce que la régularisation avec la viscosité ait des propriétés de régularisation semblables à celles du fluide.

4.4 Régularisation du problème d'équilibre local

Pour régulariser le problème local, nous avons choisi de mettre en œuvre le modèle de viscosité proposé par Gao & Bower (2004) qui consiste à introduire un modèle de viscosité dans la loi cohésive. Bien que l'introduction d'un comportement visqueux au niveau des interfaces cohésives ne corresponde pas à la physique que l'on cherche à modéliser, la dissipation visqueuse introduite peut être rendue petite devant la dissipation associée à l'endommagement de l'interface dans les phases d'évolution stables, ce qui permet d'assurer que la solution obtenue conserve un sens physique. En particulier, on pourra toujours rendre cette dissipation visqueuse aussi petite que l'on veut dans les phases stables en diminuant le pas de temps (ou l'incrément de chargement).

Le modèle de viscosité est simple à mettre en œuvre. Ainsi, on considère simplement que le vecteur traction sur l'interface, dans la configuration de référence, est désormais

le vecteur $\underline{T}_{\Gamma_0}^*$ défini par :

$$\underline{T}_{\Gamma_0}^* = \underline{T}_{\Gamma_0} + \gamma \dot{\underline{\underline{U}}}, \quad (4.49)$$

où \underline{T}_{Γ_0} correspond toujours au vecteur traction donné par la loi cohésive développée dans la section 2.2.3, $\dot{\underline{\underline{U}}}$ désigne la dérivée temporelle du saut de déplacement matériel $\underline{\underline{U}}$, et γ est le coefficient de viscosité de l'interface, dont l'unité est en *Pa.s* (Pascal \times seconde). Le terme $\gamma \dot{\underline{\underline{U}}}$ correspond donc à une traction visqueuse ajoutée artificiellement pour régulariser la loi cohésive. On cherchera donc à rendre la contribution de ce terme petite devant \underline{T}_{Γ_0} .

En notant :

$$\begin{cases} t_N^* = t_N + \gamma \dot{\alpha}_N \\ t_M^* = t_M + \gamma \dot{\alpha}_M, \end{cases} \quad (4.50)$$

les équations d'équilibre locales (3.17)₂ associées à chacun des éléments localisés s'écrivent désormais :

$$\mathbf{h}^{*,e} := -\boldsymbol{\tau} + \underbrace{[t_N^* \ t_M^*]^T}_{\mathbf{t}^*} = \mathbf{0}, \quad \forall e \in \{S_0^{e,loc}\}. \quad (4.51)$$

5 Résolution du modèle de rupture d'une microcapsule en écoulement

Dans cette partie, on décrit la méthode de résolution du problème de la membrane en présence de discontinuités fortes, dans le cadre du problème d'interaction fluide-structure d'une microcapsule en écoulement.

5.1 Résolution du problème d'interaction fluide-structure

Pour mettre en évidence le problème à résoudre pour la membrane il faut se placer dans le contexte du modèle d'interaction fluide-structure. L'objectif est simplement ici de mettre en évidence le fait que nous pouvons conserver la même stratégie de résolution du problème d'interaction fluide-structure que dans les chapitres précédents. Ce point est donc traité brièvement.

L'ensemble des équations du problème d'interaction fluide-structure sont les équations résumées dans la section 3.4 pour la membrane, où il faut toutefois remplacer les équations d'équilibre locales (3.17)₂, par les équations d'équilibre local avec le modèle

de régularisation visqueux (4.51), et les équations qui ont été utilisées dans les chapitres précédents pour le problème fluide et pour le couplage entre les fluides et la membrane (l'équation de couplage cinématique étant ici donnée par l'équation (2.1)).

De la même manière que dans les chapitres précédents, le problème d'interaction fluide-structure est résolu en temps à l'aide d'une approche incrémentale à un pas de temps : l'état du système au pas de temps $n + 1$ est déterminé à partir de l'état du système au pas de temps n . Il convient alors de préciser comment sont approximées les équations qui dépendent du chemin suivi par le système, ou de la vitesse à laquelle il évolue. Ces équations sont l'équation de couplage cinématique entre le fluide et le solide (éq. (2.1)), les équations d'équilibre locales (4.51), et les équations d'évolution des variables internes correspondant aux équations (2.21), (2.37), et (2.35). Comme dans les chapitres précédents, l'équation de couplage cinématique est résolue de manière explicite, et les équations d'évolution des variables internes sont résolues de manière implicite, et, par ailleurs, nous allons discrétiser les équations d'équilibre locales (4.51) sous forme implicite.

La présence des discontinuités fortes dans le modèle de la membrane nous permet donc de conserver la même approche de résolution du problème d'interaction fluide-structure que dans les chapitres précédents. Dans la suite nous allons donc nous focaliser uniquement sur la méthode de résolution du problème de la membrane en présence de discontinuités fortes.

5.2 Résolution du problème de la membrane

Comme nous conservons la même stratégie de résolution du problème d'interaction fluide-structure que dans les chapitres précédents, alors, lorsqu'on souhaite déterminer les variables du modèle de la membrane au pas de temps $n + 1$ à partir de leurs valeurs au pas de temps n , la seule variable connue au départ au pas de temps $n + 1$ est la position des nœuds (qui est donnée par l'intégration explicite de l'équation de couplage cinématique entre les fluides et la membrane).

Ainsi, le problème de la membrane s'énonce de la manière suivante :

Connaissant : $\hat{\mathbf{d}}_{n+1}, \alpha_n, d_n, \overline{\mathbf{Q}}_n, \overline{\xi}_n$

Trouver : $\mathbf{q}_{n+1}, \alpha_{n+1}, d_{n+1}, \overline{\mathbf{Q}}_{n+1}, \overline{\xi}_{n+1}$

Tels que : l'équation d'équilibre globale (3.17)₁, les équations d'équilibre locales (4.51), les lois constitutives (éq. (2.18) et (2.28)₁), et les lois d'évolution des

variables internes (éq. (2.21), (2.37), et (2.35)), sous forme discrétisée temporellement, soient vérifiées.

Nous verrons dans les sections 5.3 et 5.4 comment sont discrétisées temporellement les équations d'équilibre locales et les lois d'évolution des variables internes, respectivement, avec un schéma implicite.

Pour résoudre le problème de la membrane, on le décompose en sous-problèmes. Pour cela, commençons par considérer le fait que la discrétisation temporelle des lois d'évolution des variables internes va permettre d'exprimer les tensions $\underline{\underline{\tau}}$ et les tractions \mathbf{t}^* , présents dans les équations (3.17)₁ et (4.51), sous la forme incrémentale suivante :

$$\begin{cases} \underline{\underline{\tau}}_{n+1} = \underline{\underline{\tau}}_{n+1}(\underline{\underline{\bar{e}}}_{n+1}, E_n) \\ \mathbf{t}_{n+1}^* = \mathbf{t}_{n+1}^*(\boldsymbol{\alpha}_{n+1}, E_n) \end{cases} \quad (5.1)$$

où $E_n = \{d_n, \bar{\xi}_n, \bar{Q}_n\}$ désigne de manière générale les variables internes au pas de temps n . L'établissement de ces lois incrémentales sera détaillé dans la section 5.4. Ainsi, étant donné que dans l'équation (5.1)₁ la déformation $\underline{\underline{\bar{e}}}_{n+1}$ est une fonction de $\hat{\mathbf{d}}_{n+1}$ et $\boldsymbol{\alpha}_{n+1}$ (d'après les équations (2.16) et (3.11)), alors, on peut écrire les équations d'équilibre (3.17)₁ et (4.51) sous la forme suivante :

$$\begin{cases} \mathbf{F}^{\text{int}}(\hat{\mathbf{d}}_{n+1}, \boldsymbol{\alpha}_{n+1}, E_n) - \mathbf{M}(\hat{\mathbf{d}}_{n+1}) \mathbf{q}_{n+1} = \mathbf{0} \\ \mathbf{h}^{*,e}(\hat{\mathbf{d}}_{n+1}, \boldsymbol{\alpha}_{n+1}^e, E_n) = -\boldsymbol{\tau}_{n+1} + \mathbf{t}_{n+1}^* = \mathbf{0}, \quad \forall e \in \{S_0^{e,loc}\}. \end{cases} \quad (5.2)$$

Ainsi, on peut définir un problème de la membrane à ce niveau, qui consiste à déterminer $\boldsymbol{\alpha}_{n+1}$ et \mathbf{q}_{n+1} satisfaisant les équations (5.2), connaissant $\hat{\mathbf{d}}_{n+1}$ et E_n .

L'intérêt de la méthode EFEM est que les équations (5.2)₂ sont indépendantes les unes des autres car les sauts de déplacement $\boldsymbol{\alpha}_{n+1}^e$ sont des variables locales définies uniquement au niveau d'un élément. On peut donc résoudre le problème de la membrane avec une méthode séquentielle. On résout d'abord les équations d'équilibre locales (5.2)₂ au niveau de chaque élément pour déterminer $\boldsymbol{\alpha}_{n+1}^e$, puis, on résout l'équation d'équilibre global (5.2)₁ pour déterminer \mathbf{q}_{n+1} (de la même manière que dans les chapitres précédents). D'un point de vue pratique, l'avantage de la méthode EFEM est qu'elle ne modifie pas l'architecture d'un code de calcul éléments finis standard : la résolution de chacune des équations (5.2)₂ se fait au cours du processus d'assemblage du vecteur des efforts internes \mathbf{F}^{int} .

La détermination de l'évolution des variables internes dans chaque élément est, lui, un sous-problème qui est résolu au cours de la résolution de l'équation (5.2)₂ pour les éléments localisés, ou au cours du calcul du vecteur des efforts internes élémentaire pour les éléments non localisés. Plus précisément, c'est au cours du calcul de l'évolution des tensions $\underline{\underline{\tau}}$ et des tractions \mathbf{t}^* dans l'élément, d'après les lois incrémentales (5.1), qu'est déterminée l'évolution des variables internes.

Dans la suite, dans la partie 5.3, nous allons détailler comment sont résolues les équations d'équilibre locales (5.2)₂, puis, dans la partie 5.4, nous verrons comment sont calculées les lois de comportement données sous les formes incrémentales correspondant à l'équation (5.1), et comment est déterminée l'évolution des variables internes.

5.3 Résolution du problème local de l'équilibre d'une discontinuité

Commençons par expliciter la discrétisation temporelle des équations d'équilibre locales (4.51). On utilise un schéma d'Euler implicite pour approximer les dérivées temporelles introduites avec le modèle de viscosité. On a alors :

$$\begin{cases} t_{N,n+1}^* = t_{N,n+1} + \gamma \frac{\alpha_{N,n+1} - \alpha_{N,n}}{\Delta t} \\ t_{M,n+1}^* = t_{M,n+1} + \gamma \frac{\alpha_{M,n+1} - \alpha_{M,n}}{\Delta t}, \end{cases} \quad (5.3)$$

où Δt est le pas de temps.

Au niveau d'un élément localisé, connaissant $\hat{\mathbf{d}}_{n+1}$ et E_n , le problème consiste alors à déterminer le saut de déplacement α_{n+1}^e dans l'élément tel que :

$$\mathbf{h}^{*,e}(\hat{\mathbf{d}}_{n+1}, \alpha_{n+1}^e, E_n) = \mathbf{0}. \quad (5.4)$$

L'équation (5.4) étant non linéaire par rapport à α_{n+1}^e , on la résout à l'aide d'un algorithme de Newton-Raphson. On construit donc la suite convergeant vers α_{n+1}^e définie par :

$$\begin{cases} \alpha_{n+1}^{e,(0)} = \alpha_n^e \\ \alpha_{n+1}^{e,(i+1)} = \alpha_{n+1}^{e,(i)} + \Delta \alpha_{n+1}^{e,(i)}, \quad \forall i \in \mathbb{N} \\ \mathbf{h}_{n+1}^{*,e,(i)} + \mathcal{D}(\mathbf{h}_{n+1}^{*,e,(i)})[\Delta \alpha_{n+1}^{e,(i)}] = \mathbf{0}, \quad \forall i \in \mathbb{N}, \end{cases} \quad (5.5)$$

où $\mathbf{h}_{n+1}^{*,e,(i)} = \mathbf{h}^{*,e}(\hat{\mathbf{d}}_{n+1}, \boldsymbol{\alpha}_{n+1}^{e,(i)}, E_n)$, et $\mathcal{D}(\mathbf{h}_{n+1}^{*,e,(i)})[\Delta\boldsymbol{\alpha}_{n+1}^{e,(i)}]$ désigne la dérivée directionnelle de $\mathbf{h}_{n+1}^{*,e,(i)}$ dans la direction $\Delta\boldsymbol{\alpha}_{n+1}^{e,(i)}$, définie par :

$$\mathcal{D}(\mathbf{h}_{n+1}^{*,e,(i)})[\Delta\boldsymbol{\alpha}_{n+1}^{e,(i)}] = \frac{d}{d\varepsilon} \mathbf{h}^{*,e}(\hat{\mathbf{d}}_{n+1}, \boldsymbol{\alpha}_{n+1}^{e,(i)} + \varepsilon \Delta\boldsymbol{\alpha}_{n+1}^{e,(i)}, E_n)|_{\varepsilon=0}. \quad (5.6)$$

Par ailleurs, d'après l'équation (4.51), on a :

$$\frac{d}{d\varepsilon} \mathbf{h}^{*,e}(\hat{\mathbf{d}}_{n+1}, \boldsymbol{\alpha}_{n+1}^{e,(i)} + \varepsilon \Delta\boldsymbol{\alpha}_{n+1}^{e,(i)}, E_n)|_{\varepsilon=0} = \frac{d}{d\varepsilon} \mathbf{h}^e(\hat{\mathbf{d}}_{n+1}, \boldsymbol{\alpha}_{n+1}^{e,(i)} + \varepsilon \Delta\boldsymbol{\alpha}_{n+1}^{e,(i)}, E_n)|_{\varepsilon=0} + \frac{\gamma}{\Delta t} \Delta\boldsymbol{\alpha}_{n+1}^{e,(i)} \quad (5.7)$$

Le calcul de la dérivée directionnelle de $\mathbf{h}_{n+1}^{e,(i)}$ est réalisé dans l'Annexe A. On obtient :

$$\mathcal{D}(\mathbf{h}_{n+1}^{*,e})[\Delta\boldsymbol{\alpha}_{n+1}^{e,(i)}] = \mathbf{K}_{h\alpha, n+1}^{*,e,(i)} \Delta\boldsymbol{\alpha}_{n+1}^{e,(i)}, \quad (5.8)$$

avec :

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_{h\alpha, n+1}^{*,e,(i)} &= \underbrace{\mathbf{K}_{h\alpha, n+1}^{mat, e, (i)} + \mathbf{K}_{h\alpha, n+1}^{geo, e, (i)}}_{\mathbf{K}_{h\alpha, n+1}^{e, (i)}} + \frac{\gamma}{\Delta t} \mathbf{1} \\ \mathbf{K}_{h\alpha, n+1}^{mat, e, (i)} &= \left(\left[\mathbf{n}^{\# \bullet} \quad \mathbf{m}^{\# \bullet} \right]^T \mathbf{n}_{\bullet}^{b, ns, T} \mathbf{H}^T \mathbf{c}^{an} \mathbf{B} + \left[\mathbf{n}_{\bullet}^{\#} \quad \mathbf{m}_{\bullet}^{\#} \right] + \overline{\overline{\mathbf{C}}}^{an} \right)_{n+1}^{(i)} \\ \mathbf{K}_{h\alpha, n+1}^{geo, e, (i)} &= \left(\left[\mathbf{n}^{\# \bullet} \quad \mathbf{m}^{\# \bullet} \right]^T \mathbf{n}_{\bullet}^{b, ns, T} \tilde{\boldsymbol{\tau}} \mathbf{B} + \left[\mathbf{n}_{\bullet}^{\#} \quad \mathbf{m}_{\bullet}^{\#} \right] \right)_{n+1}^{(i)} \end{aligned} \quad (5.9)$$

où :

$$\begin{aligned} \mathbf{n}^{\# \bullet} &= \begin{bmatrix} n^{\#1} \\ n^{\#2} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{m}^{\# \bullet} = \begin{bmatrix} m^{\#1} \\ m^{\#2} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{n}_{\bullet}^{\#} = \begin{bmatrix} n_1^{\#} \\ n_2^{\#} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{m}_{\bullet}^{\#} = \begin{bmatrix} m_1^{\#} \\ m_2^{\#} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{n}_{\bullet}^{b, ns} = \begin{bmatrix} n_1^b & 0 \\ n_2^b & 0 \\ 0 & n_1^b \\ 0 & n_2^b \end{bmatrix}, \quad \mathbf{H}^T = \\ \begin{bmatrix} \bar{a}_{11} & 0 & \bar{a}_{12} \\ 0 & \bar{a}_{12} & \bar{a}_{11} \\ \bar{a}_{12} & 0 & \bar{a}_{22} \\ 0 & \bar{a}_{22} & \bar{a}_{12} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{c}^{an} = \begin{bmatrix} c^{1111} & c^{1122} & c^{1112} \\ c^{2211} & c^{2222} & c^{2212} \\ c^{1211} & c^{1222} & c^{1212} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{B}^+ = \begin{bmatrix} N_{\hat{1}}^+ & 0 \\ 0 & N_{\hat{2}}^+ \\ N_{\hat{2}}^+ & N_{\hat{1}}^+ \end{bmatrix}, \quad \overline{\overline{\mathbf{C}}}^{an} = \begin{bmatrix} \overline{\overline{\mathbf{C}}}_N^{an} & 0 \\ 0 & \overline{\overline{\mathbf{C}}}_M^{an} \end{bmatrix}, \\ \tilde{\boldsymbol{\tau}} = \begin{bmatrix} 2\tau^{11} & 0 & \tau^{12} \\ 2\tau^{12} & 0 & \tau^{22} \\ 0 & 2\tau^{12} & \tau^{11} \\ 0 & 2\tau^{22} & \tau^{12} \end{bmatrix}, \quad \text{et } \mathbf{1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \end{aligned}$$

avec $n^{\#\alpha}$ et $m^{\#\alpha}$ (resp. $n_{\alpha}^{\#}$ et $m_{\alpha}^{\#}$) les composantes contravariantes (resp. covariantes) de $\underline{\mathbf{n}}^{\#}$ et $\underline{\mathbf{m}}^{\#}$, respectivement, dans la base $(\bar{\underline{a}}_{\alpha})_{\alpha}$ (resp. $(\bar{\underline{a}}^{\alpha})_{\alpha}$), $c^{\alpha\beta\gamma\delta}$ sont les composantes

contravariantes de $\underline{\underline{C}}^{an}$ dans la base $(\underline{\underline{a}}_\alpha)_\alpha$, $\underline{\underline{C}}^{an}$ étant le module tangent cohérent associé à la loi de comportement du matériau continu qui est calculé dans l'Annexe B, $N_{,\alpha}^+ = N_{,\alpha}^+ \frac{1}{1 + \underline{\underline{U}} \cdot \nabla^0 N^+}$, et $\overline{\underline{\underline{C}}}_N^{an}$ et $\overline{\underline{\underline{C}}}_M^{an}$ sont les modules tangents cohérents associés aux lois discrètes dans les directions \underline{N} et \underline{M} , respectivement, ils sont calculés dans l'Annexe B. La notation $(\cdot)_{n+1}^{(i)}$ signifie que les éléments à l'intérieur des parenthèses sont évalués pour l'incrément $n + 1$ et à l'itération i .

5.4 Intégration locale des lois de comportement

(5) Au niveau d'un élément localisé, au cours d'une itération i de l'algorithme de Newton-Raphson (5.5), pour déterminer $\mathbf{h}_{n+1}^{*,e,(i)}$ dans l'équation (5.5)₃, on doit calculer l'évolution des tensions $\underline{\underline{\tau}}_{n+1}^{(i)}$ et des tractions $\mathbf{t}_{n+1}^{(i)}$, connaissant le saut de déplacement $\alpha_{n+1}^{e,(i)}$. C'est au cours de ces calculs qu'on va déterminer l'évolution des variables internes au niveau de l'élément. On a alors le problème local suivant :

Connaissant : $\hat{\mathbf{d}}_{n+1}, \alpha_{n+1}^e, d_n, \overline{\underline{\underline{Q}}}_n, \overline{\underline{\underline{\xi}}}_n$

Trouver : $\underline{\underline{\tau}}_{n+1}, \mathbf{t}_{n+1}, d_{n+1}, \overline{\underline{\underline{Q}}}_{n+1}, \overline{\underline{\underline{\xi}}}_{n+1}$

Tels que : les lois constitutives (équations (2.18) et (2.28)₁), et les lois d'évolution des variables internes (équations (2.21), (2.37), et (2.35)) sous forme discrétisée temporellement, soient vérifiées.

L'objectif de cette partie est de décrire comment est résolu ce problème local. Nous allons donc expliciter quelles sont les lois incrémentales introduites dans l'équation (5.1), et comment est déterminée l'évolution des variables internes.

5.4.1 Calcul de $\underline{\underline{\tau}}_{n+1}$ et d_{n+1} (modèle local continu)

Pour approximer la loi d'évolution de l'endommagement (2.21) sous une forme implicite, on doit faire une hypothèse sur le chemin suivi par la variable Y entre les pas de temps n et $n + 1$. On fait la même hypothèse que dans les chapitres précédents, en supposant que Y évolue de manière linéaire sur un pas de temps. L'approximation de

5. Le terme *intégration*, dans le titre, se réfère à l'intégration numérique à laquelle on procède généralement pour résoudre les lois d'évolution des variables internes qui sont généralement formulées à partir d'une équation différentielle ordinaire d'ordre 1 en temps. Nous conservons cette terminologie bien que dans notre cas nous avons intégré analytiquement les lois d'évolution. Toutefois, les lois d'évolution que nous avons obtenues restent dépendantes de l'histoire du chargement, il faut donc dans notre cas aussi les approximer temporellement.

la loi d'évolution de l'endommagement est alors donnée par :

$$\begin{cases} d_{n+1} = \left[\kappa^{-1}(Y_{n+1}^{max}) \right]^+ \\ Y_{n+1}^{max} = \max\{Y_n^{max}, Y_{n+1}\}. \end{cases} \quad (5.10)$$

Le problème local au niveau d'un élément au niveau du milieu continu peut alors se formuler de manière générale sous la forme suivante :

Connaissant : $\hat{\mathbf{d}}_{n+1}, \alpha_{n+1}^{(i)}, d_n$

Trouver : $\underline{\tau}_{n+1}^{(i)}, d_{n+1}^{(i)}$

Tels que : la loi constitutive (éq. (2.18)₁), et la loi d'évolution de l'endommagement (éq. (5.10)) soient vérifiées.

La méthode de résolution est décrite dans l'algorithme 1.

Calcul du tenseur des tensions de Kirchhoff :

On calcule $\bar{\underline{\underline{e}}}_{n+1}$ d'après les équations (2.16) et (3.11)

On calcule Y_{n+1} d'après l'équation (2.18)₂

On calcule d_{n+1} d'après l'équation (5.10)

D'après l'équation d'état (2.18)₁, le tenseur des tensions de Kirchhoff $\underline{\tau}_{n+1}$ est alors donné par :

$$\underline{\tau}_{n+1} = (1 - d_{n+1}) \bar{\underline{\underline{e}}}_{n+1} \cdot \frac{\partial \phi_e}{\partial \bar{\underline{\underline{e}}}_{n+1}} \cdot \bar{\underline{\underline{e}}}_{n+1}^T \quad (5.11)$$

Algorithme 1: Algorithme de calcul du tenseur local des tensions de Kirchhoff.

On aboutit donc à une loi constitutive sous la forme incrémentale $\underline{\tau}_{n+1} = \underline{\tau}_{n+1}(\bar{\underline{\underline{e}}}_{n+1}, E_n)$ introduite dans l'équation (5.1)₁.

5.4.2 Calcul de \mathbf{t}_{n+1} , $\bar{\underline{\underline{Q}}}_{n+1}$, et $\bar{\underline{\underline{\xi}}}_{n+1}$ (modèle local discret)

On approxime les lois d'évolution des variables internes à partir de leurs formulations données par les équations (2.35) et (2.37). De la même manière que dans le cas du modèle d'endommagement du milieu continu, pour approximer ces lois sous une forme implicite, on doit faire une hypothèse sur le chemin suivi, dans ce cas par la variable α^e , entre les pas de temps n et $n + 1$. On suppose que α^e évolue de manière linéaire entre

deux pas de temps. Les lois d'évolution des variables internes sous forme approximée s'écrivent alors :

$$\begin{cases} \bar{\xi}_{j,n+1} = \max\{\bar{\xi}_{j,n}, |\alpha_{j,n+1}|\} \\ Q_{j,n+1} = \frac{\bar{\xi}_{j,n+1}}{t_c} \exp\left(\frac{t_c}{G_c} \bar{\xi}_{j,n+1}\right) \end{cases} \quad j \in \{N, M\}. \quad (5.12)$$

Le problème local en traction sur une discontinuité est alors formulé de la manière suivante :

Connaissant : $\alpha_{n+1}^{e,(i)}, \bar{Q}_n, \bar{\xi}_n, \underline{T}_{n+1}$
Trouver : $t_{n+1}^{(i)}, \bar{Q}_{n+1}^{(i)}, \bar{\xi}_{n+1}^{(i)}$
Tels que : les lois constitutives (éq. (2.28)₁), et les lois d'évolution des variables internes (éq. (5.12)) soient vérifiées.

On présente maintenant la méthode de résolution du problème local en traction.

Connaissant le saut de déplacement élémentaire $\alpha_{n+1}^{e,(i)}$, et les valeurs des variables d'état internes au pas de temps n , on détermine alors directement $\bar{\xi}_{n+1}^{(i)}$ et $\bar{Q}_{n+1}^{(i)}$ d'après l'équation (5.12).

Pour le calcul de $t_{n+1}^{(i)}$, on doit considérer différents cas. On présente d'abord les cas relatifs au calcul de $t_{N,n+1}^{(i)}$ (direction normale à la discontinuité).

Cas N-1 : $\alpha_{N,n+1}^{e,(i)} < 0$

En considérant l'interface comme étant rigide en compression, alors, pour l'incrément $n + 1$, on impose $\alpha_{N,n+1}^e = 0$, les variables internes n'évoluent pas, et on suppose que l'équation d'équilibre interne est vérifiée, on prend alors :

$$t_{N,n+1}^{(i)} = \underline{n}_{n+1}^{\#(i)} \cdot \underline{T}_{n+1}^{(i)} \cdot \underline{n}_{n+1}^{b(i)} - \frac{\gamma}{\Delta t} \Delta \alpha_{N,n+1}^{e,(i)}. \quad (5.13)$$

Cas N-2 : $\alpha_{N,n+1}^{e,(i)} = 0$ et $Q_{N,n+1}^{(i)} = 0$

L'équation d'état (2.28)₁ ne permet pas de conclure. On suppose que l'équilibre de l'interface est vérifié, on prend donc :

$$t_{N,n+1}^{(i)} = \underline{n}_{n+1}^{\#(i)} \cdot \underline{T}_{n+1}^{(i)} \cdot \underline{n}_{n+1}^{b(i)} - \frac{\gamma}{\Delta t} \Delta \alpha_{N,n+1}^{e,(i)}. \quad (5.14)$$

Si la valeur de la fonction seuil $\overline{f}_{N,n+1}^{(i)} = t_{N,n+1}^{(i)} - t_c$ n'est pas admissible ($\overline{f}_{N,n+1}^{(i)} > 0$), on se place à la limite de l'admissibilité ($\overline{f}_{N,n+1}^{(i)} = 0$) en prenant :

$$t_{N,n+1}^{(i)} = t_c. \quad (5.15)$$

Cas N-3 : $\alpha_{N,n+1}^{e,(i)} \geq 0$ et $Q_{N,n+1}^{(i)} \neq 0$

D'après l'équation d'état (2.28)₁, on a :

$$t_{N,n+1}^{(i)} = \frac{\alpha_{N,n+1}^{e,(i)}}{Q_{N,n+1}^{(i)}}. \quad (5.16)$$

Pour calculer $t_{M,n+1}^{(i)}$, il y a moins de cas à considérer puisque la loi discrète dans la direction \underline{M} ne dépend pas du signe de α_M .

Cas M-1 : $\alpha_{M,n+1}^{e,(i)} = 0$ et $Q_{M,n+1}^{(i)} = 0$

Ce cas est traité de la même manière que le cas N-2. On commence par supposer que l'équilibre de l'interface est vérifié, on prend donc :

$$t_{M,n+1}^{(i)} = \underline{m}_{n+1}^{\#(i)} \cdot \underline{\tau}_{n+1}^{(i)} \cdot \underline{n}_{n+1}^{b(i)} - \frac{\gamma}{\Delta t} \Delta \alpha_{M,n+1}^{e,(i)}. \quad (5.17)$$

Si la valeur de la fonction seuil $\overline{f}_M^{(i)} = |t_{M,n+1}^{(i)}| - t_c$ n'est pas admissible ($\overline{f}_M^{(i)} > 0$), on se place à la limite de l'admissibilité ($\overline{f}_M^{(i)} = 0$) en prenant :

$$\begin{cases} t_{M,n+1}^{(i)} = t_c & \text{si } \underline{m}_{n+1}^{\#(i)} \cdot \underline{\tau}_{n+1}^{(i)} \cdot \underline{n}_{n+1}^{b(i)} - \frac{\gamma}{\Delta t} \Delta \alpha_{M,n+1}^{e,(i)} > t_c \\ t_{M,n+1}^{(i)} = -t_c & \text{si } \underline{m}_{n+1}^{\#(i)} \cdot \underline{\tau}_{n+1}^{(i)} \cdot \underline{n}_{n+1}^{b(i)} - \frac{\gamma}{\Delta t} \Delta \alpha_{M,n+1}^{e,(i)} < -t_c. \end{cases} \quad (5.18)$$

Cas M-2 : $Q_{M,n+1}^{(i)} \neq 0$

D'après l'équation d'état (2.28)₁, on a :

$$t_{M,n+1}^{(i)} = \frac{\alpha_{M,n+1}^{e,(i)}}{Q_{M,n+1}^{(i)}}. \quad (5.19)$$

Comme dans le cas du modèle continu, d'après les développements de cette partie et l'équation (5.3), on aboutit donc à une loi constitutive sous la forme incrémentale $\mathbf{t}_{n+1}^* = \mathbf{t}_{n+1}^*(\alpha_{n+1}, E_n)$ introduite dans l'équation (5.1)₂.

5.5 Bilan

Dans cette partie, nous avons tout d'abord défini le problème à résoudre pour la membrane dans le cadre de la modélisation de la rupture d'une microcapsule en écoulement avec un modèle de discontinuités fortes. Comme dans les chapitres précédents, le problème à résoudre pour la membrane se fait sur un pas de temps connaissant les déplacements imposés par le fluide. Grâce à la méthode EFEM, ce problème peut se décomposer en trois sous-problèmes. On résout d'abord le problème local au niveau des points d'intégration pour déterminer l'évolution des variables d'états internes, puis, on résout le problème au niveau des éléments pour déterminer les sauts de déplacements dans les éléments localisés, enfin, on résout le problème au niveau global de la structure pour déterminer le chargement surfacique externe correspondant au saut de contraintes visqueuses des fluides sur la membrane.

La méthode de résolution de l'ensemble du problème associé à la membrane sur un pas de temps est illustrée sur la Figure 5.1, et elle est résumée dans les Algorithmes 2 et 3. La structure de l'algorithme implémenté dans le code FORTRAN pour résoudre le problème de la membrane est détaillée dans les Algorithmes 4, 5, et 6 en Annexe C.

Dans la partie suivante, nous allons d'abord présenter des tests de validation de l'implémentation du modèle de la membrane avec des discontinuités fortes. Nous présenterons ensuite les premiers résultats de la modélisation de la rupture d'une microcapsule en écoulement avec un modèle de discontinuités fortes.

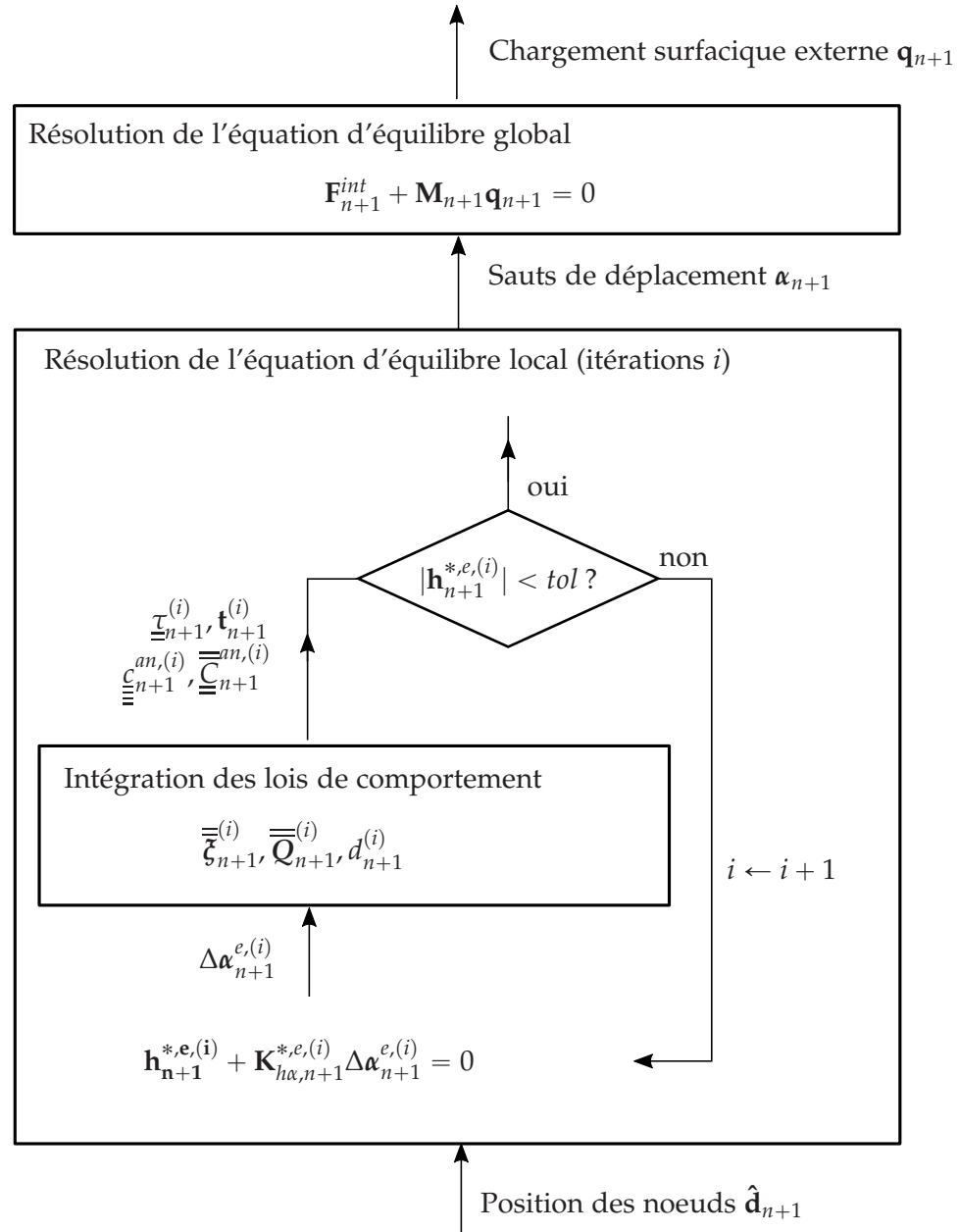


Figure 5.1 – Illustration de la méthode de résolution séquentielle du problème de la membrane. Le paramètre tol représente la tolérance pour le résidu de l'équation d'équilibre local. Les modules \bar{c}_{n+1}^{an} et \bar{C}_{n+1}^{an} sont définis dans l'Annexe B.

```

Input      :  $\hat{\mathbf{d}}_{n+1}, \boldsymbol{\alpha}_n, d_n, \overline{\overline{\mathbf{Q}}}_n, \overline{\overline{\boldsymbol{\zeta}}}_n$ 
Output    :  $\mathbf{q}_{n+1}, \boldsymbol{\alpha}_{n+1}, d_{n+1}, \overline{\overline{\mathbf{Q}}}_{n+1}, \overline{\overline{\boldsymbol{\zeta}}}_{n+1}$ 
Parameters:  $Y_D, Y_C, d_c, G_c$ 

for  $e = 1$  to  $N_e$  do // Loop over elements
     $\boldsymbol{\alpha}_{n+1}^e = \boldsymbol{\alpha}_n^e$  // Initialisations
    Compute tangent basis  $(\overline{\overline{\mathbf{a}}}_{\alpha, n+1})_\alpha$  from eq. (3.14)
    Compute Green-Lagrange strain  $\overline{\overline{\boldsymbol{\varepsilon}}}_{n+1} = \frac{1}{2} (\overline{\overline{\mathbf{a}}}_{\alpha\beta, n+1} - A_{\alpha\beta}) \underline{\underline{\mathbf{A}}}^\alpha \otimes \underline{\underline{\mathbf{A}}}^\beta$ 
    Compute damage  $d_{n+1}$  from eq. (5.10) and Kirchhoff tensions  $\underline{\underline{\boldsymbol{\tau}}}_{n+1}$  from eq.
    (5.11)
    if localization detected at time step  $n + 1$  or  $n$  then
         $i = 0, \boldsymbol{\alpha}_{n+1}^{e, (i)} = \boldsymbol{\alpha}_n^e$  // Initialisations
        Compute  $\mathbf{h}_{n+1}^{*, e, (i)}$  from eq. (4.51)
        Compute tangent modulus  $c_{n+1}^{an, (i)}$  from eq. (0.16), and tangent modulus
         $\overline{\overline{\mathbf{C}}}_{n+1}^{an, (i)}$  from eqs. (0.19), (0.20), (0.24), (0.25), or (0.26) (depending on cases)
        Compute tangent matrix  $\mathbf{K}_{h\alpha, n+1}^{*, e, (i)}$  from eq. (5.9)
        while  $|\mathbf{h}_{n+1}^{*, e, (i)}| > tol$  do
             $\boldsymbol{\alpha}_{n+1}^{e, (i+1)} = \boldsymbol{\alpha}_{n+1}^{e, (i)} - (\mathbf{K}_{h\alpha, n+1}^{*, e, (i)})^{-1} \mathbf{h}_{n+1}^{*, e, (i)}$ 
            Compute tangent basis  $(\overline{\overline{\mathbf{a}}}_{\alpha, n+1}^{(i+1)})_\alpha$  from eq. (3.14)
            Compute Green-Lagrange strain  $\overline{\overline{\boldsymbol{\varepsilon}}}_{n+1}^{(i+1)} = \frac{1}{2} (\overline{\overline{\mathbf{a}}}_{\alpha\beta, n+1}^{(i+1)} - A_{\alpha\beta}) \underline{\underline{\mathbf{A}}}^\alpha \otimes \underline{\underline{\mathbf{A}}}^\beta$ 
            Compute damage  $d_{n+1}^{(i+1)}$  from eq. (5.10) and Kirchhoff tensions  $\underline{\underline{\boldsymbol{\tau}}}_{n+1}^{(i+1)}$ 
            from eq. (5.11)
            Compute tangent modulus  $c_{n+1}^{an, (i+1)}$  from eq. (0.16)
            Compute  $\overline{\overline{\mathbf{Q}}}_{n+1}^{(i+1)}$  and  $\overline{\overline{\boldsymbol{\zeta}}}_{n+1}^{(i+1)}$  from eq. (5.12)
            Compute  $\mathbf{t}_{n+1}^{(i+1)}$  from eqs. (5.13), (5.14), (5.15), (5.16), (5.17), (5.18), or
            (5.19) (depending on cases).
            (continued in algorithm 3)
        end
    end
end

```

Algorithm 2: Algorithme de résolution du problème de la membrane sur un pas de temps (début). Les équations auxquelles il est fait référence avec les numérotations de la forme (0.X) sont données dans l'Annexe B.

```

for  $e = 1$  to  $N_e$  do // Loop over elements
  (...)
  if localization detected at time step  $n + 1$  or  $n$  then
    (...)
    while  $|\mathbf{h}_{n+1}^{*,e,(i)}| > tol$  do
      (continued from algorithm 2)
      Compute tangent modulus  $\bar{\bar{C}}_{n+1}^{an,(i+1)}$  from eqs. (0.19), (0.20), (0.24),
      (0.25), or (0.26) (depending on cases)
      Compute  $\mathbf{h}_{n+1}^{*,e,(i+1)}$  from eq. (4.51)
      Compute tangent matrix  $\mathbf{K}_{h\alpha,n+1}^{*,e,(i+1)}$  from eq. (5.9)
       $i = i + 1$ 
    end
  end
  // Elementary matrices for global equilibrium
   $\mathbf{F}_{n+1}^{int,e} = \int_{S_0^e} \mathbf{B}_{\bullet\bullet,n+1}^T \boldsymbol{\tau}_{n+1}^{\bullet\bullet} dS_0$ 
   $\mathbf{M}_{n+1}^e = \int_{\hat{S}_{n+1}^e} \mathbf{N}^T \mathbf{N} d\hat{S}$ 
end
  Solve  $\mathbf{F}_{n+1}^{int} - \mathbf{M}_{n+1} \mathbf{q}_{n+1} = \mathbf{0}$  (eq. (3.17)1) to find  $\mathbf{q}_{n+1}$ 

```

Algorithm 3: Algorithme de résolution du problème de la membrane sur un pas de temps (fin). Les équations auxquelles il est fait référence avec les numérotations de la forme (0.X) sont données dans l'Annexe B.

6 Validation et premiers résultats

Dans cette partie, on commence par tester l'algorithme permettant de résoudre le problème local de l'équilibre d'une discontinuité avec le modèle de régularisation visqueux, en étudiant le comportement d'un élément. On vérifie ensuite l'aspect régularisant du modèle des discontinuités fortes en étudiant le comportement d'une membrane rectangulaire en traction uniaxiale maillée avec différentes tailles d'éléments. Enfin nous présenterons les premiers résultats obtenus sur la rupture d'une microcapsule en écoulement hyperbolique plan avec le modèle de discontinuités fortes.

Dans toute cette partie, pour le modèle de comportement du milieu continu donné en section 2.2, nous choisissons un potentiel hyperélastique $\bar{\phi}_e$ (éq. (2.17)) correspondant à une loi néo-Hookéenne :

$$\bar{\phi}_e = \frac{G_s}{2} \left(I_1 + \frac{1}{I_2 + 1} \right), \quad (6.1)$$

où I_1 et I_2 sont les invariants définis dans l'équation (3.2) du chapitre 3, et, pour les paramètres de la fonction d'endommagement κ (éq. (2.20)), sauf si elles sont précisées autrement, nous prenons les valeurs indiquées dans le tableau 6.1.

Pour le modèle de comportement de la discontinuité, nous choisissons une valeur pour l'endommagement critique d_c qui assure que la discontinuité soit introduite dans un élément avant que l'instabilité locale associée au modèle de comportement du milieu continu ne se produise. Pour les valeurs des paramètres Y_D et Y_C choisis dans le tableau 6.1, on trouve que cette instabilité se produit pour $d \simeq 0.1$ dans un état de tension équilibriale, et pour $d \simeq 0.3$ dans un état de tension uniaxiale. Nous prendrons pour la suite $d_c = 0.2$. La valeur de G_c sera précisée en fonction des cas considérés dans cette partie.

6.1 Remarque préliminaire

Les tests qui sont réalisés sur un élément ou sur une membrane en traction sont résolus dans le cadre d'un problème de structure. Le problème de la membrane au niveau global est dans ce cas formulé différemment, car ce sont les déplacements et/ou le chargement qui sont imposés sur le bord de la membrane, et on cherche les déplacements des

Y_D/G_s	0.2
Y_C/G_s	2.0

Tableau 6.1 – Paramètres du modèle continu.

nœuds de la membrane. La méthode de résolution du problème global est alors dans ce cas itérative car le problème global est non-linéaire par rapport aux déplacements. Toutefois, au niveau local des éléments et des points d'intégrations, les problèmes restent inchangés car, pour chaque itération au niveau global, les déplacements sont imposés au niveau local.

Ainsi, les tests réalisés seulement sur la membrane permettent bien de valider le modèle de discontinuités fortes développé dans ce chapitre.

6.2 Validation de la régularisation visqueuse

Dans cette section, on souhaite valider la méthode de résolution du problème local de l'équilibre d'une discontinuité avec la régularisation visqueuse. Pour cela, nous allons considérer à nouveau le cas étudié dans la section 4.1 correspondant à un élément en traction uniaxiale. L'objectif est de vérifier que l'algorithme converge bien avec le modèle de viscosité, et de montrer qu'en diminuant le pas de temps (ou l'incrément de chargement), on peut bien converger vers une solution "non visqueuse", c'est-à-dire une solution qu'on obtiendrait sans régularisation visqueuse. Pour obtenir la solution "non visqueuse", on résout l'équation (4.1), où il n'y a pas de viscosité, avec un algorithme de Newton-Raphson que l'on initialise différemment par rapport à l'algorithme (5.5). Cette méthode pour déterminer la solution "non visqueuse" est facile à mettre en œuvre dans le cas présent mais elle serait trop difficile à mettre en œuvre pour résoudre le problème local de l'équilibre d'une discontinuité de manière générale.

Le chargement de l'élément est imposé en contrôlant son allongement λ dans la direction de traction (Figure 4.1). La réponse de l'élément dépend à la fois de l'histoire d'évolution de λ (son chemin), mais aussi de sa vitesse d'évolution. On impose une vitesse d'évolution constante à λ , et qui reste la même quel que soit le pas de temps choisi. Si le coefficient de viscosité γ est lui aussi fixé, la réponse de la loi cohésive, et donc celle de l'élément, sera alors la même quel que soit le pas de temps choisi. Ce serait le but recherché si l'on cherchait effectivement à modéliser une viscosité qui ait un sens physique, mais, dans notre cas où la viscosité sert à régulariser le problème, on ne peut alors dans ce cas pas tendre vers une solution "non-visqueuse" en diminuant le pas de temps.

Toutefois, comme dans notre cas le paramètre γ n'a pas de sens physique, on peut adapter sa valeur en fonction du pas de temps, de manière à assurer la convergence de l'algorithme tout en minimisant la dissipation associée à la viscosité. Pour un pas de temps donné, plus on diminue la valeur de γ , plus on réduit l'effet de la viscosité

dans les phases d'évolution où les solutions sont stables. Par ailleurs, pour une valeur de γ donnée, il existe un pas de temps critique Δt^{crit} au-delà duquel l'algorithme ne converge plus. De manière générale, Δt^{crit} croît avec γ . Ainsi, si on souhaite rendre aussi petit que l'on veut la dissipation visqueuse (dans les phases stables) devant les autres dissipations du problème en diminuant la valeur de γ , alors comme Δt^{crit} diminue avec γ , il faut prendre des pas de temps de plus en plus petit pour converger. Il existe des algorithmes permettant de déterminer automatiquement la valeur de γ en fonction de Δt de manière à minimiser la dissipation visqueuse tout en assurant la convergence de l'algorithme (Oliver & Huespe, 2004b). Toutefois, dans notre cas, nous déterminons γ de manière empirique, en testant plusieurs valeurs.

Dans les tests présentés ici pour différents pas de temps Δt , la valeur de γ est choisie de telle sorte que le rapport $\gamma/\Delta t$ soit le même pour les différents tests. On a alors γ qui décroît avec Δt , ce qui doit permettre de diminuer la dissipation visqueuse sur la discontinuité, avec le pas de temps. La valeur à choisir pour le rapport $\gamma/\Delta t$ afin d'assurer la convergence de l'algorithme dépend alors peu de la valeur de Δt mais surtout de la valeur de G_c . Ici on prend $G_c/(G_s h) = 1.0$ (on rappelle que l'unité de G_c est en J/m). On choisit alors $(\gamma h)/(\Delta t G_s) = 5$, qui convient pour assurer la convergence de l'algorithme pour les différents pas de temps considérés.

La réponse de l'élément en traction uniaxiale, qui correspond à la courbe d'évolution de l'effort de traction $|F_t|$ (Figure 4.1) en fonction de l'allongement λ , est présentée dans la Figure 6.1 pour différentes valeurs du pas de temps. Le pas de temps Δt_{ref} correspond au pas de temps le plus grand qui ait été pris. La réponse "non-visqueuse" est aussi représentée sur la Figure 6.1. On voit que l'on parvient bien à faire tendre la réponse de l'élément vers la réponse "non visqueuse" lorsque l'on réduit le pas de temps. Dans la phase où l'interface s'ouvre, on a réalisé une décharge suivie d'une charge pour le pas de temps le plus petit ($\Delta t_{ref}/10$) et pour le cas "non visqueux". Les deux courbes se superposent bien. Les flèches indiquent le sens de parcours sur ces deux courbes. Nous analyserons ces courbes dans la partie 6.3 où nous allons étudier le cas d'une membrane en traction.

6.3 Validation de l'invariance au maillage

Dans cette partie, on souhaite vérifier que le modèle de discontinuités fortes qui a été développé permet bien d'obtenir une solution objective vis-à-vis du maillage de la membrane, c'est-à-dire, que la solution obtenue converge bien lorsqu'on diminue la taille des éléments du maillage. Pour cela, on va considérer une membrane rectangu-

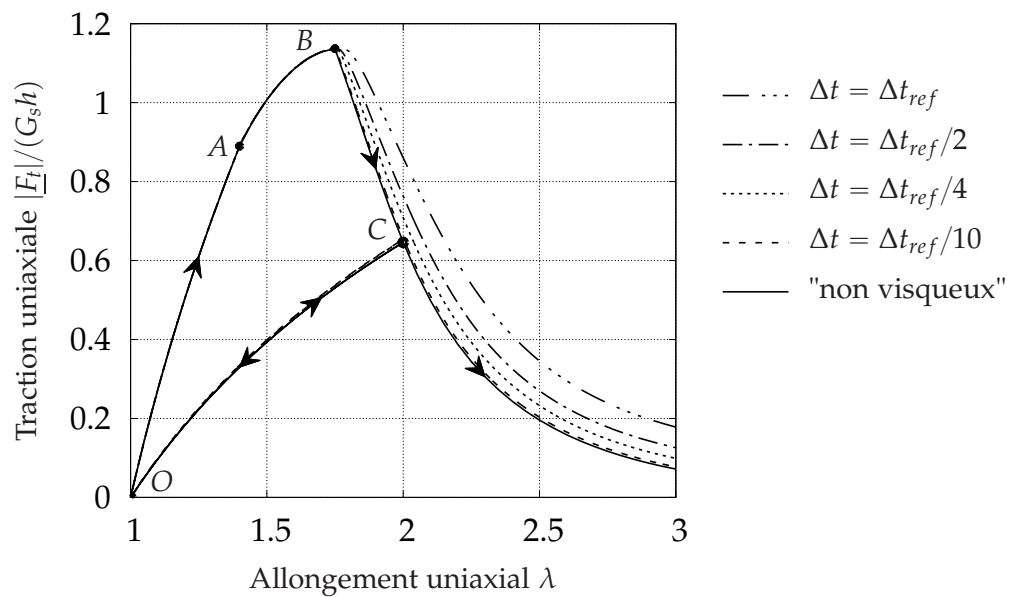


Figure 6.1 – Pour l'élément en traction uniaxiale représenté en Figure 4.1, évolution de l'effort de traction $|F_t|$ en fonction de l'allongement λ imposé, pour différentes valeurs du pas de temps Δt . La courbe en trait continu représente la solution obtenue sans modèle de viscosité ("non visqueux"). Pour la courbe correspondant au pas de temps $\Delta t = \Delta t_{ref}/10$, et pour celle correspondant au modèle "non visqueux", une décharge a été effectuée à partir du point C ; les flèches indiquent le sens dans lequel sont parcourues ces courbes. Les résultats sont obtenus pour $Y_D/G_s = 0.2$, $Y_C/G_s = 2.0$, $d_c = 0.2$, $G_c/(G_s h) = 1.0$, et $(\gamma h)/(\Delta t G_s) = 5$.

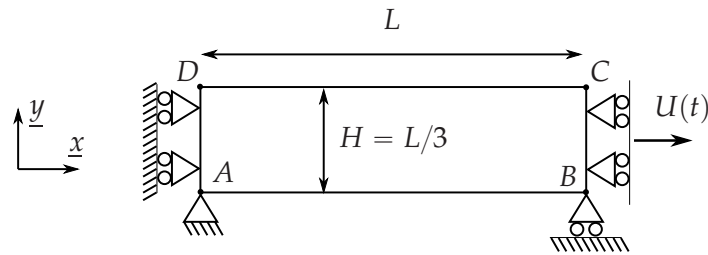


Figure 6.2 – Membrane rectangulaire soumise à une sollicitation de traction uniaxiale.

laire soumise à un chargement de traction uniaxiale (Figure 6.2). Les conditions limites essentielles sont les suivantes. Le sommet A est encastred. Le degré de liberté du point B suivant la direction \underline{y} est bloqué. Le degré de liberté suivant la direction \underline{x} est bloqué pour les points se situant sur le côté AD . Enfin, on impose le déplacement $U(t)$ suivant la direction \underline{x} à l'ensemble des points se situant sur le côté BC .

L'essai de traction sur la membrane est réalisé pour les deux maillages présentés en Figure 6.3. Les éléments du maillage (b) ont une taille caractéristique deux fois plus petite que ceux du maillage (a). Comme la membrane est en déformation homogène jusqu'à l'apparition de la localisation, et donc que l'endommagement est lui aussi uniforme avant la localisation, alors le critère d'introduction de la discontinuité (eq. (2.40)) va se trouver être vérifié en tout point de la membrane au même instant. Un problème de bifurcation se pose donc (il y a perte d'unicité de la solution). Pour ne pas que tous les éléments de la membrane se localisent, on choisit d'"affaiblir" une zone de la membrane (éléments grisés sur la Figure 6.3). Pour cela, on attribue aux éléments dans la zone affaiblie la valeur d'endommagement critique $d_c = 0.20$ tandis que pour les éléments du reste du maillage on prend $d_c = 0.21$. La zone de bifurcation se trouve donc réduite à la zone affaiblie. Tous les éléments dans la zone affaiblie vont se localiser en même temps, mais les erreurs numériques vont permettre d'avoir naturellement une zone de localisation qui se forme.

On fait évoluer le déplacement $U(t)$ de manière à imposer à la membrane le même chargement que dans la partie 6.2. Ainsi, la vitesse de $U(t)$ est constante, on impose une charge jusqu'à 6% d'allongement uniaxial de la membrane ($U/L = 0.06$), puis on décharge, et enfin on impose une nouvelle charge jusqu'à 10% d'allongement ($U/L = 0.1$). On prend le même pas de temps Δt pour les essais avec les deux maillages, correspondant à des incréments de U entre deux pas de temps de $5 \times 10^{-5} \times L$. Pour les paramètres restants du modèle, on prend $Y_D/G_s = 1 \times 10^{-3}$, $Y_C/G_s = 1 \times 10^{-2}$, $G_c/(G_s L) = 5 \times 10^{-4}$, et $(\gamma L)/(\Delta t G_s) = 100$.

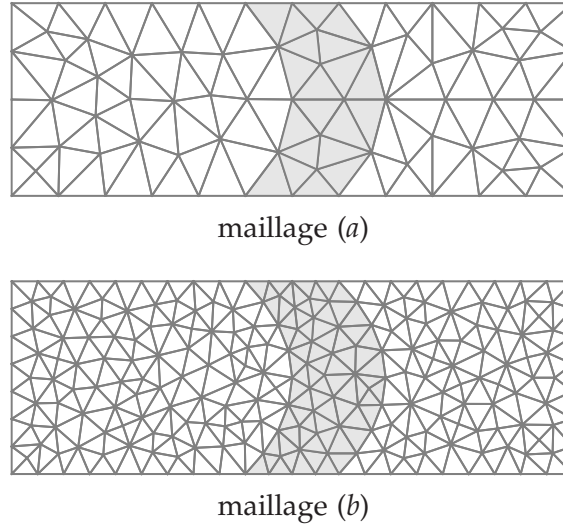


Figure 6.3 – Maillages de la membrane rectangulaire représentée en Figure 6.2. Le maillage (b) a des éléments de taille caractéristique deux fois plus petite que les éléments du maillage (a). Les éléments grisés ont un endommagement critique $d_c = 0.20$, tandis que pour les autres éléments $d_c = 0.21$.

Pour la suite, on introduit la norme du saut de déplacement spatial associé au mode I $\bar{\bar{u}}_N = \|\alpha_N \underline{n}^\sharp\|$, et l'allongement principal maximum $\bar{\lambda}_{max}$ défini par :

$$\bar{\lambda}_{max} = \sqrt{2\bar{e}_{max} - 1}, \quad (6.2)$$

où \bar{e}_{max} est la déformation principale maximum du tenseur de Green-Lagrange $\bar{\underline{e}}$ que nous avons introduit dans l'équation (2.16).

Sur la Figure 6.4 sont représentées les courbes de : (i) l'effort de traction résultant (noté F) dans la direction \underline{x} mesuré sur le côté BC de la membrane, (ii) la valeur maximum de $\bar{\bar{u}}_N$ sur l'ensemble des éléments localisés $\bar{\bar{u}}_N^{max}$ (tant qu'il n'y a pas d'élément localisé on prend $\bar{\bar{u}}_N^{max} = 0$), (iii) et la valeur moyenne de $\bar{\lambda}_{max}$ sur l'ensemble des éléments $\langle \bar{\lambda}_{max} \rangle$, en fonction de l'allongement $1 + U/L$ de la membrane.

Par ailleurs, pour les maillages de la Figure 6.3, les cartographies de $\bar{\bar{u}}_N$ et $\bar{\lambda}_{max}$ sont représentées dans la Figure 6.5, et dans la Figure 0.1 de l'Annexe D, respectivement, pour trois valeurs de l'allongement U/L . Sur ces cartographies, on a aussi représenté les lignes de discontinuités en traits gras.

Il convient ici de préciser comment sont définies les "lignes de discontinuités" représentées par exemple sur la Figure 6.5. Tout d'abord, sur la Figure 6.5, c'est la configuration \hat{S} qui est représentée, celle donnée par la position des nœuds du maillage. Par ailleurs, dans un élément, le segment de discontinuité Γ_0^e dans la configuration de réf-

rence correspond à deux segments dans la configuration courante \bar{S} , qui sont séparés par le saut de déplacement. Comme ces deux segments sont parallèles (car le saut de déplacement est constant), les lignes de discontinuité représentées en Figure 6.5 représentent leur orientation. Ces lignes de discontinuités sont donc orientées selon la direction m^\sharp (éq. (2.39)), et elles passent par le centre de l'élément. Toutefois, il s'agit d'une interprétation car la configuration \bar{S} n'intervient dans le modèle qu'à travers les déformations qui y ont lieu, on ne modélise pas géométriquement cette configuration.

Décrivons le comportement de la membrane. Au départ ($t = 0$), la membrane est dans la configuration de référence correspondant au point O sur les courbes de la Figure 6.4. Du point O au point A , à mesure que l'on augmente le déplacement $U(t)$, l'effort de traction F croît, et le comportement de la membrane est élastique. À partir du point A , l'endommagement s'initie. Du point A au point B , à mesure que l'on augmente $U(t)$, l'effort F continue de croître, et la variable d'endommagement d croît uniformément dans la membrane. Lorsqu'on atteint le pic de la courbe (point B), l'endommagement atteint la valeur critique $d = d_c$ pour les éléments dans la zone affaiblie. À cet instant, les discontinuités sont donc introduites dans ces éléments, et elles sont perpendiculaires à la direction de traction (Figure 6.5i, les discontinuités sont représentées en traits gras).

Du point B au point C , on est dans une phase de comportement dite *post-pic* qui est caractérisée par une diminution de l'effort F lorsque le déplacement imposé $U(t)$ augmente. Au cours de cette phase, les surfaces de discontinuité introduites s'ouvrent en mode I dans une rangée d'éléments dans la largeur de la membrane (Figure 6.5ii). Dans ces éléments, la variable d'écrouissage $\bar{\xi}_N$, et le module de souplesse \bar{Q}_N croissent. Les autres éléments localisés se sont simplement activés mais ils se comportent en fait comme le reste des éléments de la membrane (non localisés). L'activation de ces éléments est simplement due au problème de bifurcation évoqué plus haut, mais les erreurs numériques ont naturellement choisi une branche de bifurcation qui correspond à l'apparition de la localisation dans une bande d'éléments, sur leurs lignes de discontinuités. On peut donc interpréter qu'il y a une unique zone de localisation qui traverse la membrane, à l'intérieur de la bande d'éléments. On notera que \bar{u}_N est homogène dans la bande d'éléments, et sa valeur correspond à \bar{u}_N^{max} .

Hors des discontinuités, pendant la phase entre les points B et C , le matériau se décharge élastiquement (l'endommagement n'évolue pas) de manière homogène sur toute la membrane. Comme $\bar{\lambda}_{max}$ est homogène (Figure 0.1ii de l'Annexe D), il correspond donc à la valeur de $\langle \bar{\lambda}_{max} \rangle$ (nous avons introduit $\langle \bar{\lambda}_{max} \rangle$ pour tenir compte, en toute rigueur, des fluctuations de $\bar{\lambda}_{max}$ dues aux erreurs numériques).

À partir du point C , on impose une décharge en diminuant $U(t)$. Du point C au point O , à mesure que l'on diminue $U(t)$, l'effort F décroît, les discontinuités se referment élastiquement (\bar{u}_N décroît, et $\bar{\xi}_N$ et \bar{Q}_N n'évoluent plus), et le matériau hors discontinuité poursuit sa décharge élastique. Au niveau du point O , la membrane a la même géométrie que dans sa configuration de référence (car il n'y a pas de déformations permanentes).

À partir du point O , on augmente à nouveau $U(t)$. Du point O au point C , on repasse par la courbe de décharge dans le sens inverse. Au cours de cette phase, les discontinuités s'ouvrent élastiquement (\bar{u}_N croît, et $\bar{\xi}_N$ et \bar{Q}_N n'évoluent pas), et le milieu hors discontinuité se déforme élastiquement. Au cours de la décharge et de la charge entre les points O et C , l'ensemble de la membrane a donc un comportement purement élastique. Ainsi, au niveau du point C , la membrane est donc dans l'état dans lequel elle était au même point avant la décharge. Ainsi, en augmentant $U(t)$, tout se passe comme si on poursuivait la transformation qui avait eu lieu entre B et C . On notera que tout au long du chargement, les discontinuités qui se sont ouvertes sont restées orientées avec une direction perpendiculaire à la direction de l'effort de traction (Figure 6.5iii).

Finalement, les résultats de la Figure 6.4 montrent que les courbes obtenues pour les deux maillages se superposent. Ce résultat permet de vérifier que le modèle des discontinuités fortes permet d'obtenir des solutions qui soient objectives vis-à-vis du maillage : les solutions obtenues ne dépendent pas de la taille des éléments.

6.4 Modélisation de la rupture de microcapsules en écoulement : premiers résultats

L'objectif de cette partie est de présenter les premiers résultats obtenus sur la modélisation de la rupture d'une microcapsule en écoulement à partir du modèle de discontinuités fortes.

Dans une partie préliminaire, nous allons voir comment nous allons caractériser l'état de rupture d'une capsule à partir de la quantification de l'énergie dissipée au niveau des discontinuités. Nous étudierons ensuite la localisation pour une capsule en écoulement hyperbolique plan en considérant un cas test. Nous étudierons l'influence de l'énergie de rupture, c'est-à-dire le paramètre G_c , sur la rupture de la capsule, et la sensibilité de la solution au maillage.

6.4.1 Énergie dissipée sur une discontinuité

Nous avons vu que dans un modèle de zone cohésive, le travail du vecteur traction avec le saut de déplacement permettant de séparer complètement les deux surfaces

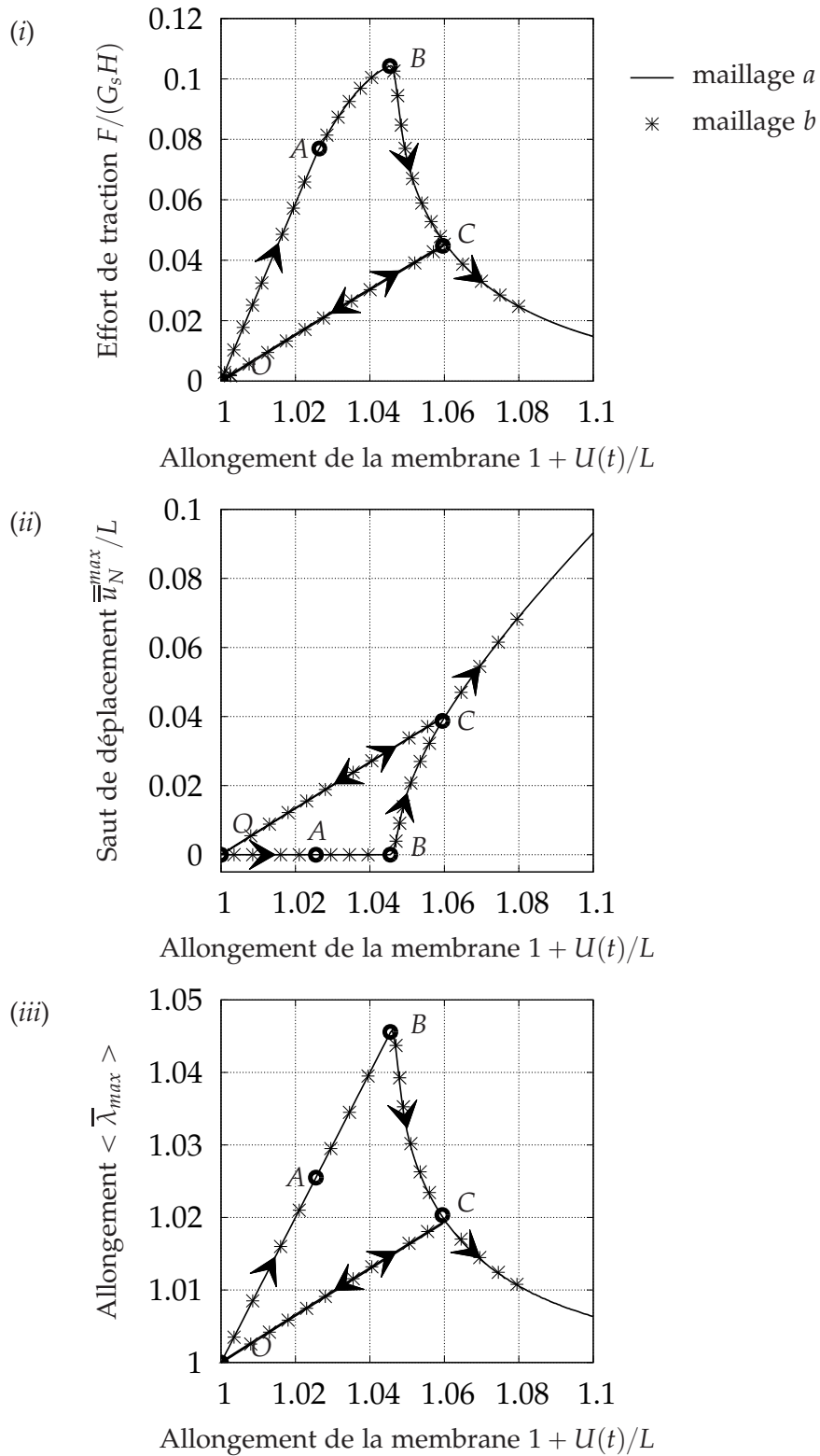


Figure 6.4 – Pour la membrane représentée en Figure 6.2, évolution de l'effort de traction uniaxial F , du saut de déplacement \bar{u}_N^{max}/L , et de l'allongement $\langle \bar{\lambda}_{max} \rangle$, en fonction de l'allongement de la membrane $1 + U(t)/L$, pour les maillages représentés dans la Figure 6.3. Les flèches indiquent le sens dans lequel sont parcourues les courbes au cours du chargement. Les résultats sont obtenus pour $Y_D/G_s = 1 \times 10^{-3}$, $Y_C/G_s = 1 \times 10^{-2}$, $G_c/(G_s L) = 5 \times 10^{-4}$, et $(\gamma L)/(\Delta t G_s) = 100$. Pour la valeur de d_c , voir la Figure 6.3.

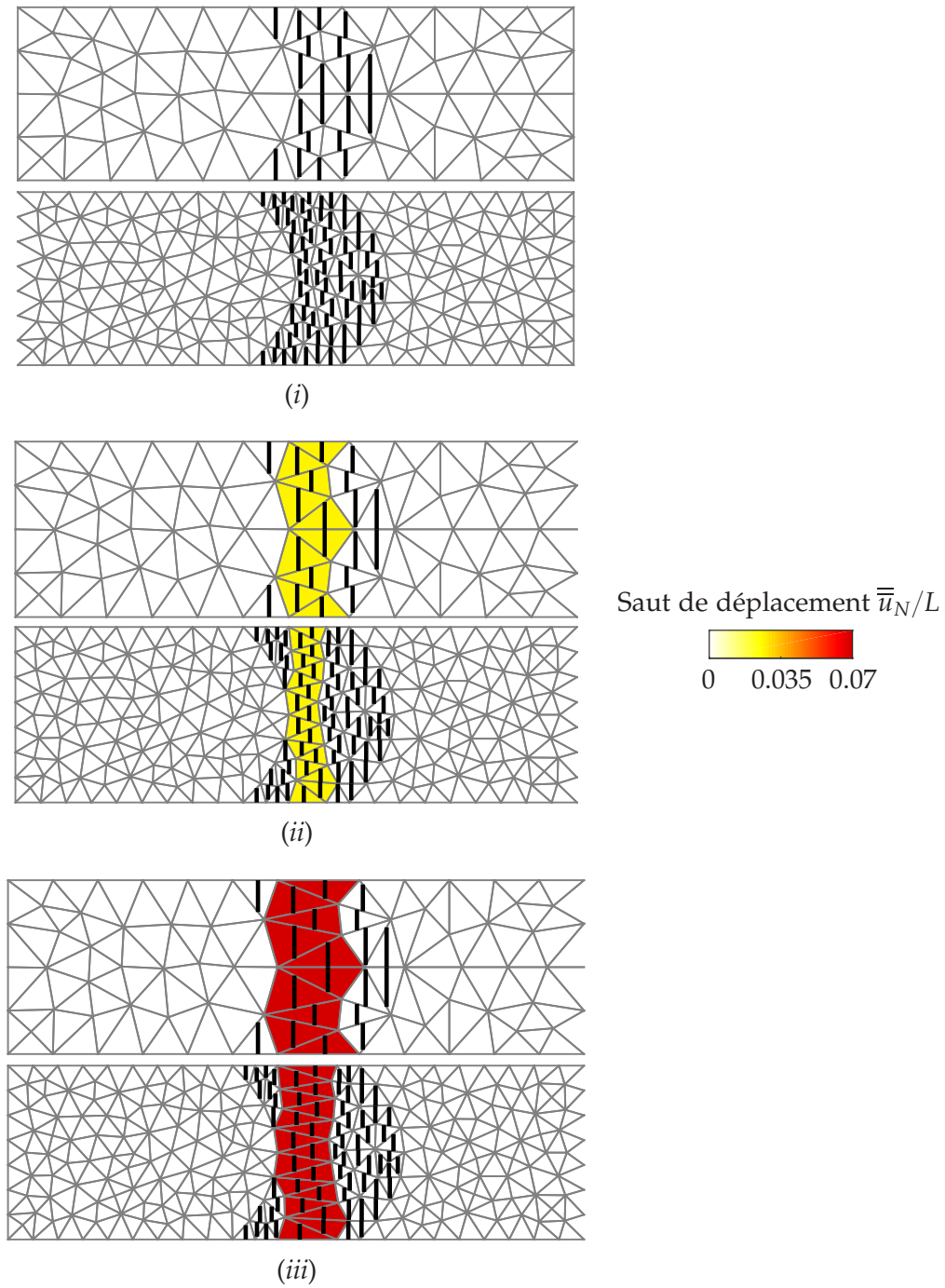


Figure 6.5 – Cartographie de la norme du saut de déplacement spatial associé à l’ouverture des discontinuités en mode I $\bar{u}_N = \|\alpha_N \underline{u}^\sharp\|$ (i) à l’instant où la localisation apparaît dans la membrane, (ii) à un instant correspondant à un point sur les courbes de la Figure 6.4 entre les points B et C, et (iii) pour 7% d’allongement ($U(t)/L = 0.07$). Les maillages correspondent aux configurations déformées \hat{S} (sans agrandissement) des maillages de la Figure 6.3, le maillage (a) étant celui représenté sur le dessus. Les traits forts représentent les discontinuités dans les éléments localisés. Les résultats sont obtenus pour $\gamma_D/G_s = 10^{-3}$, $\gamma_C/G_s = 10^{-2}$, $G_c/(G_s L) = 5 \times 10^{-4}$, et $(\gamma L)/(\Delta t G_s) = 100$. Pour la valeur de d_c , voir la Figure 6.3.

cohésives correspond à l'énergie dissipée dans la process zone par unité de surface de fissure créée. Cette énergie, linéique dans notre cas, correspond à l'aire sous la courbe de la loi cohésive, que nous avons représentée sur la Figure 2.5 pour le mode I, et elle correspond à la valeur du paramètre G_c .

On se propose alors de quantifier l'état d'endommagement d'une surface de discontinuité en comparant l'énergie dissipée dans la surface de discontinuité, à la valeur du paramètre G_c . Dans notre cas, les lois cohésives étant indépendantes selon les modes I et II, on compare alors séparément les énergies dissipées selon chacun des deux modes.

Calculons l'énergie dissipée, par unité de longueur, sur la discontinuité selon le mode I. Soit \mathcal{D}_N cette dissipation linéique. Dans le cadre de la thermodynamique des processus irréversibles pour les interfaces, à l'instant t , cette dissipation est donnée par :

$$\mathcal{D}_N(t) = \int_0^t Y_N \dot{Q}_N + \bar{q}_N \dot{\bar{\zeta}}_N dt \quad (6.3)$$

où $\bar{\zeta}_N$ et Q_N sont les variables d'états associées à la discontinuité (pour le mode I), et Y_N et \bar{q}_N sont leurs variables duales respectives (voir la partie 2.2.3 pour les définitions). Étudions alors l'expression de chacune des variables. Pour les variables duales, d'après l'équation (2.28)₂, Y_N s'exprime en fonction de t_N , et l'expression de \bar{q}_N est donnée par l'équation (2.28)₃. Pour les variables d'état, d'après l'équation (2.30), les variations \dot{Q}_N et $\dot{\bar{\zeta}}_N$ seront non nulles uniquement dans le cas où $\bar{\lambda}_N > 0$. En suivant le même raisonnement que dans la partie 2.2.3, on a alors t_N donné par l'équation (2.33) et \dot{Q}_N donné par l'équation (2.34). Après intégration, on obtient :

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_N(t) &= G_c \left(1 - \exp \left(-\frac{t_c \bar{\zeta}_N}{G_c} \right) \right) - \frac{\bar{\zeta}_N^2}{2Q_N} \\ &= G_c \underbrace{\left\{ \left(1 - \exp \left(-\frac{t_c \bar{\zeta}_N}{G_c} \right) \right) - \frac{\bar{\zeta}_N^2}{2G_c Q_N} \right\}}_{\beta_N} \end{aligned} \quad (6.4)$$

où β_N , qui est compris entre 0 et 1, désigne le rapport de dissipation en mode I, qui permet d'évaluer le degré d'endommagement de la discontinuité selon ce mode. Lorsque $\beta_N = 0$, la discontinuité n'est pas endommagée en mode I, et lorsque $\beta_N = 1$, elle est complètement endommagée suivant ce même mode.

Dans le cas de la loi cohésive que nous avons choisie, nous avons :

$$\lim_{\bar{\xi}_N \rightarrow \infty} \beta_N = 1. \quad (6.5)$$

En pratique, nous considérons donc le critère suivant :

$$\beta_N \geq 0.9 \Rightarrow \text{interface complètement endommagée en mode I.} \quad (6.6)$$

Pour la suite, on notera β_M le rapport de dissipation associé au mode II et défini de manière similaire à β_N .

6.4.2 Modélisation de la rupture d'une microcapsule en écoulement hyperbolique plan

On souhaite effectuer un premier test du modèle de rupture d'une capsule dans un écoulement. Nous avons choisi de faire cette étude en considérant un écoulement standard hyperbolique plan, car c'est un écoulement sans vorticité ce qui permet *a priori* d'enlever un degré de complexité par rapport au cas de l'écoulement de cisaillement simple que nous avons considéré dans les chapitres précédent, car il n'y a pas de rotation de la capsule.

Dans la suite, dans la partie 6.4.2.1, nous définissons le problème d'interaction fluide-structure. Dans les parties 6.4.2.2 et 6.4.2.3, nous discutons du choix des paramètres pour les cas que nous allons considérer. Nous étudierons ensuite la rupture d'une capsule dans l'écoulement hyperbolique plan pour un cas de référence dans la partie 6.4.2.4, et nous étudierons l'influence de l'énergie de rupture G_c dans la partie 6.4.2.5.

6.4.2.1 Définition du problème

On considère une microcapsule initialement sphérique de rayon a dans un écoulement hyperbolique plan (Figure 6.6). Outre la forme de l'écoulement externe, les hypothèses du problème d'interaction fluide-structure, ainsi que les notations, restent les mêmes que dans le chapitre 2. Dans le repère cartésien $(O, \underline{e}_x, \underline{e}_y, \underline{e}_z)$ aligné avec les directions de l'écoulement, le champ de vitesse non-perturbé \underline{v}^∞ est donné par :

$$\underline{v}^\infty(\underline{x}) = \dot{\gamma} (x\underline{e}_x - z\underline{e}_z). \quad (6.7)$$

où $\dot{\gamma}$ désigne toujours le taux de cisaillement. À l'instant initial $t = 0$, le centre de gravité de la capsule coïncide avec le point O . Le paramètre adimensionnel qui contrôle

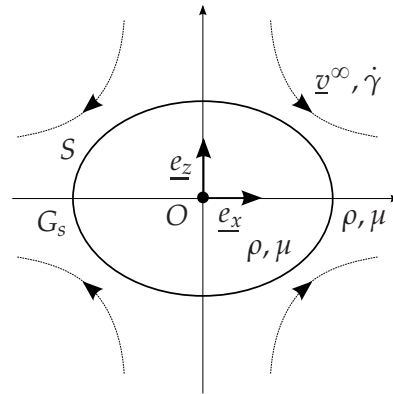


Figure 6.6 – Capsule en suspension dans un écoulement hyperbolique plan.

le problème d'interaction fluide-structure est toujours le nombre capillaire $Ca = \mu\dot{\gamma}a/G_s$, où, on le rappelle, μ désigne la viscosité dynamique des fluides interne et externe. Dans la suite, nous considérons les différentes quantités sous leurs formes adimensionnées. Les longueurs sont adimensionnées par a , les tensions par G_s , et le temps par $1/\dot{\gamma}$. Ainsi, le paramètre G_c , dont l'unité est en J/m (Joule/mètre), est adimensionné par $G_s a$.

6.4.2.2 Choix des paramètres du modèle

Pour ce premier test du modèle de rupture d'une capsule en écoulement, nous allons nous placer à une valeur donnée du nombre capillaire. Nous allons considérer deux valeurs du paramètre G_c pour étudier son influence sur la rupture de la capsule. Pour l'une des valeurs de G_c , nous souhaitons pouvoir étudier l'influence de la taille du maillage, sans qu'il n'y ait d'influence du modèle de régularisation visqueux ($\gamma = 0$). Nous avons vu que le modèle de la membrane est objectif vis-à-vis de la taille du maillage dans la partie 6.3, il s'agit donc ici de voir l'influence qu'a le fluide.

Étant donné que pour une capsule ayant une membrane obéissant à une loi hyperélastique néo-Hookéenne, il n'existe pas d'état d'équilibre pour une valeur du nombre capillaire supérieure à $Ca_\infty = 0.35$ (Walter *et al.*, 2010), nous choisissons de nous placer à une valeur de Ca inférieure à Ca_∞ .

Par ailleurs, comme nous l'avons vu dans la partie 4.3.2, si nous voulons étudier la rupture dans un cas pour lequel $\gamma = 0$, il ne faut alors pas se placer à un nombre capillaire trop élevé pour que l'algorithme de Newton puisse converger.

Nous avons réalisé des tests avec les valeurs $Ca = 0.01$, $Ca = 0.05$, $Ca = 0.1$ et $Ca = 0.3$. Pour les trois valeurs de Ca les plus élevées, nous observons des résultats semblables concernant la description de la rupture. Pour $Ca = 0.01$, pour les quelques valeurs des paramètres matériaux que nous avons testées, l'algorithme de Newton local

échoue dans les premiers instants après la localisation, mais nous n'avons pas encore identifié l'origine de ce problème. Dans le cas $Ca = 0.3$, pour la plupart des maillages, on ne peut pas prendre $\gamma = 0$, donc on ne considérera pas ce cas ici. Par ailleurs nous avons étudié davantage le cas $Ca = 0.1$, et nous choisissons donc de présenter les premiers résultats pour ce cas là.

Comme nous l'avons vu dans le chapitre 2, pour pouvoir étudier la rupture à cette valeur du nombre capillaire, il faut considérer une capsule pour laquelle la valeur du nombre capillaire limite Ca_ℓ est inférieure à Ca . Dans les chapitres précédents, nous avons considéré le critère d'initiation de la rupture donné par l'équation (2.40) pour $d_c = 1$. Le nombre capillaire limite Ca_ℓ ne dépendait alors que Y_D et Y_C . Ici, Ca_ℓ dépend donc aussi de d_c . C'est donc le choix des trois paramètres Y_D , Y_C , et d_c qui détermine s'il y a, ou non, rupture.

Comme nous allons considérer une valeur de d_c inférieure à 1, nous allons obtenir une valeur de Ca_ℓ inférieure à celle donnée par le modèle du chapitre 2. Toutefois, avec le modèle d'endommagement, l'évolution de d se fait de manière instable à partir d'une valeur de d proche de 0.3 et jusqu'à $d = 1$. Ainsi, les valeurs de Ca_ℓ obtenues avec le critère d'initiation de la rupture de ce chapitre sont seulement légèrement inférieures à celles données par le critère du chapitre 2.

Étant donné que pour les états de tension (local) que nous allons rencontrer, le modèle d'endommagement est localement instable pour des valeurs de d proches (en restant supérieures) de la valeur 0.2, nous choisissons $d_c = 0.2$. On choisit alors $Y_D = 0.025$ et $Y_C = 0.25$ (on conserve le facteur 10 entre les deux paramètres comme pour le cas test du chapitre 2), de manière à être dans les conditions où la rupture se produit ($Ca_\ell < Ca$), tout en ayant Ca_ℓ proche de Ca .

Il reste à déterminer les deux valeurs du paramètre G_c que nous allons considérer. Pour l'une de ces valeurs, nous avons vu que nous souhaitons nous placer dans un cas où $\gamma = 0$. Comme les valeurs des paramètres Y_D , Y_C , et d_c , déterminent localement les conditions d'initiation de la localisation et donc la valeur de la tension t_c , alors, d'après les résultats de la partie 4, pour que l'algorithme de Newton local converge sans utiliser la régularisation visqueuse ($\gamma = 0$) pour une taille du maillage donnée, cela impose une limite inférieure à G_c , qui dépend de t_c . Par ailleurs, le critère (4.47) que nous avons introduit dans la partie 4.3.1, impose lui une valeur limite supérieure à G_c , afin de rester cohérent avec le modèle de rupture quasi-fragile que nous avons développé.

Pour estimer cette valeur limite supérieure de G_c , on utilise la relation (4.46) qui nous donne $\tilde{t}_c = 0.35$, et donc le critère (4.47) impose $G_c << 0.35$. La valeur de \tilde{t}_c donne une

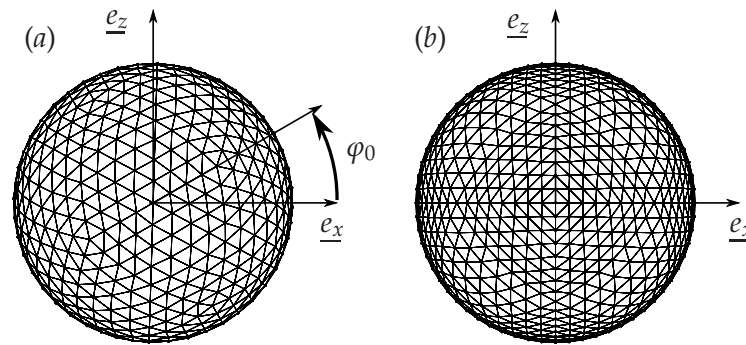


Figure 6.7 – Maillages de la capsule dans la configuration initiale, obtenus à partir (a) d'un icosaèdre et (b) d'un octaèdre, inscrits dans une sphère. Les maillages sont formés d'éléments P1, il sont représentés ici dans le cas où ils contiennent (a) 1280 éléments et 642 noeuds, et (b) 2048 éléments et 1026 noeuds. Les maillages sont observés dans le plan $(\underline{e}_x, \underline{e}_z)$. Pour le maillage formé à partir d'un icosaèdre, on pourra considérer deux valeurs de l'angle φ_0 dans cette étude, $\varphi_0 = 0^\circ$ et $\varphi_0 = 90^\circ$.

première estimation, et, après avoir réalisé les simulations, les valeurs de la tension t_c dans les éléments localisés s'avèrent être un peu plus élevées, se situant entre $t_c = 0.5$ et $t_c = 0.6$. On estime alors que la limite supérieure donnée par le critère (4.47) correspond à $G_c = 0.05$. En choisissant cette valeur de G_c , et $\gamma = 0$, l'algorithme de Newton converge pour tous les maillages que nous allons considérer. Ainsi, pour étudier la rupture avec $\gamma = 0$ nous allons prendre $G_c = 0.05$, et nous souhaitons aussi étudier une rupture plus fragile, nous prendrons donc $G_c = 0.01$ comme deuxième valeur.

6.4.2.3 Choix des paramètres numériques et du coefficient γ

Le dernier point à traiter pour définir l'étude concerne le choix des paramètres numériques, et la valeur du coefficient de viscosité γ dans le cas où $G_c = 0.01$.

Pour générer le maillage de la capsule dans sa configuration de référence, nous utilisons deux méthodes. La première méthode est celle que nous avons considérée dans les chapitres précédents, où le maillage est généré à partir de l'inscription d'un icosaèdre dans une sphère (Figure 6.7a), et la deuxième méthode est semblable, et consiste à générer le maillage à partir de l'inscription d'un octaèdre dans une sphère (Figure 6.7b) (voir Walter *et al.* (2010) pour plus de détails sur la méthode de génération du maillage). On obtient alors des maillages composés d'éléments triangulaires à trois nœuds avec des tailles d'éléments relativement homogènes. Le Tableau 6.2 donne le nombre d'éléments ainsi que la taille caractéristique des éléments des maillages que nous avons considérés dans cette étude.

Tableau 6.2 – Nombre d'éléments et taille caractéristique des éléments des maillages composés d'éléments P1 considérés dans cette étude. Les valeurs des tailles des éléments sont adimensionnées par le rayon de la capsule.

Maillages générés à partir d'un icosaèdre			
Nombre d'éléments	512	2048	8192
Taille d'un élément	0.21	0.10	0.05
Maillages générés à partir d'un octaèdre			
Nombre d'éléments	1280	5120	20480
Taille d'un élément	0.13	0.06	0.03

Il reste à déterminer le pas de temps Δt ainsi que la valeur du coefficient de viscosité γ du modèle régularisant la loi cohésive pour le cas $G_c = 0.01$.

Avec le modèle de régularisation visqueux, la condition de convergence de l'algorithme de Newton local (éq. (5.5)) peut s'écrire, en terme d'ordre de grandeur, sous la forme (voir Oliver & Huespe (2004b) pour plus de détails) :

$$-\frac{t_c^2}{G_c} + \frac{\gamma}{\Delta t} > -\frac{G_s}{h}. \quad (6.8)$$

c'est-à-dire une forme très semblable à la condition d'unicité (4.40) où s'est ajouté le terme $\gamma/\Delta t$ associé à la régularisation visqueuse. Avec $G_c = 0.05$, la taille des éléments h est suffisamment petite pour que cette condition soit vérifiée pour $\gamma = 0$. Pour $G_c = 0.01$, on ne va étudier la solution que pour un maillage (l'objectif étant dans ce cas de comparer la solution au cas $G_c = 0.05$). Pour le maillage que nous allons utiliser dans ce cas, nous devons prendre $\gamma \neq 0$ pour vérifier la condition de convergence (6.8).

D'après cette équation, plus la valeur du pas de temps Δt est petite et plus nous pouvons prendre une valeur de γ petite, ce qui permet, comme nous l'avons vu, de réduire l'influence de la viscosité dans les phases où le problème de l'équilibre local est stable. Pour l'ensemble de l'étude nous prenons $\Delta t = 10^{-4}$. Lorsque nous considérerons le cas $G_c = 0.01$, nous prendrons alors $\gamma = 0.01$, qui, en terme d'ordre de grandeur, correspondrait à la valeur minimum de γ donnée par la condition (6.8).

Dans la suite, afin de rester dans le cadre des hypothèses formulées dans la partie 2.1, les résultats seront donnés pour des valeurs du saut de déplacement ne dépassant pas la valeur 0.05 (valeur du saut adimensionnée par le rayon a de la capsule) sur l'ensemble des éléments localisés.

6.4.2.4 Étude de la rupture sur un cas de référence ($G_c = 0.05$)

Dans cette partie, on étudie la rupture d'une capsule dans l'écoulement hyperbolique plan dans le cas de référence $G_c = 0.05$. Pour ce cas on prend $\gamma = 0$.

On étudie l'influence de la taille du maillage sur la solution. On considère pour cela l'ensemble des maillages donnés dans le Tableau 6.2, où, dans la configuration de référence (instant $t = 0$), ils sont orientés comme cela est représenté sur la Figure 6.7, en prenant $\varphi_0 = 90^\circ$ dans le cas des maillages générés à partir d'un icosaèdre. Nous présenterons un problème rencontré lorsque l'on change l'orientation du maillage dans la partie 6.4.2.6.

Pour décrire le comportement de la capsule au cours de la phase de rupture, on introduit les notations suivantes. Tout d'abord, on note \bar{u}_N le saut de déplacement spatial selon l'ouverture en mode I, défini par $\bar{u}_N = \|\alpha_N \underline{n}^\sharp\|$, et on note $\bar{u}_{N,max}$ le maximum (spatial) des valeurs de \bar{u}_N sur l'ensemble des éléments localisés à un instant donné. Par ailleurs, on introduit l'allongement principal maximum $\bar{\lambda}_{max}$ défini par :

$$\bar{\lambda}_{max} = \sqrt{2\bar{e}_{max} - 1}, \quad (6.9)$$

où \bar{e}_{max} est la déformation principale maximum du tenseur de Green-Lagrange $\bar{\underline{e}}$ que nous avons introduit dans l'équation (2.16).

Jusqu'à l'initiation de la localisation ($d = d_c$), le comportement de la capsule est semblable à celui que nous avons décrit dans le cas de l'écoulement de cisaillement simple, mais la membrane n'est pas en rotation. Ainsi, à partir du déclenchement de l'écoulement à $t = 0$, la capsule initialement sphérique s'allonge dans la direction de déformation de l'écoulement (direction \underline{e}_x) en prenant une forme ellipsoïdale (Figure 6.8). Tandis que la capsule se déforme, l'endommagement s'initie au niveau des deux sommets P et P' de la capsule situés sur l'axe (O, \underline{e}_y) . L'endommagement se développe ensuite autour de ces deux pôles, tout en restant maximum au niveau des deux pôles. Puis, à un instant $t = t_\ell$, la localisation s'initie au niveau de ces deux pôles. Comme dans le cas de l'écoulement de cisaillement simple, au cours de cette phase transitoire, des plis se forment au niveau des points P et P' , où la direction des tensions compressives est dans le plan orthogonal à la direction de l'élongation de la capsule (Figure 6.9)

Pour décrire la phase de rupture qui a lieu après l'instant $t = t_\ell$, on choisit de montrer l'état de la capsule à trois instants correspondant à l'instant d'initiation de la localisation ($t = t_\ell$), à un instant intermédiaire où $\bar{u}_{N,max} = 0.01$ ($t = t_1$), et à l'instant final où $\bar{u}_{N,max} = 0.05$ ($t = t_f$), qui est la valeur limite du saut de déplacement que nous avons imposé pour cette étude.

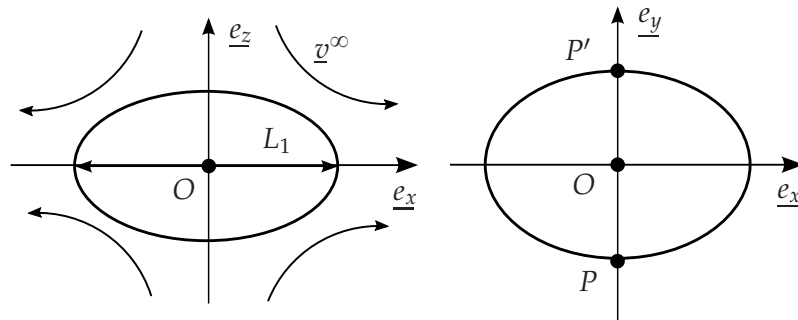


Figure 6.8 – Deux ellipsoïdes principaux de l'ellipsoïde d'inertie de la capsule.

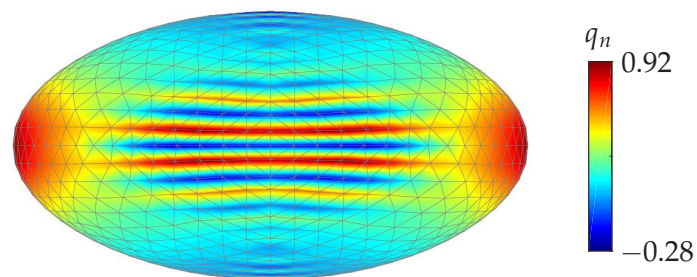


Figure 6.9 – Illustration de la formation des plis au niveau de la zone centrale de la capsule au cours du régime transitoire, à partir de la représentation de la composante normal du chargement surfacique externe $q_n = \underline{q} \cdot \underline{n}$, avec \underline{n} le vecteur unitaire normal à la membrane orienté vers le fluide externe. La capsule est observée dans le plan $(O, \underline{e}_x, \underline{e}_z)$. Résultat obtenu avec le maillage de 2048 éléments.

La Figure 6.10 montre l'évolution de la distribution de l'endommagement de la capsule ainsi que les lignes de discontinuités dans les éléments localisés, aux trois instants considérés. La capsule y est représentée selon deux vues, et pour le maillage contenant 2048 éléments. Les mêmes états sont représentés, selon une seule vue, pour les différents maillages, dans les Figures 0.1, 0.2, et 0.3 de l'Annexe E. Par ailleurs, la Figure 0.4 de l'Annexe E, et la Figure 6.11, représentent l'évolution du saut de déplacement \bar{u}_N dans les éléments localisés aux instants t_1 et t_f , respectivement (afin de mieux voir la distribution des sauts de déplacement, nous n'avons pas associé les mêmes valeurs aux niveaux de couleur sur les deux Figures). On notera que dans le cas présenté ici, nous n'observons pas d'ouverture des discontinuités en mode II (glissement). La Figure 0.5 de l'Annexe E représente la distribution du rapport de dissipation β_N à l'instant t_f (afin de mieux voir cette distribution, la valeur maximum de la barre de couleur correspond à la valeur maximum de β_N sur l'ensemble des maillages, et non 1). Enfin, dans les Figures 0.6 et 0.7 de l'Annexe E, est représenté le rapport d'extension $\bar{\lambda}_{max}$ aux instants t_ℓ et t_f , respectivement.

À l'instant de l'initiation de la localisation t_ℓ , les discontinuités sont introduites au niveau des points P et P' sur l'axe (O, \underline{e}_y) , et elles sont orientées perpendiculairement à la direction \underline{e}_x de l'écoulement, qui est la direction de la tension principale maximum au niveau de ces deux points (Figure 6.10a-b, et Figure 0.1 de l'Annexe E). Depuis cet instant, alors que la capsule continue de s'allonger, l'endommagement se propage depuis les flancs de la capsule (points P et P') vers le plan $(O, \underline{e}_x, \underline{e}_z)$. À mesure que l'endommagement se propage, des discontinuités sont introduites sur son sillage, et on voit donc les discontinuités se propager, c'est-à-dire que des discontinuités sont introduites d'élément en élément, depuis les flancs de la capsule vers le plan $(O, \underline{e}_x, \underline{e}_z)$ (Figure 6.10c-f, et Figures 0.2 et 0.3 de l'Annexe E). On notera que l'endommagement ne dépasse pas la valeur $d_c = 0.2$.

Pour la suite, on définit une *bande d'éléments localisés* comme un domaine connexe, formé d'éléments localisés, tels qu'on passe d'un élément du domaine à un autre élément du domaine qui lui est contigu, en suivant l'orientation de la discontinuité du premier élément (Figure 6.12). L'interprétation qu'on peut donner d'une telle bande est qu'elle contiendrait une unique ligne de discontinuité. Il y a donc un réseau de bandes d'éléments localisés avec des directions parallèles, qui se forment et se propagent sur la capsule, depuis ses flancs, vers le plan $(O, \underline{e}_x, \underline{e}_z)$. Toutefois, s'il y a plusieurs bandes en parallèles, les discontinuités des éléments ne s'ouvrent que dans certaines bandes.

Remarque :

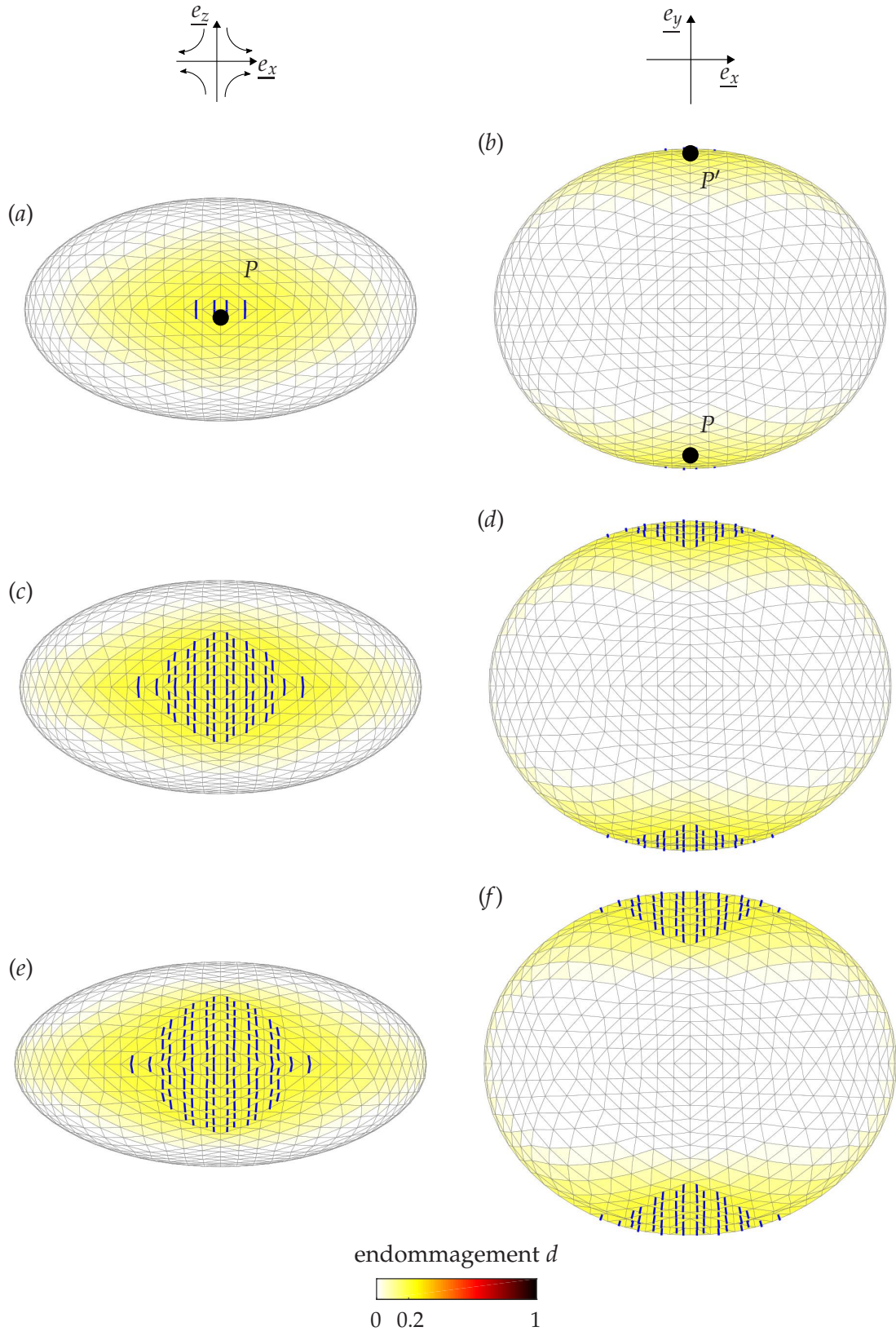


Figure 6.10 – Cartographie de l'endommagement (a-b) à l'instant où s'initie la localisation t_ℓ , (c-d) à l'instant t_1 où $\bar{u}_{N,max} = 0.01$, (e-f) et à l'instant t_f lorsque $\bar{u}_{N,max} = 0.05$, pour le maillage contenant 2048 éléments P1. La capsule est observée dans sa configuration courante dans les plans (e_x, e_z) , sur la colonne de gauche, et (e_x, e_y) , sur la colonne de droite. Les résultats sont obtenus pour $Ca = 0.1$, $Y_D = 0.025$, $Y_C = 0.25$, $d_c = 0.2$, $G_c = 0.05$, $\gamma = 0$, et $\Delta t = 10^{-4}$. Les lignes de discontinuités sont représentées en traits forts bleus. Les images sont à la même échelle.

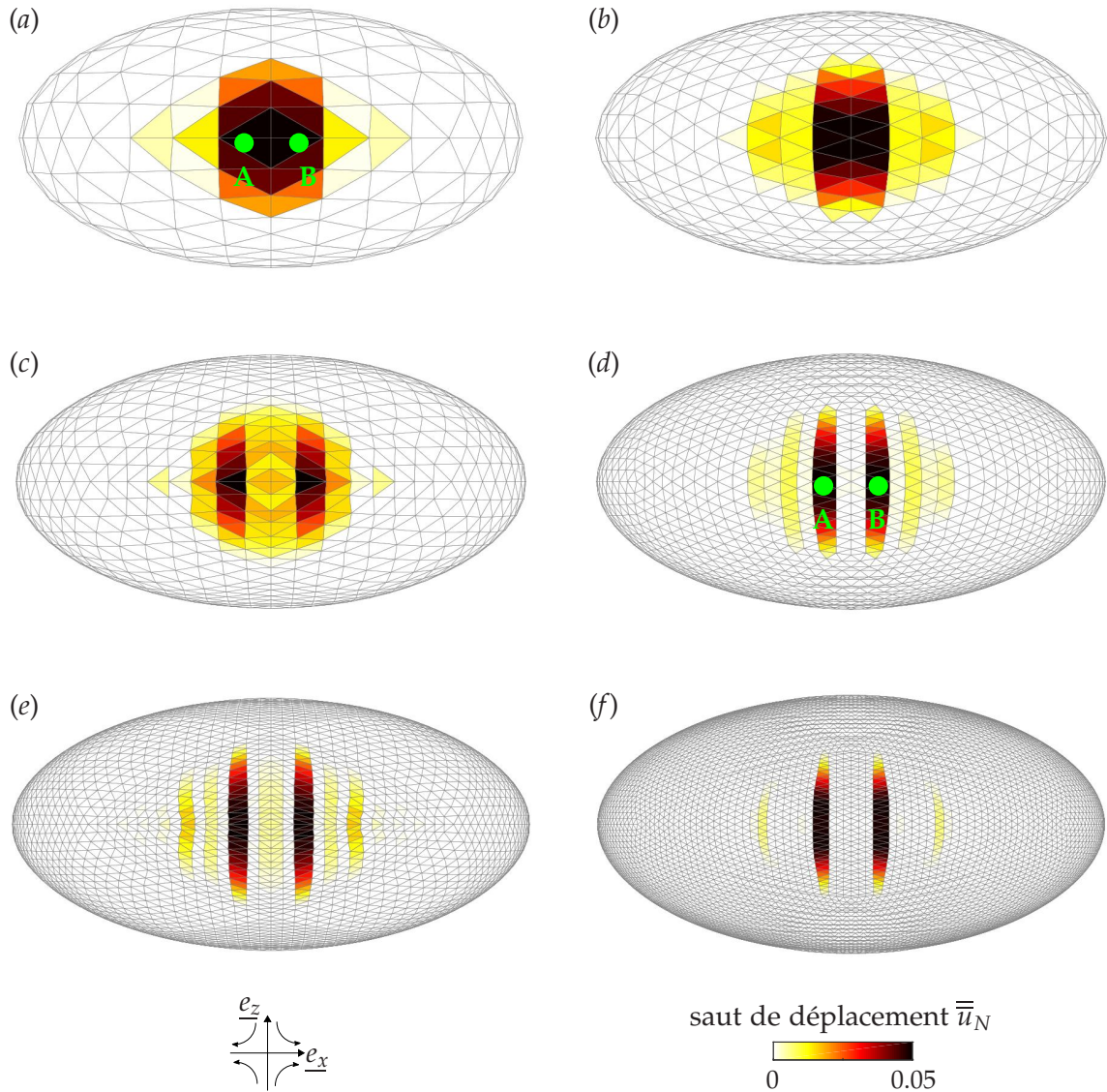


Figure 6.11 – Cartographie du saut de déplacement \bar{u}_N à l'instant t_f lorsque $\bar{u}_{N,max} = 0.05$, pour chacun des six maillages contenant (a) 512 ($t_f = 0.730$), (b) 1280 ($t_f = 0.815$), (c) 2048 ($t_f = 0.810$), (d) 5120 ($t_f = 0.800$), (e) 8192 ($t_f = 0.940$), et (f) 20480 ($t_f = 0.770$) éléments. La capsule est observée dans sa configuration courante dans le plan $(\underline{e}_x, \underline{e}_z)$. Les résultats sont obtenus pour $Ca = 0.1$, $Y_D = 0.025$, $Y_C = 0.25$, $d_c = 0.2$, $G_C = 0.05$, $\Delta t = 10^{-4}$, et $\gamma = 0$. Toutes les images sont à la même échelle.

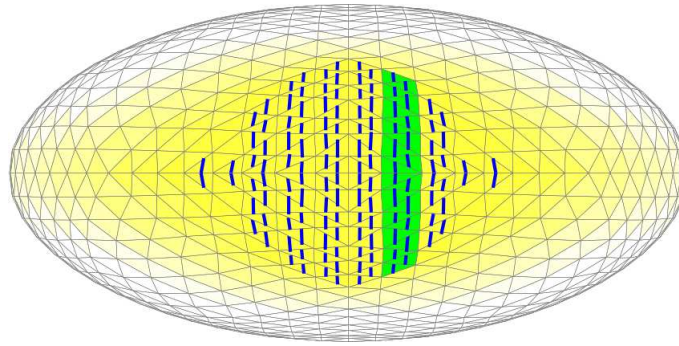


Figure 6.12 – En vert est représenté une *bande d'éléments localisés*.

Le problème étant symétrique par rapport au plan $(O, \underline{e}_x, \underline{e}_z)$, dans la suite on décrit uniquement les phénomènes observés d'un côté de ce plan.

En effet, aux instants t_1 et t_f , sur les Figures 0.4 de l'Annexe E, et 6.11, on distingue deux bandes d'éléments localisés passant par les points A et B , dans lesquelles les éléments ont leurs discontinuités qui s'ouvrent le plus au cours de la déformation de la capsule, alors que les discontinuités ne se sont pas, ou peu, ouvertes, dans les autres bandes. Dans la suite on désignera ces deux bandes comme les bandes *principales*. En raffinant le maillage, ces deux bandes se démarquent de plus en plus, et les bandes autour ont leurs éléments qui sont de moins en moins ouverts. En particulier, pour le maillage le plus fin (20480 éléments), à l'instant t_f il n'y a que deux bandes légèrement ouvertes (\bar{u}_N est de l'ordre de 0.01) autour des deux bandes principales.

Par ailleurs, en raffinant le maillage, la distance qui sépare les deux bandes principales semble converger. Dans le cas du maillage de 8192 éléments, il y a 4 éléments qui séparent les deux bandes, et dans le cas du maillage de 20480 éléments, il y a 6 éléments. D'après le ratio entre les tailles caractéristiques des éléments (Tableau 6.2), dans la configuration de référence, la distance séparant les bandes principales donnée par le maillage de 8192 éléments est environ 1.05 fois plus grande que la distance donnée par le maillage de 20480 éléments. On peut noter que les deux maillages les plus grossiers (512 et 1280 éléments) donnent une description semblable aux autres maillages puisqu'il y a bien deux bandes principales, auxquelles peuvent donc être associées deux lignes de discontinuités distinctes.

La dissipation est alors essentiellement localisée dans les deux bandes principales à l'instant t_f (Figure 0.5 de l'Annexe E). La distribution de β_N montre qu'à cet instant la densité linéique d'énergie dissipée au niveau des discontinuités dans ces bandes a au maximum une valeur de l'ordre de $0.2G_c$, ce qui indique que toute la densité d'énergie dissipée nécessaire à l'initiation d'une unité d'aire de fissure libre de traction, c'est-à-

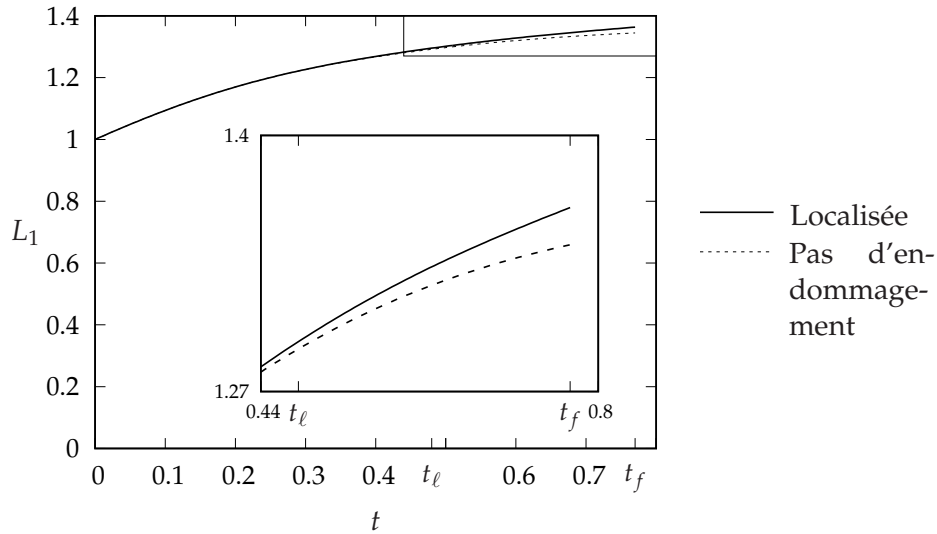


Figure 6.13 – Évolution temporelle de la longueur du grand axe de l'ellipsoïde d'inertie L_1 jusqu'à l'instant t_f où $\bar{u}_{N,max} = 0.05$. Il est aussi représenté le cas sans endommagement. Les courbes sont obtenues avec le maillage de 20480 éléments ($t_f = 0.770$) et avec $Ca = 0.1$, $Y_D = 0.025$, $Y_C = 0.25$, $d_c = 0.2$, $G_c = 0.05$, $\Delta t = 10^{-4}$, et $\gamma = 0$.

dire $0.9G_c$ d'après le critère de l'équation (6.6), n'a pas été consommée à l'instant t_f . On peut donc confirmer que pour le cas de référence considéré dans cette partie ($G_c = 0.05$), on est à la limite d'un comportement quasi-fragile, d'après la caractérisation qu'on en avait donné dans la partie 4.3.1.

Enfin, en ce qui concerne la description de la déformation de la membrane hors des discontinuités, avec l'ouverture des discontinuités dans les deux bandes principales, l'allongement $\bar{\lambda}_{max}$ s'est relaxé dans le voisinage des deux bandes (et en particulier dans les éléments localisés des deux bandes), passant d'environ $\bar{\lambda}_{max} = 1.2$ à l'instant t_ℓ (Figure 0.6 de l'Annexe E), à $\bar{\lambda}_{max} = 1.1$ à l'instant t_f (Figure 0.7 de l'Annexe E).

Pour compléter notre analyse, la Figure 6.13 montre l'évolution temporelle de la longueur du grand axe de l'ellipsoïde d'inertie de la capsule L_1 (voir la définition de L_1 sur la Figure 6.8) pour le maillage de 20480 éléments et jusqu'à l'instant t_f où on a aussi représenté le cas sans endommagement obtenu avec le même maillage, et la Figure 6.14 montre l'évolution temporelle du saut $\bar{u}_{N,max}$ pour chaque maillage et jusqu'à l'instant t_f .

À partir de l'instant t_ℓ , la courbe de L_1 associée au modèle de rupture a tendance à diverger par rapport au cas sans endommagement. On semble donc distinguer ici les prémices des effets de la rupture au niveau global, qui devrait ensuite mener à une divergence de la forme de la capsule plus importante à mesure que la localisation se poursuit au-delà de t_f .

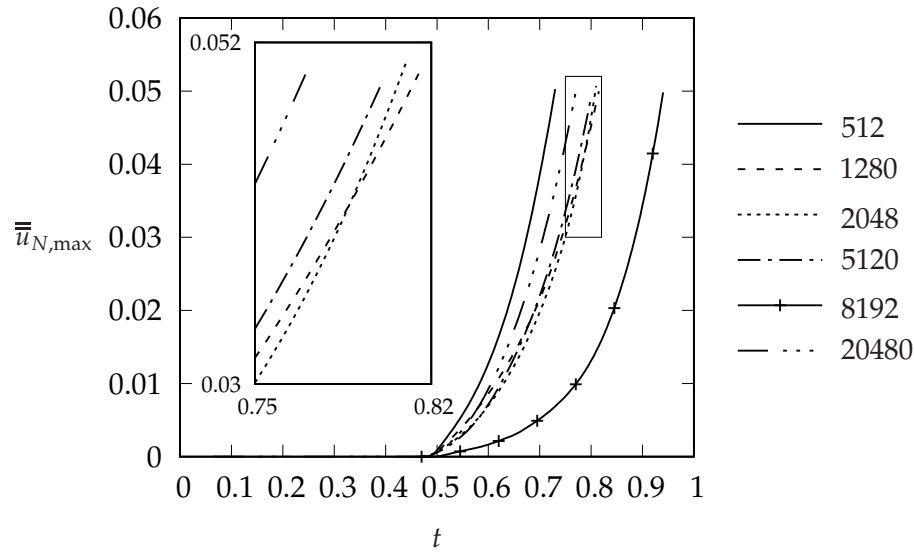


Figure 6.14 – Évolution temporelle du maximum de \bar{u}_N sur l'ensemble des éléments localisés $\bar{u}_{N,\max}$ (qui correspond au saut dans les éléments au niveau des points A et B sur la Figure 6.11), jusqu'à l'instant t_f où $\bar{u}_{N,\max} = 0.05$, pour chacun des six maillages contenant 512 ($t_f = 0.730$), 1280 ($t_f = 0.815$), 2048 ($t_f = 0.810$), 5120 ($t_f = 0.800$), 8192 ($t_f = 0.940$), et 20480 ($t_f = 0.770$) éléments. Les résultats sont obtenus pour $Ca = 0.1$, $Y_D = 0.025$, $Y_C = 0.25$, $d_c = 0.2$, $G_c = 0.05$, $\Delta t = 10^{-4}$, et $\gamma = 0$.

Pour la courbe $\bar{u}_{N,\max}$, on notera que dans notre cas, $\bar{u}_{N,\max}$ correspond à chaque instant au saut de déplacement dans les éléments les plus ouverts dans les deux bandes principales, c'est-à-dire dans les éléments au centre des bandes au niveau des points A et B . À partir des cartographies des discontinuités sur les Figures 0.1, 0.2, et 0.3 de l'Annexe E, et de la courbe de $\bar{u}_{N,\max}$, il semble qu'on puisse décomposer le comportement des deux bandes principales en deux phases, où de t_ℓ à t_1 les bandes se propagent rapidement et l'ouverture maximum dans une bande évolue seulement de $\bar{u}_{N,\max} = 0$ à $\bar{u}_{N,\max} = 0.01$, puis de t_1 à t_f la longueur des bandes évolue peu mais les discontinuités s'ouvrent davantage et en particulier au centre des bandes passant de $\bar{u}_{N,\max} = 0.01$ à $\bar{u}_{N,\max} = 0.05$.

Dans la Figure 6.14, la courbe de $\bar{u}_{N,\max}$ associée au maillage de 8192 éléments se distingue des autres courbes. Il ne semble pas que ce soit lié à la taille des éléments car la courbe $\bar{u}_{N,\max}$ du maillage de 20840 éléments, qui a des éléments plus petits, se trouve, elle, au milieu des courbes des autres maillages. Cela pourrait s'expliquer plutôt par le fait que le modèle de membrane ne décrit pas objectivement les champs dans les régions où il y a des plis (Walter *et al.*, 2010), ce qui est le cas ici. Pour l'illustrer, sur la Figure 6.15 est représenté l'évolution temporelle du maximum spatial des tensions principales dans la membrane, T_{\max} , au cours de la phase transitoire (durant laquelle il y a des plis

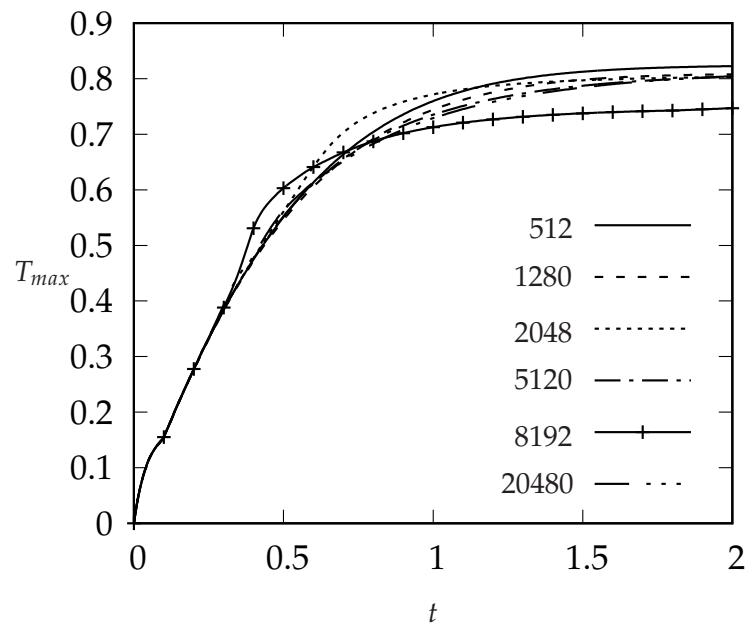


Figure 6.15 – Evolution du maximum des tensions principales de Cauchy sur la membrane T_{max} en fonction du temps, au cours de la phase transitoire dans le cas sans endommagement, pour les différents maillages donnés dans le tableau 6.2 (la légende indique le nombre d'éléments du maillage).

qui sont formés) dans le cas sans endommagement, et pour l'ensemble des maillages. Comme dans le cas de la Figure 6.14, il y a une certaine dispersion entre les différentes courbes, et on retrouve dans ce cas là aussi que la courbe associée au maillage de 8192 éléments a une allure qui se distingue des autres courbes. Ce manque d'objectivité dans la description des champs due à la présence des plis pourrait alors aussi expliquer les dispersions qu'on peut observer, entre les différents maillages, sur les cartographies des différents champs qu'on a présentés auparavant (par exemple la différence de distribution des discontinuités entre les maillages de 8192 et 20480 éléments sur la Figure 0.3 de l'Annexe E).

Si la description précise des champs est affectée par la présence des plis, on peut en revanche considérer que les résultats présentés dans cette partie ont qualitativement un sens car les solutions obtenues avec les différents maillages ont des descriptions semblables. Pour valider plus précisément le modèle il faudrait considérer un cas où la rupture se produit dans une région de la membrane où il n'y a pas de plis.

6.4.2.5 Influence de G_c ($G_c = 0.01$)

Dans cette partie, on souhaite étudier l'influence du paramètre G_c sur la rupture de la

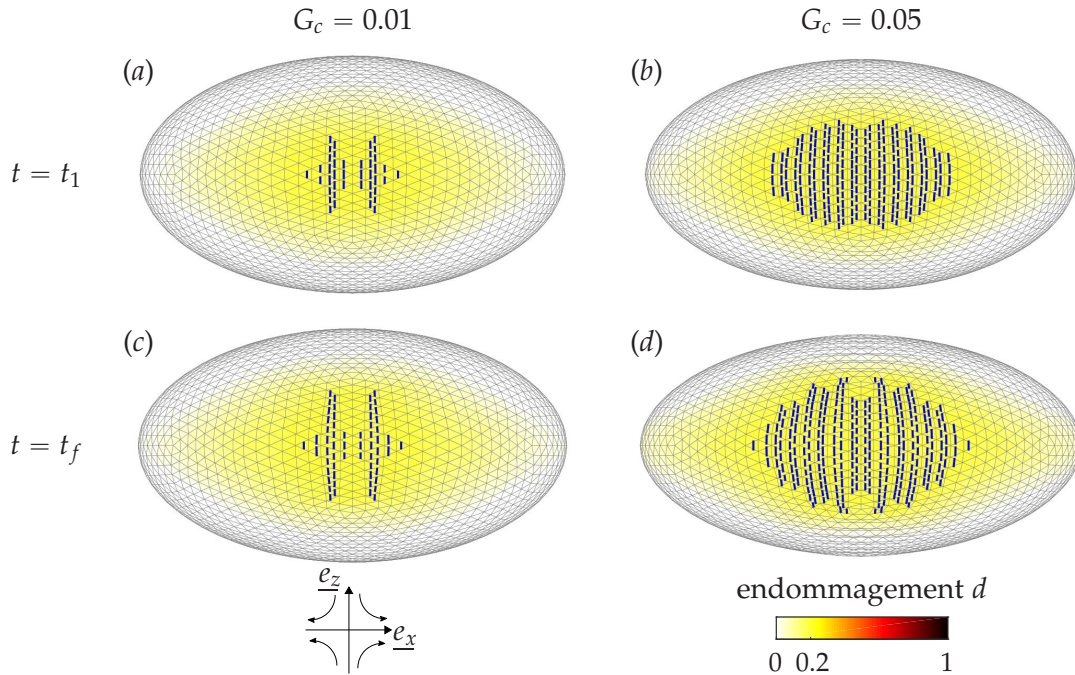


Figure 6.16 – Cartographie de l’endommagement d pour les cas (a-c) $G_c = 0.01$ ($\gamma = 0.01$) et (b-d) $G_c = 0.05$ ($\gamma = 0$), aux instants (a-b) t_1 lorsque $\bar{u}_{N,max} = 0.01$, et (c-d) t_f lorsque $\bar{u}_{N,max} = 0.05$, pour le maillage contenant 5120 éléments. La capsule est observée dans sa configuration courante dans le plan $(\underline{e}_x, \underline{e}_z)$. Les résultats sont obtenus pour $Ca = 0.1$, $Y_D = 0.025$, $Y_C = 0.25$, $d_c = 0.2$, et $\Delta t = 10^{-4}$. Les lignes de discontinuités sont représentées en traits forts bleus. Les images sont à la même échelle.

capsule, en considérant un cas où les discontinuités ont un comportement plus fragile que dans le cas de la partie précédente (cas de référence). On considère donc une valeur de G_c plus petite que dans le cas de référence, et on choisit de se placer dans le cas $G_c = 0.01$. D’après la partie 6.4.2.3, on choisit $\gamma = 0.01$.

L’objectif étant de comparer la description de la rupture avec le cas précédent, nous allons ici considérer uniquement le maillage de 5120 éléments, avec $\varphi_0 = 90^\circ$. À l’issue de cette partie nous mettrons en évidence un problème rencontré lorsque l’on change l’orientation du maillage.

Jusqu’à l’instant où la localisation s’initie ($t = t_\ell$), le comportement de la capsule est le même que dans la partie précédente car G_c n’intervient que dans la loi de comportement des discontinuités. Ainsi, l’instant t_ℓ , ainsi que la position et l’orientation des premières discontinuités introduites à cet instant sont les mêmes que dans le cas de référence. Aux instants suivants, les discontinuités se propagent comme dans le cas de référence, mais elles sont ici principalement localisées dans deux bandes d’éléments localisés (Figure 6.16).

La Figure 6.17 permet de comparer les états des discontinuités et la distribution de $\bar{\lambda}_{max}$, par rapport au cas de référence, à l'instant t_f (la valeur de t_f n'est pas la même pour les deux cas, comme nous allons le voir par la suite). Par rapport au cas de référence, pour $G_c = 0.01$, seules les discontinuités localisées dans les deux bandes principales s'ouvrent (Figure 6.17a-b). Ces deux bandes sont aux mêmes positions que dans le cas de référence car les premières discontinuités de ces bandes ont été introduites au même instant et au même endroit, et se sont ensuite propagées dans la même direction. Cependant, pour une même valeur maximum de l'amplitude du saut de déplacement dans ces bandes, ces bandes ont une longueur plus petite dans le cas $G_c = 0.01$ que dans le cas de référence (elles contiennent moins d'éléments). Par ailleurs, comme dans le cas de référence, $\bar{u}_{N,max}$ coïncide à tout instant avec l'amplitude du saut de déplacement dans les éléments situés au milieu des bandes principales.

Pour la dissipation localisée, à l'instant t_f , la valeur maximum du rapport de dissipation β_N est plus importante dans le cas $G_c = 0.01$ que dans le cas de référence (Figure 6.17c-d). En effet, à l'instant t_f , cette valeur maximum vaut $\beta_N = 0.75$ pour $G_c = 0.01$ et $\beta_N = 0.2$ pour $G_c = 0.05$. La valeur de β_N étant maximum au milieu de chacune des deux bandes principales, et cette valeur étant relativement proche de celle donnée par le critère éq. (6.6) correspondant à une discontinuité totalement endommagée, alors on prédit qu'une fissure ouverte va s'initier à cet endroit dans les bandes principales, et qu'elles vont se propager à l'intérieur des deux bandes d'éléments en suivant l'orientation des discontinuités.

Pour les déformations (associées à $\bar{\underline{E}}$), à l'instant t_f , pour $G_c = 0.01$, l'allongement $\bar{\lambda}_{max}$ est plus relaxé dans les bandes d'éléments principales et dans les éléments dans leur voisinage proche, que dans le cas de référence (Figure 6.17e-f). En effet, on est en train de comparer les deux cas lorsque l'amplitude du saut au milieu des bandes principales est la même ($\bar{u}_{N,max}$ coïncide dans les deux cas avec l'amplitude du saut dans les éléments situés au milieu des bandes principales). Or, pour un saut de déplacement donné, plus la valeur de G_c est petite, moins les discontinuités ne transmettent des efforts importants, et donc l'équilibre des discontinuités impose que les tensions, et donc les déformations, soient plus faibles au niveau des discontinuités.

La Figure 6.18 donne des informations complémentaires sur l'évolution temporelle du saut $\bar{u}_{N,max}$ et permet de le comparer au cas de référence. D'après ces courbes, dans le cas $G_c = 0.01$, l'instant t_f arrive beaucoup plus tôt que dans le cas de référence. Ainsi, lorsque les discontinuités ont un comportement plus fragile, les discontinuités dans les éléments au centre des bandes principales s'ouvrent plus vite ($\bar{u}_{N,max}$ évolue plus vite).

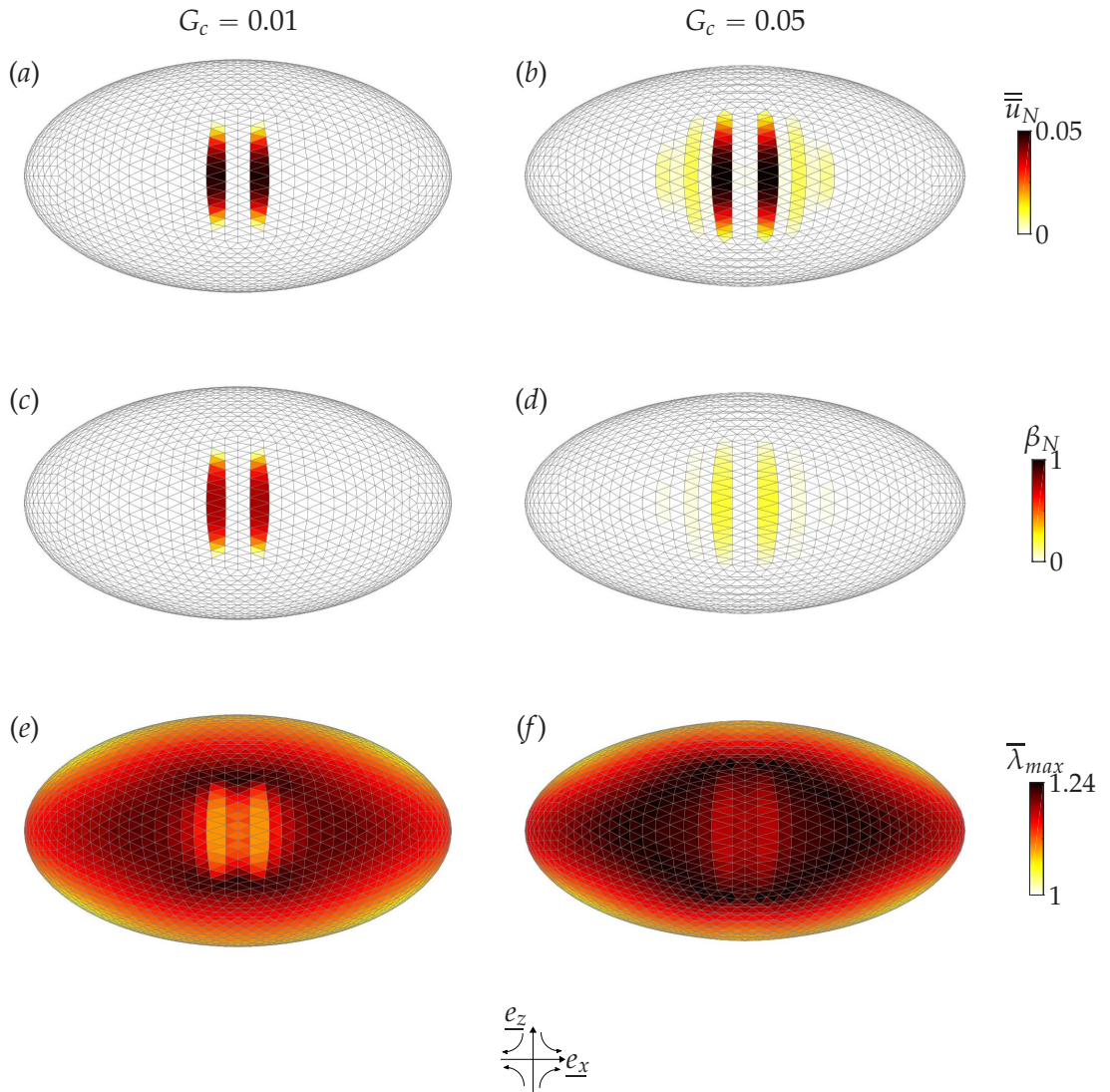


Figure 6.17 – Cartographies (a-b) du saut de déplacement \bar{u}_N , (c-d) du rapport de dissipation β_N , et (e-f) de l’allongement principal maximum $\bar{\lambda}_{max}$, pour $G_c = 0.01$ et $\gamma = 0.01$ (colonne de gauche), et $G_c = 0.05$ et $\gamma = 0$ (colonne de droite), à l’instant t_f lorsque $\bar{u}_{N,max} = 0.05$ ($t_f = 0.575$ pour $G_c = 0.01$, et $t_f = 0.800$ pour $G_c = 0.05$). La capsule est observée dans sa configuration courante dans le plan (\vec{e}_x, \vec{e}_z) . Les résultats sont obtenus avec le maillage de 5120 éléments et pour $Ca = 0.1$, $Y_D = 0.025$, $Y_C = 0.25$, $d_c = 0.2$, et $\Delta t = 10^{-4}$. Toutes les images sont à la même échelle.

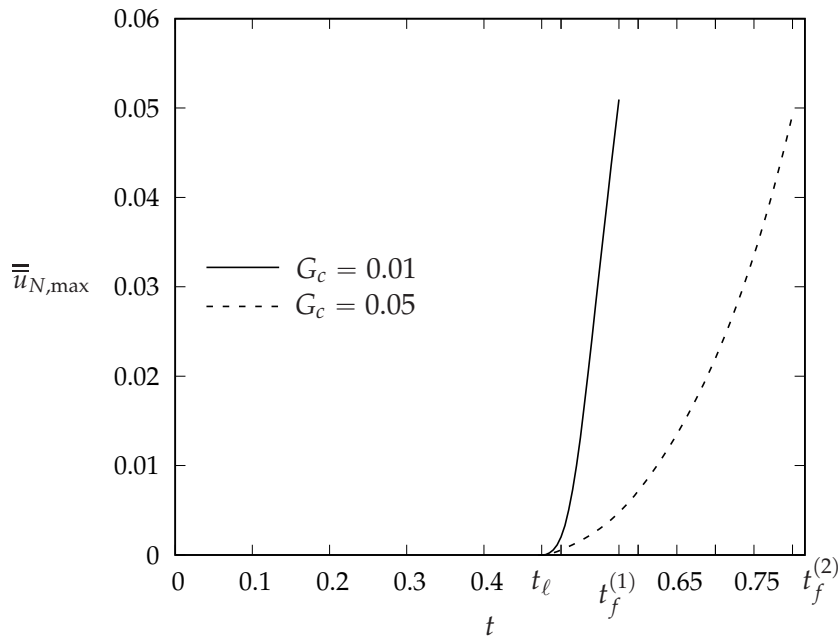


Figure 6.18 – Évolution temporelle du maximum de \bar{u}_N sur l'ensemble des éléments localisés $\bar{u}_{N,max}$ (qui correspond au saut dans les éléments au milieu des bandes principales), jusqu'à l'instant t_f où $\bar{u}_{N,max} = 0.05$, pour les cas $G_c = 0.01$ et $G_c = 0.05$. Pour $G_c = 0.01$ on a $t_f = 0.575$ (noté $t_f^{(1)}$ sur le graphique), et pour $G_c = 0.05$ on a $t_f = 0.800$ (noté $t_f^{(2)}$ sur le graphique). Les résultats sont obtenus avec le maillage de 5120 éléments et pour $Ca = 0.1$, $Y_D = 0.025$, $Y_C = 0.25$, $d_c = 0.2$, et $\Delta t = 10^{-4}$.

Par ailleurs, dans le cas $G_c = 0.01$, on peut remarquer qu'après une phase de courte durée où $\bar{u}_{N,max}$ a une vitesse croissante jusqu'à $\bar{u}_{N,max} = 0.005$, ensuite jusqu'à $\bar{u}_{N,max} = 0.05$, $\bar{u}_{N,max}$ évolue à vitesse relativement constante par rapport au cas $G_c = 0.05$ (pour la courbe de $G_c = 0.01$, il y a plus de dix points qui ont permis d'obtenir la portion de la courbe entre $\bar{u}_{N,max} = 0.005$ et $\bar{u}_{N,max} = 0.05$).

Dans cette partie nous avons donné des premiers éléments sur l'influence du paramètre G_c sur la rupture d'une capsule en écoulement hyperbolique plan. Une étude plus systématique sur l'influence de ce paramètre reste à être menée. Il pourrait être intéressant de compléter ces résultats en étudiant comment la vitesse de propagation des lignes de discontinuités dans les bandes principales dépend de G_c , en utilisant un maillage assez fin pour avoir une bonne résolution. Par ailleurs, cette partie nous a permis de mettre en évidence l'utilité du modèle de régularisation visqueux pour obtenir des résultats avec un temps de calcul raisonnable, que nous n'aurions pu obtenir sinon qu'avec un maillage très fin (très coûteux).

6.4.2.6 Problème de verrouillage des éléments

Dans cette partie, nous mettons en évidence un problème rencontré lorsque l'on change l'orientation du maillage par rapport au cas présenté dans la partie précédente ($G_c = 0.01$). On considère pour cela le maillage de 5120 éléments, où, dans la configuration de référence, on impose $\varphi_0 = 0^\circ$ (Figure 6.7).

La Figure 6.19 montre la cartographie de l'endommagement et du saut de déplacement à l'instant t_f . On voit que malgré l'ouverture des discontinuités, l'endommagement a évolué au-delà de la valeur d_c dans 8 éléments. Cela est dû à un problème de verrouillage de ces éléments.

Pour l'expliquer, considérons la région de la membrane encadrée dans la Figure 6.19b, dont un agrandissement est donné sur la Figure 6.20, à l'instant t_2 où sont introduites les discontinuités dans les éléments verrouillés, et à l'instant t_f . Tout d'abord, d'après la Figure 6.20b, à l'instant t_f , il n'y a pas une unique bande qui traverse la zone encadrée, comme c'était le cas dans la partie précédente, mais deux bandes contiguës (colorées en jaune et vert sur la Figure). Les éléments qui se verrouillent sont les éléments au niveau desquels se rejoignent les deux bandes (ces éléments sont numérotés 1 et 2 sur la Figure 6.20b). Considérons ces deux éléments. Lorsque la membrane se déforme et que les discontinuités des éléments dans chaque bande s'ouvrent, on voit alors le côté FG (Figure 6.20b), par lequel sont connectés les deux éléments, qui s'allonge. Bien que les éléments numérotés 1 et 2 aient leurs discontinuités qui s'ouvrent, ils ne peuvent pas relaxer la déformation associée à l'allongement du côté FG . En effet, soit \underline{W} la direction d'une ligne matérielle le long de FG dans la configuration de référence, alors d'après l'équation (3.11) on a :

$$\underline{\bar{F}} \cdot \underline{W} = \underline{\hat{F}} \cdot \underline{W}. \quad (6.10)$$

Ainsi, les lignes matérielles orientées dans la direction de FG suivent la déformation $\underline{\hat{F}}$ de l'élément. En conséquence, à partir d'un certain seuil de l'allongement de FG , l'endommagement dépasse la valeur d_c dans les éléments numérotés 1 et 2.

Ce problème de verrouillage est connu dans la littérature. Comme nous l'avons illustré, il se pose lorsque des bandes d'éléments localisés se rencontrent de manière incompatible, c'est-à-dire qu'elles sont contiguës mais ne forment pas une unique bande. Dans notre cas, comme l'illustre la Figure 6.20a, l'origine du problème est ici due au fait qu'au moment où les discontinuités sont introduites dans les éléments numérotés 1 et 2, celles-ci passent au niveau des nœuds F (pour l'élément 1) et G (pour l'élément 2), ainsi, selon que la discontinuité soit considérée comme étant à droite ou à gauche du nœud, cela

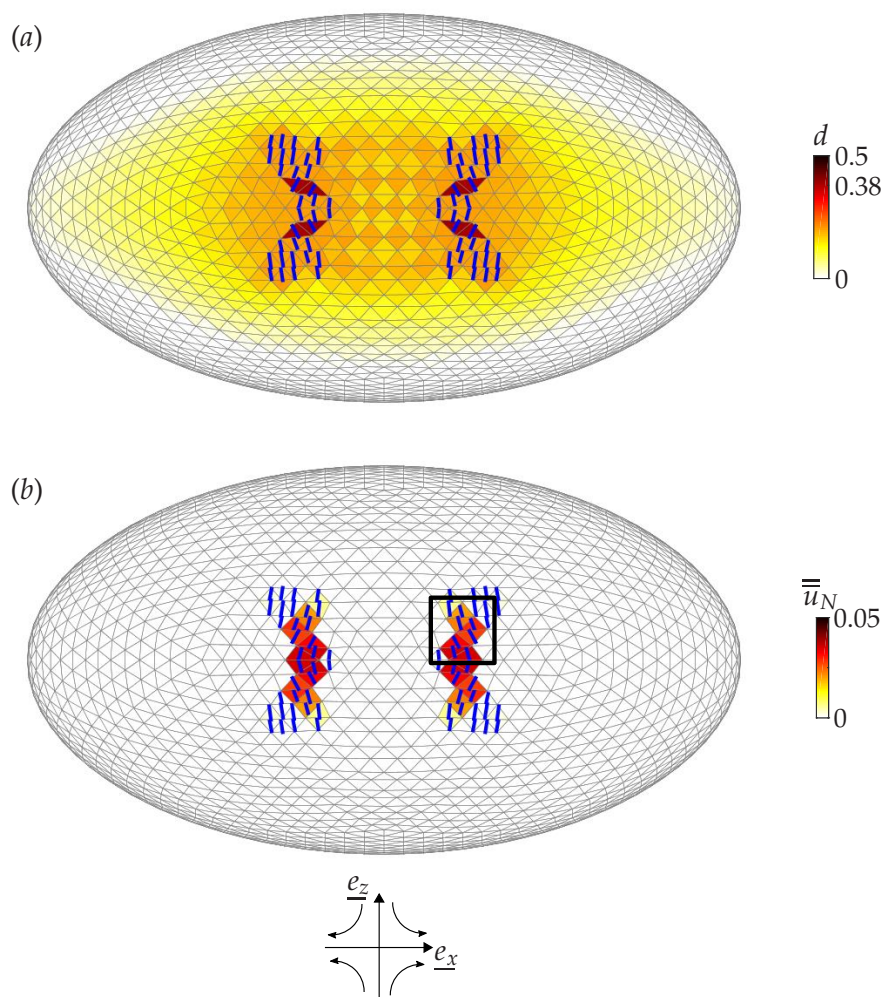


Figure 6.19 – Cartographies (a) de l'endommagement d , et (b) du saut de déplacement \bar{u}_N , à l'instant t_f lorsque $\bar{u}_{N,max} = 0.05$, obtenues avec le maillage de 5120 éléments pour $\varphi_0 = 0^\circ$ (voir la Figure 6.7 pour la définition de φ_0). La capsule est observée dans sa configuration courante dans le plan $(\underline{e}_x, \underline{e}_z)$. Les résultats sont obtenus pour $Ca = 0.1$, $Y_D = 0.025$, $Y_C = 0.25$, $d_c = 0.2$, $G_c = 0.01$, $\Delta t = 10^{-4}$, et $\gamma = 0.01$. Toutes les images sont à la même échelle.

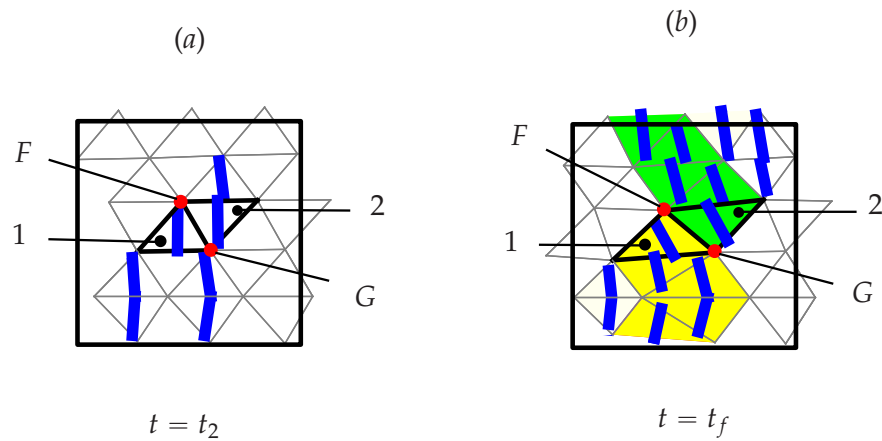


Figure 6.20 – Agrandissement de la région de la membrane de la capsule encadrée sur la Figure 6.19b, à l’instant (a) t_2 où sont introduites les discontinuités dans les éléments numérotés 1 et 2, et à l’instant (b) t_f lorsque $\bar{u}_{N,\max} = 0.05$. En jaune et vert sont représentées les bandes d’éléments localisés qui contiennent les éléments numérotés 1 et 2, respectivement.

change la description de la localisation. En particulier, si la discontinuité de l’élément 1 avait été considérée comme passant à droite du point F , et celle de l’élément 2 comme passant à gauche du point G , alors il y aurait eu une unique bande d’éléments localisés et il n’y aurait pas eu de problème de verrouillage.

Nous évoquerons dans la suite des méthodes qui ont été développées pour éviter ce problème de verrouillage.

7 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons développé le premier modèle numérique d’interaction fluide-structure permettant de modéliser la rupture d’une microcapsule lorsque celle-ci est déformée par des contraintes hydrodynamiques. Le modèle est développé dans le cadre de la méthode des discontinuités fortes et permet de modéliser les microdéfauts qui se développent dans la membrane de la capsule sous une forme diffuse avec un modèle d’endommagement, et les microdéfauts localisés dans les zones de localisation avec un modèle de zone cohésive. Nous modélisons un endommagement quasi-fragile qui correspond à une dissipation dans la membrane associée uniquement à la dégradation des propriétés élastiques, à la fois au niveau volumique et au niveau des interfaces. Le modèle est résolu en couplant la méthode des éléments finis intégrés (EFEM) pour

résoudre la déformation de la membrane, et la méthode des intégrales de frontière pour résoudre les écoulements de Stokes à l'intérieur et à l'extérieur de la capsule.

Nous avons obtenu des premiers résultats en considérant le cas d'une capsule initialement sphérique dans un écoulement hyperbolique plan. Le modèle permet d'étudier les différentes phases de la rupture de la microcapsule. Ainsi, on peut tout d'abord étudier comment s'initie et se développe l'endommagement diffus. Puis, on peut étudier comment s'initie les zones de localisation, et comment elles se propagent à travers la membrane. Avec un maillage suffisamment fin, on peut alors décrire précisément la zone de localisation, et prédire l'endroit où va s'initier une fissure ouverte et le chemin suivant lequel elle va se propager.

Les premiers tests ont mis en place des bases qui vont permettre de poursuivre l'étude du modèle. Tout d'abord, il semble important de mener une analyse de sensibilité pour étudier l'influence des différents paramètres du modèle sur les modes de rupture de la capsule. Par ailleurs, on pourra considérer d'autres écoulements. En particulier, on pourra poursuivre l'étude des chapitres 2 et 3 sur la rupture d'une capsule en écoulement de cisaillement simple. L'étude dans un autre écoulement devrait aussi permettre de pouvoir valider plus précisément le modèle en recherchant des cas où la rupture ne se produit pas dans une zone où il y a de la compression.

Les tests ont aussi permis de mettre en évidence certains problèmes numériques (verrouillage des éléments localisés), ce qui va permettre d'envisager des améliorations du modèle.

Nous reviendrons sur les perspectives envisageables pour la suite des développements du modèle dans le chapitre 5.

Chapitre 5

Conclusion et Perspectives

1 Conclusion

Pour répondre au besoin de contrôler la rupture des capsules en écoulement, nous avons établi les premiers modèles numériques de l'endommagement et de la rupture d'une microcapsule en écoulement. Ces travaux ont permis d'aborder un problème peu classique en mécanique de la rupture, car la membrane de la capsule est soumise à des contraintes visqueuses hydrodynamiques, elle peut subir de grandes déformations et se plisser, et les mécanismes d'endommagement ont lieu à des échelles plus petites que celles classiquement considérées.

Dans une première phase du travail, nous avons développé un modèle permettant de décrire les mécanismes d'endommagement qui se développent de manière diffuse dans la membrane d'une capsule en écoulement. Nous nous sommes placés dans le cadre de la mécanique de l'endommagement continu, et avons résolu le problème d'interaction fluide-structure de l'endommagement d'une capsule en écoulement en couplant la méthode des éléments finis pour la déformation de la capsule, et la méthode des intégrales de frontière pour les fluides interne et externe.

Nous avons étudié l'endommagement d'une capsule sphérique en écoulement de cisaillement simple, jusqu'à l'initiation de la rupture. Nous avons réalisé une étude systématique en considérant un critère d'endommagement général, basé sur la densité d'énergie élastique restituée. L'endommagement se développe dans les régions de la membrane situées au niveau de l'axe de vortacité de l'écoulement. On montre que cet endommagement reste très localisé et qu'il a donc peu d'effet sur la déformation de la capsule, ce qui rend sa détection difficile expérimentalement. Ce modèle permet de prédire l'initiation de la rupture à l'endroit où elle est généralement observée pour les capsules fragiles, dans les régions où les tensions sont les plus importantes. Les propriétés de résistance d'une capsule, correspondant aux paramètres du modèle d'en-

dommagement, peuvent être estimées lorsque la capsule est déformée jusqu'à rupture, en détectant le seuil de la force de l'écoulement à partir duquel la déformation de la capsule diverge.

Grâce à la modularité du modèle, nous avons développé un second critère d'endommagement. Ce critère est toujours basé sur la densité d'énergie élastique restituée, mais celle-ci ne correspond qu'à une part de l'énergie élastique stockée, celle associée à la dilatation surfacique locale de la membrane. Ce modèle permet de prédire l'initiation de la rupture comme l'ont observé Chang & Olbricht (1993a) pour des capsules en polyamide. Il serait intéressant d'élucider quel mécanisme d'endommagement rend la membrane de ces capsules sensible aux dilatations surfaciques. Toutefois, l'expérience de Chang *et al.* gagnerait à être reproduite, pour déterminer en particulier si la rupture s'est bien produite pour un faible nombre de cycles de rotation de la membrane, car des effets de fatigue pourraient aussi entrer en jeu, ce dont nous n'avons pas tenu compte dans le modèle.

Dans une deuxième phase du travail, nous avons étendu le modèle, de manière à pouvoir décrire la phase de localisation. Le phénomène de localisation ayant un caractère multi-échelle, nous n'avons pas cherché à décrire finement les mécanismes d'endommagement à l'échelle des zones de localisation, mais à en rendre compte à l'échelle de la capsule. Ainsi, en nous plaçant dans le cadre de l'approche des discontinuités fortes, on a choisi de condenser l'information associée aux zones de localisation, correspondant à l'échelle microscopique, sur une surface à l'échelle macroscopique. On a alors décrit la dissipation localisée dans le cadre de la thermodynamique des interfaces, qui a un formalisme identique à la thermodynamique des milieux continus. Le problème d'interaction fluide-structure de l'endommagement et de la rupture d'une capsule en écoulement est résolu en couplant la méthode des éléments finis intégrés pour la déformation de la capsule, et la méthode des intégrales de frontière pour les fluides interne et externe. L'application au cas d'une capsule sphérique en écoulement hyperbolique plan a permis d'illustrer comment le modèle décrit différents stades de la rupture, depuis l'initiation de l'endommagement, jusqu'à l'initiation d'une macrofissure. On peut alors prédire l'endroit où va s'initier la fissure, et la direction dans laquelle elle va se propager.

En développant ce modèle d'interaction fluide-structure, nous nous sommes attachés à décrire la rupture quasi-fragile généralement observée pour les capsules artificielles et naturelles destinées à être en suspension dans un fluide. Toutefois, le cadre du modèle est général et est adapté à la modélisation d'autres types d'endommagements, diffus ou

localisé, et peut inclure d'autres phénomènes dissipatifs, correspondant par exemple à la présence de déformations permanentes, ou à de la viscosité.

Nous avons souligné certaines des limites actuelles du modèle de rupture. Une des limites est que le fluide ne voit pas la description fine des déformations dans le voisinage des zones de localisation. Pour limiter l'effet de cette incompatibilité à l'échelle microscopique entre le fluide et le solide, nous nous sommes restreints à des amplitudes de déformation localisée qui restent modérées. De la même manière, pour modéliser la phase de fissuration, une description plus fine du fluide est nécessaire. Par ailleurs, les premiers résultats obtenus ont mis en évidence qu'il peut apparaître un problème de verrouillage des éléments dû à la non continuité du chemin des discontinuités entre les éléments. On pourra envisager d'utiliser certaines méthodes développées dans la littérature pour résoudre ce problème.

Le modèle de rupture en interaction fluide-structure développé dans ces travaux est un premier essai pour modéliser la rupture d'une microcapsule en écoulement. À terme, le modèle devrait permettre d'optimiser la conception des microcapsules en permettant d'ajuster au mieux leurs propriétés afin de contrôler le relargage. Par ailleurs, ce modèle devrait permettre de mettre au point des méthodes de caractérisation des propriétés de résistance de la membrane des microcapsules.

2 Perspectives

À l'issue de ces travaux, différentes perspectives sont envisageables, à plus ou moins long terme.

2.1 Résolution de problèmes numériques

Pour régler le problème de verrouillage des éléments que nous avons mis en évidence dans la partie 6.4.2.6 du chapitre 4, qui se pose lorsque le chemin de la discontinuité n'est pas continu, on pourrait envisager d'utiliser certains algorithmes de "tracking" (Oliver & Huespe, 2004a). En particulier, dans ces algorithmes, on impose que la discontinuité se propage de manière continue entre les éléments (dans la configuration de référence). Le critère d'orientation des discontinuités dans les éléments localisés resterait inchangé, mais la discontinuité ne passerait plus par le centre de l'élément de manière générale. Une des difficultés qui pourrait toutefois persister est lorsque deux éléments localisés contigus se bloquent alors qu'ils sont issus de la propagation de deux discontinuités distinctes. Ce problème est évoqué par Oliver & Huespe (2004b), et il y est proposé une

solution consistant à entourer chaque discontinuité d'une zone barrière, dans laquelle aucune autre discontinuité ne peut se propager. On pourrait envisager d'utiliser cette méthode en plus de l'algorithme de tracking.

Un autre problème de verrouillage des éléments, dont l'un des effets est l'augmentation de la valeur de l'endommagement au-delà de la valeur critique d_c , pourrait survenir dû au fait que nous avons choisi de découpler les deux lois cohésives associées aux deux modes d'ouverture (modes I et II). En particulier, lorsque l'interface s'endommage en mode I, mais qu'elle reste non endommagée en mode II, la différence de rigidité entre les deux interfaces peut induire un problème de verrouillage (Wells & Sluys, 2001). Nous n'avons pas observé ce phénomène dans le cas d'une capsule en écoulement hyperbolique plan car la composante tangentielle du vecteur traction au niveau des discontinuités restait faible par rapport à la composante normale, mais le problème pourrait se poser dans d'autres écoulements. Dans ce cas, on pourrait alors envisager de coupler les lois des deux modes, par exemple en suivant le modèle proposé par Ortiz & Pandolfi (1999).

Enfin, un autre aspect pour lequel un verrouillage de l'élément peut apparaître est lié au fait que les chargements considérés peuvent être complexes, et en particulier, au cours de la déformation de la capsule, le chargement appliqué à un élément localisé peut tourner par rapport à l'orientation de sa discontinuité, par exemple dans le cas où la membrane est en rotation. Ainsi, on peut par exemple se retrouver dans le cas où la direction principale maximum des tensions est alignée avec la direction de la discontinuité, et dans ce cas, l'ouverture de la discontinuité peut ne pas suffire pour relaxer l'état de tension et l'endommagement peut alors finalement évoluer de nouveau. On pourrait alors considérer qu'on est dans un cas où une nouvelle zone de localisation apparaît dans l'élément, avec une orientation différente de la première. Cette deuxième discontinuité serait introduite lorsque l'endommagement tend à dépasser la valeur critique d_c , et on conserverait le même critère pour déterminer son orientation au moment où elle est introduite. Une méthode permettant de traiter plusieurs discontinuités par élément a par exemple été proposée par Manzoli & Shing (2005).

2.2 Prise en compte de la rigidité de flexion

Dans la partie 6.4.2 du chapitre 4, nous avons vu que dans le cas de la rupture d'une capsule en écoulement hyperbolique plan, les zones de localisation apparaissant dans une zone de la membrane où elle est en compression dans une direction, la description de la localisation pourrait alors être affectée par la dépendance qu'a la solution au

maillage avec le modèle de membrane. Pour obtenir une description plus objective des champs dans les zones en compression, on pourrait envisager de tenir compte de la rigidité de flexion de l'enveloppe de la capsule. On pourrait alors envisager d'intégrer le modèle de rupture au modèle développé dans notre équipe, couplant la méthode des intégrales de frontière à un modèle éléments finis de coque fine (Dupont *et al.*, 2015). L'objectif étant d'obtenir une description plus objective des champs, on pourrait conserver un modèle de rupture qui ne dépend que des déformations de membrane (déformation de la surface moyenne). Dans le cas où des plis se forment, ou dans le cas des écoulements confinés où l'enveloppe de la capsule peut subir de fortes variations de courbure, on peut concevoir que les déformations de flexion puissent être suffisamment importantes pour induire un endommagement, qui ne soit pas homogène le long de l'épaisseur de l'enveloppe. Ainsi, la question pourra se poser d'étendre le modèle de rupture de manière à tenir compte de cet aspect.

2.3 Description des fluides

Un autre aspect qui reste à être développé concerne la meilleure prise en compte des fluides dans le modèle de rupture. L'objectif serait de mieux prendre en compte le fluide dans la phase de localisation, et cela pourrait ensuite permettre de tenir compte du relargage du fluide interne lorsqu'une fissure ouverte (libre de contraintes) est formée à travers la membrane, au niveau des zones de localisation. Pour cela, il faudrait parvenir à coupler fortement le fluide et le solide jusqu'au niveau des zones de localisation, et, dans le cas où une fissure ouverte apparaît, tenir compte de l'interface entre le fluide interne et le fluide externe entre les deux lèvres de la fissure. Dans la phase de relargage, le régime d'écoulement du modèle (écoulements de Stokes) imposerait de rester dans le cas où les vitesses d'éjection du fluide interne correspondent à des nombres de Reynolds petits.

Dans ce paragraphe, on propose une piste de réflexion dans la perspective de mieux tenir compte des fluides dans le modèle de rupture. Si on reste dans le cadre de notre modèle, pour que les fluides puissent capturer la zone de localisation, on pourrait envisager de raffiner le maillage fluide au niveau des zones de localisation, sans modifier le maillage solide. On pourrait par exemple ajouter des nœuds au maillage fluide, que l'on positionnerait sur les bords de la zone de localisation. Pour avoir une description de la zone de localisation que l'on puisse coupler avec le fluide, on pourrait envisager de discrétiser le problème solide avec la méthode XFEM, à la place de la méthode EFEM. En effet, la méthode XFEM permet d'avoir un champ de déplacement solide qui est continu

sur l'ensemble du maillage hors de la discontinuité Γ_0 , ce qui serait compatible avec le champ de vitesse continu du fluide. La Figure 2.1 illustre une façon dont on pourrait alors mailler le fluide au niveau d'une zone de localisation. Les deux lignes Γ^- et Γ^+ correspondent aux bords de la zone de localisation décrite par la méthode XFEM, c'est-à-dire le transport de Γ_0 par le champ de déplacement solide enrichi. En considérant des éléments triangulaires à trois nœuds pour le maillage de la membrane, Γ^- et Γ^+ sont des lignes brisées composées de segments. Les nœuds fluides qu'on ajouterait seraient alors positionnés aux extrémités de chaque segment. De cette manière, on souhaite ajouter au champ de vitesse fluide seulement des degrés de libertés qui pourraient correspondre avec les degrés de liberté solides associés au saut de déplacement (degrés de libertés nœuds ajoutés par l'enrichissement XFEM). Pour le saut de contraintes visqueuses fluides, sur le maillage fluide raffiné, il serait interpolé de manière standard, et sur le maillage solide, il serait interpolé avec l'enrichissement XFEM (comme le champ de déplacement) sur la configuration de référence. Avec une telle description du champ de vitesse fluide et du saut de contraintes visqueuses fluides, les conditions de couplage permettraient alors de coupler le fluide avec la description microscopique de la membrane.

Certaines difficultés sont toutefois à prévoir avec cette méthode. Une des difficultés serait d'assurer un couplage correct entre les fluides et le solide, car les champs que l'on couple n'ont pas été enrichis avec les mêmes modes selon que leur description soit donnée par le problème fluide ou solide. Par ailleurs, dans le cas où la discontinuité Γ_0 se propage, après une opération de remaillage du fluide, comme les nœuds du maillage fluide sont au niveau de la discontinuité qui est encore fermée, des difficultés sont à prévoir pour que la discontinuité introduite puisse s'ouvrir, si c'est la vitesse du fluide qui contrôle cette ouverture. En effet, au niveau d'une discontinuité qui vient d'être introduite et qui commence à s'ouvrir, le champ de vitesse est discontinu, ce qui n'est pas possible pour le champ de vitesse fluide.

Une autre alternative envisageable pour mieux prendre en compte le fluide, et qui permettrait de rester toujours dans le cadre théorique du modèle développé dans le chapitre 4, serait d'utiliser des éléments cohésifs (Ortiz & Pandolfi, 1999) pour modéliser les discontinuités Γ_0 . Avec cette méthode, on tiendrait compte de manière explicite de la discontinuité au niveau géométrique pour le solide, car les éléments cohésifs (1D) sont intercalés entre deux éléments solides (2D). Cela permettrait alors de conserver des maillages conformes entre le fluide et le solide, tout en permettant au fluide de voir explicitement la zone de localisation. Toutefois, une limite importante à cette méthode

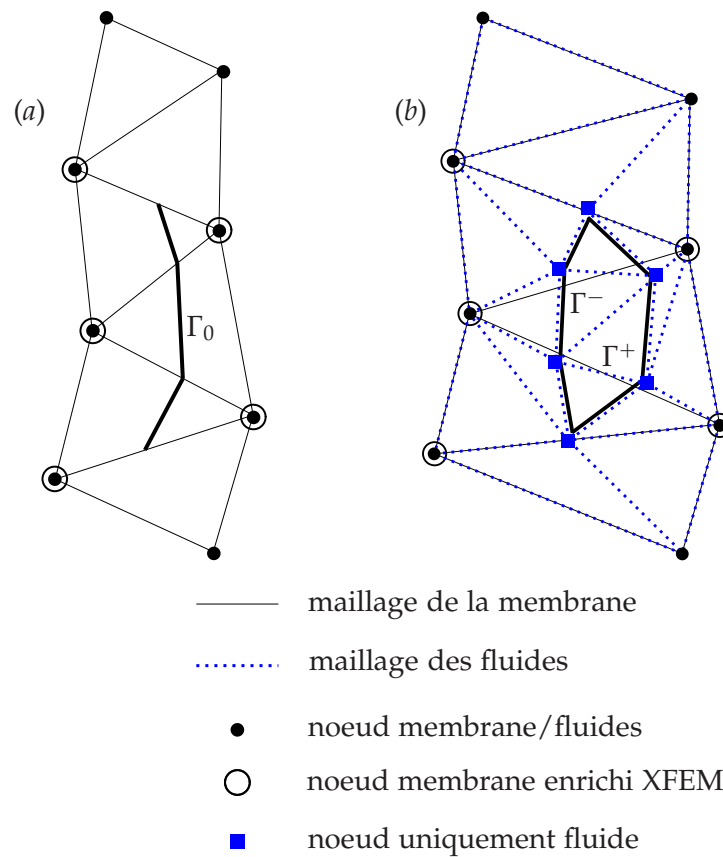


Figure 2.1 – Pour un problème de la membrane qu'on résoudrait avec la méthode XFEM, représentation (a) d'une portion du maillage de la membrane contenant la discontinuité Γ_0 dans la configuration de référence, et (b) des maillages solide et fluide correspondants dans la configuration courante, où le maillage fluide capture la position des deux bords Γ^- et Γ^+ de la zone de localisation.

est qu'il est nécessaire d'utiliser un maillage adaptatif, ce qui peut rendre la solution dépendante du maillage.

2.4 Dialogue essais-calcul

De manière générale, assurer un dialogue essais-calcul permettra de converger vers une meilleure compréhension et une meilleure prédiction de la rupture des capsules. Des essais adaptés permettraient d'alimenter le choix des lois de comportement des endommagements diffus et localisés du modèle, et d'identifier plus précisément les paramètres de ces lois.

Les méthodes standards de caractérisation et d'identification du comportement non linéaire des matériaux et de leur localisation semblent difficiles à mettre en œuvre pour les capsules, à cause de la fragilité et de la petite taille de leur membrane.

En envisageant des méthodes d'analyses inverses, nous avons mis en évidence dans le chapitre 2 que l'étude de l'endommagement est délicate si cette analyse est basée sur la comparaison entre des quantités globales obtenues numériquement et expérimentalement, car si l'endommagement et les déformations sont localisés sur une région peu étendue de la membrane, ils ont alors peu d'effet au niveau global.

On pourrait alors envisager d'appliquer les méthodes d'analyse inverse en essayant de se placer dans des conditions où le chargement mécanique localise moins l'endommagement. Par exemple, en considérant le cas d'une capsule sphérique comprimée entre deux plaques, l'endommagement pourrait être réparti sur une région étendue au niveau du plan équatorial, où les tensions sont les plus importantes, et l'endommagement aurait alors plus d'effet au niveau global. Il faudrait toutefois ici développer le modèle numérique associé (prise en compte du contact).

Une autre possibilité serait de réaliser l'analyse inverse non plus en comparant des quantités globales entre expérience et modèle, mais plutôt des quantités locales, par exemple le champ de déformation sur la capsule. On peut alors se poser la question de savoir si les méthodes de mesure de champ standards, par exemple par corrélation d'image, pourraient être adaptées à l'échelle des microcapsules. Il faudrait en particulier que la membrane de la capsule soit texturée, ou bien parvenir à y greffer des marqueurs. L'accès à la mesure de quantités locales pourrait en particulier aider à la caractérisation et à l'identification de l'endommagement localisé.

Une autre difficulté expérimentale est d'arriver à observer la rupture dans le cas où la capsule est en écoulement. Il faut en effet parvenir à contrôler l'écoulement jusqu'à la rupture. On pourrait pour cela utiliser des techniques microfluidiques, qui permettent

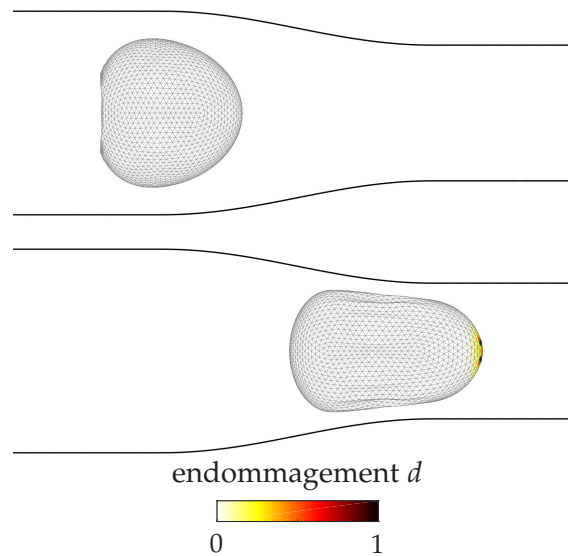


Figure 2.2 – Cartographie de l’endommagement d’une capsule sphérique en écoulement dans un canal convergent à section carrée, à un instant avant l’entrée dans le convergent (haut), et à l’instant d’initiation de la rupture (bas) lorsque $d = 1$. La capsule a un diamètre 1.1 fois plus grand que la hauteur du canal en sortie. Le nombre capillaire est égal à 0.05, et $Y_D = 0.1$, $Y_C = 0.5$ (Y_D et Y_C étant ici adimensionnés par G_s).

de contrôler précisément les écoulements. Elles sont par exemple utilisées pour déterminer les propriétés élastiques de la membrane des capsules par analyse inverse, en faisant s’écouler les capsules dans des canaux microfluidiques dont les dimensions transverses sont semblables à la taille des capsules (Lefebvre *et al.*, 2008; Hu *et al.*, 2013).

De la même manière, on pourrait envisager de caractériser la rupture des capsules à partir de notre modèle, en analysant la rupture des capsules dans des canaux. On pourrait alors contrôler la rupture en adaptant la forme des canaux, par exemple en créant un profil convergent.

À cette fin, nous avons étendu le code utilisé au sein de l’équipe (Hu *et al.*, 2012), qui permet d’étudier l’écoulement d’une capsule dans un canal à section constante, de manière à pouvoir considérer des géométries de canaux à section variable. La Figure 2.2 illustre le cas d’une capsule pour laquelle la rupture s’initie lors du passage dans la partie convergente d’un canal à section carrée.

Annexe A

Linéarisation des équations d'équilibre des discontinuités

L'objectif de cette Annexe est de calculer l'opérateur tangent cohérent $\mathbf{K}_{h\alpha, n+1}^{e, (i)}$, introduit dans l'équation (5.9) du chapitre 4. Dans la suite, sauf mention contraire, les équations et les sections auxquelles nous faisons référence correspondent au chapitre 4.

Pour déterminer $\mathbf{K}_{h\alpha, n+1}^{e, (i)}$, il faut calculer la dérivée directionnelle introduite dans l'équation (5.7), c'est-à-dire la dérivée directionnelle de \mathbf{h}^e (défini dans l'équation (3.17)₂) dans la direction $\Delta\alpha^e = (\Delta\alpha_N^e, \Delta\alpha_M^e)$. De manière équivalente, on va mener les calculs en calculant la dérivée directionnelle de la grandeur scalaire h^e définie par :

$$h^e = \delta\alpha^T \mathbf{h}^e, \quad (0.1)$$

où $\delta\alpha = [\delta\alpha_N \ \delta\alpha_M]$ ne dépend pas de $\Delta\alpha^e$.

Plus généralement, on se propose de déterminer l'opérateur tangent cohérent de h^e associé à l'ensemble des degrés de liberté d'un élément, c'est-à-dire $\hat{\underline{d}}_a$ et (α_N^e, α_M^e) . Pour cela, on calcule la dérivée directionnelle de h^e en $\mathbb{U} = (\hat{\underline{d}}_a, \alpha_N^e, \alpha_M^e)$ dans la direction $\Delta\mathbb{U} = (\Delta\hat{\underline{d}}_a, \Delta\alpha_N^e, \Delta\alpha_M^e)$, définie par :

$$\mathcal{D}(h^e)[\Delta\mathbb{U}] = \frac{d}{d\varepsilon} h^e(\mathbb{U} + \varepsilon\Delta\mathbb{U})|_{\varepsilon=0}. \quad (0.2)$$

Dans la suite des calculs, on va s'appuyer sur le fait que l'expression du gradient de transformation $\underline{\underline{F}}$ a été dérivée à partir du champ de déplacement fictif \underline{u}^{fic} donné par l'équation (2.3), de sorte qu'on a :

$$\underline{\underline{F}} = \underline{\underline{1}}_s^0 + \text{reg} \left(\underline{\underline{\nabla}}^0 \underline{u}^{fic} \right), \quad (0.3)$$

avec la forme discrétisée :

$$\underline{u}^{fic} = \sum_{a=1}^3 N_a \hat{\underline{d}}_a + (\mathcal{H}^+ - N^+) \bar{\underline{u}}, \quad (0.4)$$

où $\bar{\nabla}^0$ est le gradient surfacique sur la configuration de référence, et $reg(X)$ désigne la partie régulière de X . Dans la suite, on notera simplement $\underline{u} = \underline{u}^{fic}$.

Pour calculer la dérivée directionnelle (0.2), commençons par exprimer h^e . D'après l'équation (3.15)₂, on peut réécrire l'équation (0.1) sous la forme :

$$h^e = -\delta \bar{\underline{u}} \cdot \underline{\tau} \cdot \underline{n}^b + \delta \bar{\underline{u}} \cdot \underline{t}_{\Gamma_0^e}, \quad (0.5)$$

avec $\delta \bar{\underline{u}} = \delta \alpha_N \underline{n}^\sharp + \delta \alpha_M \underline{m}^\sharp$. Le tenseur des tensions de Kirchhoff $\underline{\tau}$ étant lié au premier tenseur des tensions de Piola-Kirchhoff \underline{P} par la relation $\underline{\tau} = \underline{P} \cdot \bar{\underline{F}}^T$, et d'après la définition de \underline{n}^b dans l'équation (2.39), on peut alors réécrire l'équation (0.5) sous la forme :

$$h^e = -\delta \bar{\underline{u}} \cdot \underline{P} \cdot \underline{N} + \delta \bar{\underline{u}} \cdot \underline{t}_{\Gamma_0^e}. \quad (0.6)$$

En notant $\delta \bar{\underline{U}} = \bar{\underline{F}}^{-1} \cdot \delta \bar{\underline{u}}$, on a alors :

$$\begin{aligned} h^e &= -(\bar{\underline{F}} \cdot \delta \bar{\underline{U}}) \cdot \underline{P} \cdot \underline{N} + (\delta \alpha_N \underline{n}^\sharp + \delta \alpha_M \underline{m}^\sharp) \cdot (t_N \underline{n}^b + t_M \underline{m}^b) \\ &= -\delta \bar{\underline{U}} \cdot \bar{\underline{F}}^T \cdot \underline{P} \cdot \underline{N} + (\delta \alpha_N t_N + \delta \alpha_M t_M). \end{aligned} \quad (0.7)$$

En notant $\Delta \underline{u} = \mathcal{D}(\underline{u})[\Delta \underline{U}]$, et en introduisant $\bar{\nabla}(\cdot) = reg(\bar{\nabla}^0(\cdot)) \cdot \bar{\underline{F}}^{-1}$, la dérivée directionnelle du premier terme du membre de droite de (0.7) est donnée par :

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(\delta \bar{\underline{U}} \cdot \bar{\underline{F}}^T \cdot \underline{P} \cdot \underline{N})[\Delta \underline{U}] &= \delta \bar{\underline{U}} \cdot \mathcal{D}(\bar{\underline{F}}^T)[\Delta \underline{U}] \cdot \underline{P} \cdot \underline{N} + \delta \bar{\underline{U}} \cdot \bar{\underline{F}}^T \cdot \mathcal{D}(\underline{P})[\Delta \underline{U}] \cdot \underline{N} \\ &= \delta \bar{\underline{U}} \cdot \bar{\underline{F}}^T \cdot \bar{\nabla} \Delta \underline{u}^T \cdot \underline{P} \cdot \underline{N} + \delta \bar{\underline{U}} \cdot \bar{\underline{F}}^T \cdot (\mathcal{D}(\bar{\underline{F}})[\Delta \underline{u}] \cdot \underline{S} + \bar{\underline{F}} \cdot \mathcal{D}(\underline{S})[\Delta \underline{u}]) \cdot \underline{N} \\ &= \delta \bar{\underline{u}} \cdot \underbrace{(\bar{\nabla} \Delta \underline{u}^T + \bar{\nabla} \Delta \underline{u})}_{2\bar{\underline{\varepsilon}}(\Delta \underline{u})} \cdot \underbrace{\underline{P} \cdot \underline{N}}_{\underline{\tau} \cdot \underline{n}^b} + \delta \bar{\underline{u}} \cdot \bar{\underline{F}} \cdot \underbrace{\underline{C}_0^{an} : (\bar{\underline{F}}^T \cdot \bar{\underline{\varepsilon}}(\Delta \underline{u}) \cdot \bar{\underline{F}})}_{\underline{C}^{an} : \bar{\underline{\varepsilon}}(\Delta \underline{u})} \cdot \bar{\underline{F}}^T \cdot \bar{\underline{F}}^{-T} \cdot \underline{N} \\ &= \delta \bar{\underline{u}} \cdot [2\bar{\underline{\varepsilon}}(\Delta \underline{u}) \cdot \underline{\tau} + \underline{C}^{an} : \bar{\underline{\varepsilon}}(\Delta \underline{u})] \cdot \underline{n}^b, \end{aligned} \quad (0.8)$$

où \underline{S} est le second tenseur des tensions de Piola-Kirchhoff, et les modules tangents \underline{C}_0^{an} et \underline{C}^{an} sont définis dans l'Annexe B. La dérivée directionnelle du second terme du membre

de droite de (0.7) est donnée par :

$$\begin{aligned}
\mathcal{D}(\delta\alpha_N t_N + \delta\alpha_M t_M)[\Delta\mathbf{U}] &= \delta\alpha_N \mathcal{D}(t_N)[\Delta\mathbf{U}] + \delta\alpha_M \mathcal{D}(t_M)[\Delta\mathbf{U}] \\
&= \delta\alpha_N \overline{\overline{\mathbf{C}}}_N^{an} \Delta\alpha_N + \delta\alpha_M \overline{\overline{\mathbf{C}}}_M^{an} \Delta\alpha_M \\
&= \begin{bmatrix} \delta\alpha_N & \delta\alpha_M \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \overline{\overline{\mathbf{C}}}_N^{an} & 0 \\ 0 & \overline{\overline{\mathbf{C}}}_M^{an} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta\alpha_N \\ \Delta\alpha_M \end{bmatrix},
\end{aligned} \tag{0.9}$$

où les modules tangents $\overline{\overline{\mathbf{C}}}_N^{an}$ et $\overline{\overline{\mathbf{C}}}_M^{an}$ sont définis dans l'Annexe B. Le premier terme du membre de droite de (0.8) peut se mettre sous la forme :

$$\begin{aligned}
2\delta\overline{\underline{\mathbf{u}}} \cdot \overline{\underline{\underline{\mathbf{E}}}}(\Delta\underline{\mathbf{u}}) \cdot \underline{\underline{\boldsymbol{\tau}}} \cdot \underline{\underline{\mathbf{n}}}^b &= 2\delta u^\alpha \overline{\underline{\underline{\mathbf{E}}}}_{\overline{\underline{\underline{\mathbf{S}}}}\alpha\beta} \tau^{\beta\gamma} n_\gamma^b \\
&= \begin{bmatrix} \delta\alpha_N & \delta\alpha_M \end{bmatrix} \begin{bmatrix} n^{\#1} & m^{\#1} \\ n^{\#2} & n^{\#2} \end{bmatrix}^T \underbrace{n^{b,ns,T} \begin{bmatrix} 2\tau^{11} & 0 & \tau^{12} \\ 2\tau^{12} & 0 & \tau^{22} \\ 0 & 2\tau^{12} & \tau^{11} \\ 0 & 2\tau^{22} & \tau^{12} \end{bmatrix}}_{\tilde{\boldsymbol{\tau}}} \begin{bmatrix} \overline{\underline{\underline{\mathbf{E}}}}_{\overline{\underline{\underline{\mathbf{S}}}}11} \\ \overline{\underline{\underline{\mathbf{E}}}}_{\overline{\underline{\underline{\mathbf{S}}}}22} \\ 2\overline{\underline{\underline{\mathbf{E}}}}_{\overline{\underline{\underline{\mathbf{S}}}}12} \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{0.10}$$

avec $n^{b,ns} = \begin{bmatrix} n_1^b & 0 \\ n_2^b & 0 \\ 0 & n_1^b \\ 0 & n_2^b \end{bmatrix}$ et $\overline{\underline{\underline{\mathbf{E}}}}_{\overline{\underline{\underline{\mathbf{S}}}}\alpha\beta}$ correspond aux composantes covariantes de $\overline{\underline{\underline{\mathbf{E}}}}(\Delta\underline{\mathbf{u}})$, la

partie tangente de $\overline{\underline{\underline{\mathbf{E}}}}(\Delta\underline{\mathbf{u}})$ sur $\overline{\underline{\underline{\mathbf{S}}}}$. Le second terme du membre de droite de (0.8) peut se mettre sous la forme :

$$\begin{aligned}
\delta\overline{\underline{\underline{\mathbf{u}}}} \cdot \overline{\underline{\underline{\mathbf{C}}}}^{an} : \overline{\underline{\underline{\mathbf{E}}}}(\Delta\underline{\mathbf{u}}) \cdot \underline{\underline{\mathbf{n}}}^b &= \delta u_\alpha c^{\alpha\beta\gamma\delta} \overline{\underline{\underline{\mathbf{E}}}}_{\overline{\underline{\underline{\mathbf{S}}}}\gamma\delta} n_\beta^b \\
&= \delta u^\rho a_{\alpha\rho} c^{\alpha\beta\gamma\delta} \overline{\underline{\underline{\mathbf{E}}}}_{\overline{\underline{\underline{\mathbf{S}}}}\gamma\delta} n_\beta^b \\
&= \begin{bmatrix} \delta\alpha_N & \delta\alpha_M \end{bmatrix} \begin{bmatrix} n^{\#1} & m^{\#1} \\ n^{\#2} & n^{\#2} \end{bmatrix}^T \underbrace{n^{b,ns,T} \begin{bmatrix} \overline{\underline{\underline{\mathbf{a}}}}_{11} & 0 & \overline{\underline{\underline{\mathbf{a}}}}_{12} \\ 0 & \overline{\underline{\underline{\mathbf{a}}}}_{12} & \overline{\underline{\underline{\mathbf{a}}}}_{11} \\ \overline{\underline{\underline{\mathbf{a}}}}_{12} & 0 & \overline{\underline{\underline{\mathbf{a}}}}_{22} \\ 0 & \overline{\underline{\underline{\mathbf{a}}}}_{22} & \overline{\underline{\underline{\mathbf{a}}}}_{12} \end{bmatrix}}_{H^T} \underbrace{\begin{bmatrix} c^{1111} & c^{1122} & c^{1112} \\ c^{2211} & c^{2222} & c^{2212} \\ c^{1211} & c^{1222} & c^{1212} \end{bmatrix}}_{c^{an}} \begin{bmatrix} \overline{\underline{\underline{\mathbf{E}}}}_{\overline{\underline{\underline{\mathbf{S}}}}11} \\ \overline{\underline{\underline{\mathbf{E}}}}_{\overline{\underline{\underline{\mathbf{S}}}}22} \\ 2\overline{\underline{\underline{\mathbf{E}}}}_{\overline{\underline{\underline{\mathbf{S}}}}12} \end{bmatrix}.
\end{aligned} \tag{0.11}$$

On obtient alors pour la dérivée directionnelle de h^e :

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(h^e)[\Delta \mathbf{U}] = & - \begin{bmatrix} \delta \alpha_N & \delta \alpha_M \end{bmatrix} \begin{bmatrix} n^{\#1} & m^{\#1} \\ n^{\#2} & n^{\#2} \end{bmatrix}^T n^{b,ns,T} \left\{ \bar{\boldsymbol{\tau}} + H^T \cdot c^{an} \right\} \begin{bmatrix} \bar{\varepsilon}_{s11} \\ \bar{\varepsilon}_{s22} \\ 2\bar{\varepsilon}_{s12} \end{bmatrix} \\ & + \begin{bmatrix} \delta \alpha_N & \delta \alpha_M \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{C}_N^{an} & 0 \\ 0 & \bar{C}_M^{an} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta \alpha_N \\ \Delta \alpha_M \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (0.12)$$

Il reste maintenant à expliciter la dérivée directionnelle $\bar{\underline{\underline{\varepsilon}}}_s(\Delta \underline{u})$ en fonction de $(\Delta \hat{d}_a, \Delta \alpha_N, \Delta \alpha_M)$.
Commençons par expliciter $\Delta \underline{u}$ à partir de (0.4) :

$$\begin{aligned} \Delta \underline{u} &= \mathcal{D}(\underline{u})[\Delta \mathbf{U}] \\ &= \sum_{a=1}^3 N_a \Delta \hat{d}_a + (\mathcal{H}^+ - N^+) \mathcal{D}(\bar{\underline{\underline{u}}})[\Delta \mathbf{U}]. \end{aligned} \quad (0.13)$$

D'après (3.10), on a :

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(\bar{\underline{\underline{u}}})[\Delta \mathbf{U}] &= \mathcal{D}(\bar{\underline{\underline{F}}} \cdot \bar{\underline{\underline{U}}})[\Delta \mathbf{U}] \\ &= \mathcal{D}(\bar{\underline{\underline{F}}} \cdot \underline{\underline{B}} \cdot \bar{\underline{\underline{U}}})[\Delta \mathbf{U}] \\ &= \mathcal{D}(\bar{\underline{\underline{F}}})[\Delta \hat{d}_a] \cdot \underline{\underline{B}} \cdot \bar{\underline{\underline{U}}} + \bar{\underline{\underline{F}}} \cdot \mathcal{D}(\underline{\underline{B}})[\Delta \alpha_N, \Delta \alpha_M] \cdot \bar{\underline{\underline{U}}} + \bar{\underline{\underline{F}}} \cdot \mathcal{D}(\bar{\underline{\underline{U}}})[\Delta \alpha_N, \Delta \alpha_M] \end{aligned} \quad (0.14)$$

avec $\underline{\underline{B}} = (\underline{\underline{1}}_s^0 - \underline{\underline{F}})^{-1}$, où $\underline{\underline{F}}$ a été introduit dans l'équation (3.9). On calcule séparément :

$$\mathcal{D}(\bar{\underline{\underline{F}}})[\Delta \hat{d}_a] = \sum_{a=1}^3 \Delta \hat{d}_a \otimes \nabla^0 N_a \quad (0.15)$$

et :

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(\underline{\underline{B}})[\Delta \alpha_N, \Delta \alpha_M] &= \underline{\underline{B}} \cdot \mathcal{D}(\underline{\underline{F}})[\Delta \alpha_N, \Delta \alpha_M] \cdot \underline{\underline{B}} \\ &= -\underline{\underline{B}} \cdot \Delta \bar{\underline{\underline{U}}} \otimes \nabla^0 N^+ \cdot \underline{\underline{B}}. \end{aligned} \quad (0.16)$$

avec :

$$\begin{aligned} \Delta \bar{\underline{\underline{U}}} &= \mathcal{D}(\bar{\underline{\underline{U}}})[\Delta \alpha_N, \Delta \alpha_M] \\ &= \Delta \alpha_N \underline{\underline{N}} + \Delta \alpha_M \underline{\underline{M}} \end{aligned} \quad (0.17)$$

On peut maintenant calculer $\underline{\underline{\nabla}}\Delta u$:

$$\underline{\underline{\nabla}}\Delta u = \sum_{a=1}^3 \Delta \hat{d}_a \otimes \underline{\underline{\nabla}} N_a - \left\{ \sum_{a=1}^3 \Delta \hat{d}_a (\nabla^0 N_a \cdot \underline{\underline{B}} \cdot \underline{\underline{U}}) - \underline{\underline{F}} \cdot \Delta \underline{\underline{U}} (\nabla^0 N^+ \cdot \underline{\underline{B}} \cdot \underline{\underline{U}}) + \underline{\underline{F}} \cdot \Delta \underline{\underline{U}} \right\} \otimes \underline{\underline{\nabla}} N^+ \quad (0.18)$$

En considérant d'abord les termes associés à $\Delta \hat{d}_a$ dans (0.18), on a :

$$\begin{aligned} \sum_{a=1}^3 \Delta \hat{d}_a \otimes \underline{\underline{\nabla}} N_a - \sum_{a=1}^3 \Delta \hat{d}_a (\nabla^0 N_a \cdot \underline{\underline{B}} \cdot \underline{\underline{U}}) \otimes \underline{\underline{\nabla}} N^+ \\ &= \sum_{a=1}^3 \Delta \hat{d}_a \otimes \underline{\underline{F}}^{-T} \cdot [\nabla^0 N_a - \nabla^0 N^+ (\underline{\underline{U}} \cdot \underline{\underline{B}}^T \cdot \nabla^0 N_a)] \\ &= \sum_{a=1}^3 \Delta \hat{d}_a \otimes \underline{\underline{F}}^{-T} \cdot [\nabla^0 N_a + \underline{\underline{F}}^T \cdot \underline{\underline{B}}^T \cdot \nabla^0 N_a] \\ &= \sum_{a=1}^3 \Delta \hat{d}_a \otimes \underline{\underline{F}}^{-T} \cdot [\underline{\underline{B}}^{-T} + \underline{\underline{F}}^T] \cdot \underline{\underline{B}}^T \cdot \nabla^0 N_a \\ &= \sum_{a=1}^3 \Delta \hat{d}_a \otimes \underline{\underline{F}}^{-T} \cdot \underbrace{\underline{\underline{B}}^T \cdot \nabla^0 N_a}_{\hat{\nabla} N_a} \end{aligned} \quad (0.19)$$

En considérant ensuite les termes associés à $(\Delta \alpha_N, \Delta \alpha_M)$ dans (0.18), on a :

$$\begin{aligned} \left\{ \underline{\underline{F}} \cdot \Delta \underline{\underline{U}} (\nabla^0 N^+ \cdot \underline{\underline{B}} \cdot \underline{\underline{U}}) - \underline{\underline{F}} \cdot \Delta \underline{\underline{U}} \right\} \otimes \underline{\underline{\nabla}} N^+ &= \underline{\underline{F}} \cdot \Delta \underline{\underline{U}} \otimes \underline{\underline{F}}^{-T} \cdot \nabla^0 N^+ (\underline{\underline{U}} \cdot \underline{\underline{B}}^T \cdot \nabla^0 N^+ - 1) \\ &= -\underline{\underline{F}} \cdot \Delta \underline{\underline{U}} \otimes \underline{\underline{F}}^{-T} \cdot (\underline{\underline{F}}^T + \underline{\underline{B}}^{-T}) \cdot \underline{\underline{B}}^T \cdot \nabla^0 N^+ \\ &= -\underline{\underline{F}} \cdot \Delta \underline{\underline{U}} \otimes \underline{\underline{F}}^{-T} \cdot \underbrace{\underline{\underline{B}}^T \cdot \nabla^0 N^+}_{\hat{\nabla} N^+} \end{aligned} \quad (0.20)$$

Finalement (0.18) devient :

$$\underline{\underline{\nabla}}\Delta u = \sum_{a=1}^3 \Delta \hat{d}_a \otimes \hat{\nabla} N_a - \underline{\underline{F}} \cdot \Delta \underline{\underline{U}} \otimes \hat{\nabla} N^+ \quad (0.21)$$

Pour $\hat{\nabla} N_a$ on a :

$$\begin{aligned}
\hat{\nabla} N_a &= \bar{\mathbf{F}}^{-T} \cdot \underline{\mathbf{B}}^T \cdot \nabla^0 N_a \\
&= \bar{\mathbf{F}}^{-T} \cdot \left(\underline{\mathbf{1}}_s^0 - \frac{1}{1 + \bar{\mathbf{U}} \cdot \nabla^0 N^+} \nabla^0 N^+ \otimes \bar{\mathbf{U}} \right) \cdot \nabla^0 N_a \\
&= \bar{\mathbf{a}}^\alpha \otimes \underline{\mathbf{A}}_\alpha \cdot \left(\underline{\mathbf{A}}^\beta \otimes \underline{\mathbf{A}}_\beta - \frac{1}{1 + \bar{\mathbf{U}} \cdot \nabla^0 N^+} N_{,\gamma}^+ \underline{\mathbf{A}}^\gamma \otimes \bar{\mathbf{U}} \right) \cdot N_{a,\delta} \underline{\mathbf{A}}^\delta \\
&= \left(\bar{\mathbf{a}}^\alpha \otimes \underline{\mathbf{A}}_\alpha - \frac{1}{1 + \bar{\mathbf{U}} \cdot \nabla^0 N^+} N_{,\alpha}^+ \bar{\mathbf{a}}^\alpha \otimes \bar{\mathbf{U}} \right) \cdot N_{a,\delta} \underline{\mathbf{A}}^\delta \\
&= \underbrace{\left(N_{a,\alpha} - \frac{\bar{\mathbf{U}} \cdot \nabla^0 N_a}{1 + \bar{\mathbf{U}} \cdot \nabla^0 N^+} N_{,\alpha}^+ \right)}_{N_{a,\alpha}^{\hat{\alpha}}} \bar{\mathbf{a}}^\alpha,
\end{aligned} \tag{0.22}$$

où $N_{a,\delta} = \partial N_a / \partial \zeta^\delta$. On obtient $\hat{\nabla} N^+$ en remplaçant N_a par N^+ dans (0.22) :

$$\begin{aligned}
\hat{\nabla} N^+ &= N_{,\alpha}^+ \left(1 - \frac{\bar{\mathbf{U}} \cdot \nabla^0 N^+}{1 + \bar{\mathbf{U}} \cdot \nabla^0 N^+} \right) \bar{\mathbf{a}}^\alpha \\
&= N_{,\alpha}^+ \underbrace{\frac{1}{1 + \bar{\mathbf{U}} \cdot \nabla^0 N^+}}_{N_{,\alpha}^{\hat{\alpha}}} \bar{\mathbf{a}}^\alpha
\end{aligned} \tag{0.23}$$

Soit $\underline{\underline{\nabla}}_{\bar{\mathbf{S}}} \Delta \underline{\mathbf{u}}$ la partie tangente de $\underline{\underline{\nabla}} \Delta \underline{\mathbf{u}}$ sur $\bar{\mathbf{S}}$, son expression est donnée par :

$$\underline{\underline{\nabla}}_{\bar{\mathbf{S}}} \Delta \underline{\mathbf{u}} = \left[\sum_{a=1}^3 \Delta \hat{d}_{a\alpha} N_{a,\beta}^{\hat{\alpha}} - (\Delta \alpha_N n_\alpha^\# + \Delta \alpha_M m_\alpha^\#) N_{,\beta}^+ \right] \bar{\mathbf{a}}^\alpha \otimes \bar{\mathbf{a}}^\beta, \tag{0.24}$$

où $(\Delta \hat{d}_{a\alpha})_\alpha$ sont les composantes de $\Delta \hat{d}_a$ dans la base $(\bar{\mathbf{a}}^\alpha)_\alpha$. On a alors pour la partie symétrique de $\underline{\underline{\nabla}}_{\bar{\mathbf{S}}} \Delta \underline{\mathbf{u}}$, donnée sous forme matricielle :

$$\begin{bmatrix} \bar{\varepsilon}_{\bar{\mathbf{S}}11} \\ \bar{\varepsilon}_{\bar{\mathbf{S}}22} \\ 2\bar{\varepsilon}_{\bar{\mathbf{S}}12} \end{bmatrix} = \sum_{a=1}^3 \underbrace{\begin{bmatrix} N_{a,\hat{1}} & 0 \\ 0 & N_{a,\hat{2}} \\ N_{a,\hat{2}} & N_{a,\hat{1}} \end{bmatrix}}_{B_a} \underbrace{\begin{bmatrix} \Delta \hat{d}_{a1} \\ \Delta \hat{d}_{a2} \end{bmatrix}}_{B^+} - \underbrace{\begin{bmatrix} N_{,\hat{1}}^+ & 0 \\ 0 & N_{,\hat{2}}^+ \\ N_{,\hat{2}}^+ & N_{,\hat{1}}^+ \end{bmatrix}}_{B^+} \underbrace{\begin{bmatrix} n_1^\# & m_1^\# \\ n_2^\# & m_2^\# \end{bmatrix}}_{\begin{bmatrix} n^\# & m^\# \\ n^\# & m^\# \end{bmatrix}} \underbrace{\begin{bmatrix} \Delta \alpha_N \\ \Delta \alpha_M \end{bmatrix}}_{\begin{bmatrix} \Delta \alpha_N \\ \Delta \alpha_M \end{bmatrix}} \tag{0.25}$$

On peut alors réécrire la dérivée directionnelle de h^e sous la forme :

$$\begin{aligned}
\mathcal{D}(h^e)[\Delta \underline{u}] &= - \begin{bmatrix} \delta \alpha_N & \delta \alpha_M \end{bmatrix} \begin{bmatrix} n^{\#1} & m^{\#1} \\ n^{\#2} & m^{\#2} \end{bmatrix}^T n^{b,ns,T} \left\{ \tilde{\tau} + H^T \cdot c^{an} \right\} \sum_{a=1}^3 B_a \begin{bmatrix} \Delta \hat{d}_{a1} \\ \Delta \hat{d}_{a2} \end{bmatrix} \\
&+ \begin{bmatrix} \delta \alpha_N & \delta \alpha_M \end{bmatrix} \left(\begin{bmatrix} n^{\#1} & m^{\#1} \\ n^{\#2} & m^{\#2} \end{bmatrix}^T n^{b,ns,T} \left\{ \tilde{\tau} + H^T \cdot c^{an} \right\} B^+ \begin{bmatrix} n_1^{\#} & m_1^{\#} \\ n_2^{\#} & m_2^{\#} \end{bmatrix} \right. \\
&+ \left. \begin{bmatrix} \overline{\overline{C}}_N & 0 \\ 0 & \overline{\overline{C}}_M \end{bmatrix} \right) \begin{bmatrix} \Delta \alpha_N \\ \Delta \alpha_M \end{bmatrix} \\
&= \delta \alpha^T K_{hd}^e \Delta \hat{d} + \delta \alpha^T K_{h\alpha}^e \Delta \alpha
\end{aligned} \tag{0.26}$$

avec :

$$\begin{aligned}
K_{hd}^e &= K_{hd}^{mat,e} + K_{hd}^{geo,e} \\
K_{h\alpha}^e &= K_{h\alpha}^{mat,e} + K_{h\alpha}^{geo,e} \\
K_{hd}^{mat,e} &= - \begin{bmatrix} n^{\#1} & m^{\#1} \\ n^{\#2} & m^{\#2} \end{bmatrix}^T n^{b,ns,T} H^T \cdot c^{an} B \\
K_{hd}^{geo,e} &= - \begin{bmatrix} n^{\#1} & m^{\#1} \\ n^{\#2} & m^{\#2} \end{bmatrix}^T n^{b,ns,T} \tilde{\tau} B \\
K_{h\alpha}^{mat,e} &= \begin{bmatrix} n^{\#1} & m^{\#1} \\ n^{\#2} & m^{\#2} \end{bmatrix}^T n^{b,ns,T} H^T \cdot c^{an} B^+ \begin{bmatrix} n_1^{\#} & m_1^{\#} \\ n_2^{\#} & m_2^{\#} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \overline{\overline{C}}_N & 0 \\ 0 & \overline{\overline{C}}_M \end{bmatrix} \\
K_{h\alpha}^{geo,e} &= \begin{bmatrix} n^{\#1} & m^{\#1} \\ n^{\#2} & m^{\#2} \end{bmatrix}^T n^{b,ns,T} \tilde{\tau} B^+ \begin{bmatrix} n_1^{\#} & m_1^{\#} \\ n_2^{\#} & m_2^{\#} \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{0.27}$$

où $\delta \alpha^T = \begin{bmatrix} \delta \alpha_N & \delta \alpha_M \end{bmatrix}$, $\Delta \alpha^T = \begin{bmatrix} \Delta \alpha_N & \Delta \alpha_M \end{bmatrix}$, $\Delta \hat{d}^T = \begin{bmatrix} \Delta \hat{d}_{11} & \Delta \hat{d}_{12} & \Delta \hat{d}_{21} & \dots \end{bmatrix}$, et $B = \begin{bmatrix} B_1 & B_2 & B_3 \end{bmatrix}$.

Annexe B

Calcul des modules tangents cohérents des lois locales continue et discrète

L'objectif de cette Annexe est de définir et de calculer les modules tangents $\underline{\underline{c}}^{an}$, $\overline{\overline{c}}_N^{an}$ et $\overline{\overline{c}}_M^{an}$, qui ont été introduits dans les équations (0.8) et (0.9) de l'Annexe A.

Dans la suite, sauf mention contraire, les équations et les sections auxquelles nous faisons référence correspondent au chapitre 4.

0.1 Module continu

Dans cette partie nous allons définir le module tangent $\underline{\underline{c}}^{an}$ qui a été introduit dans l'équation (0.8) de l'Annexe A, et nous allons détailler son calcul.

De manière générale, le module tangent $\underline{\underline{c}}^{an}$ est associé à la linéarisation de l'opérateur $\underline{\underline{t}}_{n+1}()$ introduit dans l'équation (5.1), correspondant à la forme incrémentale de la loi de comportement du milieu continu, que nous avons développé dans la section 5.4.1. Comme $\underline{\underline{t}}_{n+1}()$ tient compte de l'approximation de la loi d'évolution de l'endommagement, on qualifie alors $\underline{\underline{c}}^{an}$ de module tangent *cohérent*, au sens où il est cohérent avec la forme discrétisée des équations que l'on cherche à résoudre. On peut aussi définir un module tangent directement à partir du modèle de comportement du matériau lorsqu'il n'est pas approximé en temps, mais ce module n'est pas nécessairement égal au module tangent cohérent et les performances du schéma numérique de résolution peuvent alors être réduites (Simo & Taylor, 1985).

Définissons maintenant précisément $\underline{\underline{c}}^{an}$. Pour cela, replaçons-nous dans le contexte des calculs de l'Annexe A : localement, pour une position de la configuration $\overline{\overline{S}}$ de la membrane donnée par le champ de déplacement fictif $\underline{u}_{n+1}^{(i)}$, on calcule la dérivée directionnelle de h^e associée à une variation de $\underline{u}_{n+1}^{(i)}$ dans la direction $\Delta \underline{u}_{n+1}^{(i)}$. Le module

$\underline{\underline{C}}_{n+1}^{an}$ correspond alors à la dérivée directionnelle objective de $\underline{\underline{\tau}}_{n+1}(\cdot)$ définie par :

$$\underline{\underline{C}}_{n+1}^{an,(i)} : \underline{\underline{\bar{e}}}(\Delta \underline{\underline{u}}_{n+1}^{(i)}) = \mathcal{D}(\underline{\underline{\tau}}_{n+1}^{(i)})[\Delta \underline{\underline{u}}_{n+1}^{(i)}] - \mathcal{D}(\underline{\underline{F}}_{n+1}^{(i)})[\Delta \underline{\underline{u}}_{n+1}^{(i)}] \cdot \underline{\underline{\pi}}_{n+1}^{(i)} \cdot \underline{\underline{F}}_{n+1}^{T,(i)} - \underline{\underline{F}}_{n+1}^{(i)} \cdot \underline{\underline{\pi}}_{n+1}^{(i)} \cdot \mathcal{D}(\underline{\underline{F}}_{n+1}^{T,(i)})[\Delta \underline{\underline{u}}_{n+1}^{(i)}]. \quad (0.1)$$

où :

$$\underline{\underline{\bar{e}}}(\Delta \underline{\underline{u}}) = \frac{1}{2}(\underline{\underline{\nabla}} \Delta \underline{\underline{u}}^T + \underline{\underline{\nabla}} \Delta \underline{\underline{u}}), \quad (0.2)$$

et $\underline{\underline{\nabla}}(\cdot) = \text{reg}(\underline{\underline{\nabla}}^0(\cdot)) \cdot \underline{\underline{F}}^{-1}$, où $\text{reg}(X)$ désigne la partie régulière de X . Par ailleurs, $\underline{\underline{\pi}}$ désigne le second tenseur des tensions de Piola-Kirchhoff. On a alors :

$$\underline{\underline{C}}_{n+1}^{an,(i)} : \underline{\underline{\bar{e}}}(\Delta \underline{\underline{u}}_{n+1}^{(i)}) = \underline{\underline{F}}_{n+1}^{(i)} \cdot \mathcal{D}(\underline{\underline{\pi}}_{n+1}^{(i)})[\Delta \underline{\underline{u}}_{n+1}^{(i)}] \cdot \underline{\underline{F}}_{n+1}^{T,(i)}. \quad (0.3)$$

On construit donc le module tangent $\underline{\underline{C}}_{n+1}^{an}$ à partir du module tangent $\underline{\underline{C}}_0^{an}$ associé à la configuration de référence et défini par :

$$\mathcal{D}(\underline{\underline{\pi}}_{n+1}^{(i)})[\Delta \underline{\underline{u}}_{n+1}^{(i)}] = \underline{\underline{C}}_{0,n+1}^{an,(i)} : \mathcal{D}(\underline{\underline{\bar{e}}}_{n+1}^{(i)})[\Delta \underline{\underline{u}}_{n+1}^{(i)}]. \quad (0.4)$$

À partir de l'équation d'état (2.18)₁, on a :

$$\underline{\underline{\pi}}_{n+1}^{(i)} = (1 - d_{n+1}^{(i)}) \frac{\partial \phi_{n+1}^{e,(i)}}{\partial \underline{\underline{\bar{e}}}_{n+1}^{(i)}}. \quad (0.5)$$

La dérivée directionnelle de $\underline{\underline{\pi}}_{n+1}^{(i)}$ est alors donnée par :

$$\mathcal{D}(\underline{\underline{\pi}}_{n+1}^{(i)})[\Delta \underline{\underline{u}}_{n+1}^{(i)}] = (1 - d_{n+1}^{(i)}) \frac{\partial^2 \phi_{n+1}^{e,(i)}}{\partial (\underline{\underline{\bar{e}}}_{n+1}^{(i)})^2} : \mathcal{D}(\underline{\underline{\bar{e}}}_{n+1}^{(i)})[\Delta \underline{\underline{u}}_{n+1}^{(i)}] - \mathcal{D}(d_{n+1}^{(i)})[\Delta \underline{\underline{u}}_{n+1}^{(i)}] \frac{\partial \phi_{n+1}^{e,(i)}}{\partial \underline{\underline{\bar{e}}}_{n+1}^{(i)}}. \quad (0.6)$$

Or, d'après la forme incrémentale de la loi d'évolution de l'endommagement donnée par l'éq. (5.10), on peut écrire :

$$\mathcal{D}(d_{n+1}^{(i)})[\Delta \underline{\underline{u}}_{n+1}^{(i)}] = \frac{\partial d_{n+1}^{(i)}}{\partial \underline{\underline{\bar{e}}}_{n+1}^{(i)}} : \mathcal{D}(\underline{\underline{\bar{e}}}_{n+1}^{(i)})[\Delta \underline{\underline{u}}_{n+1}^{(i)}]. \quad (0.7)$$

Ainsi, on obtient l'expression de $\underline{\underline{C}}_0^{an}$:

$$\underline{\underline{C}}_{0,n+1}^{an,(i)} = (1 - d_{n+1}^{(i)}) \frac{\partial^2 \phi_{n+1}^{e,(i)}}{\partial (\underline{\underline{e}}_{n+1}^{(i)})^2} - \frac{\partial \phi_{n+1}^{e,(i)}}{\partial \underline{\underline{e}}_{n+1}^{(i)}} \otimes \frac{\partial d_{n+1}^{(i)}}{\partial \underline{\underline{e}}_{n+1}^{(i)}} \quad (0.8)$$

On pose :

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 \phi_{n+1}^{e,(i)}}{\partial (\underline{\underline{e}}_{n+1}^{(i)})^2} = C_{0,n+1}^{e,\alpha\beta\gamma\delta,(i)} \underline{A}_\alpha \otimes \underline{A}_\beta \otimes \underline{A}_\gamma \otimes \underline{A}_\delta \\ \frac{\partial \phi_{n+1}^{e,(i)}}{\partial \underline{\underline{e}}_{n+1}^{(i)}} \otimes \frac{\partial d_{n+1}^{(i)}}{\partial \underline{\underline{e}}_{n+1}^{(i)}} = C_{0,n+1}^{d,\alpha\beta\gamma\delta,(i)} \underline{A}_\alpha \otimes \underline{A}_\beta \otimes \underline{A}_\gamma \otimes \underline{A}_\delta. \end{cases} \quad (0.9)$$

On considère que le potentiel ϕ^e est une fonction des deux invariants :

$$\begin{cases} I_1 = 2\text{tr}(\underline{\underline{e}}) \\ I_2 = \bar{J}_s^2 - 1 \end{cases} \quad (0.10)$$

où \bar{J}_s désigne le jacobien associé au gradient de transformation $\underline{\underline{F}}$. Les composantes $C_{0,n+1}^{e,\alpha\beta\gamma\delta,(i)}$ sont alors données par :

$$\begin{aligned} C_{0,n+1}^{e,\alpha\beta\gamma\delta,(i)} &= \frac{\partial^2 \phi_{n+1}^{e,(i)}}{\partial \bar{e}_{\alpha\beta,n+1}^{(i)} \partial \bar{e}_{\gamma\delta,n+1}^{(i)}} \\ &= 2 \frac{\partial}{\partial \bar{e}_{\gamma\delta,n+1}^{(i)}} \left(\frac{\partial \phi_{n+1}^{e,(i)}}{\partial I_{1,n+1}^{(i)}} A^{\alpha\beta} + \frac{\partial \phi_{n+1}^{e,(i)}}{\partial I_{2,n+1}^{(i)}} (\bar{J}_{s,n+1}^{(i)})^2 \bar{a}_{n+1}^{\alpha\beta,(i)} \right) \\ &= 4 \left(\frac{\partial^2 \phi_{n+1}^{e,(i)}}{\partial (I_{1,n+1}^{(i)})^2} A^{\alpha\beta} A^{\gamma\delta} + (\bar{J}_{s,n+1}^{(i)})^2 \frac{\partial^2 \phi_{n+1}^{e,(i)}}{\partial I_{1,n+1}^{(i)} \partial I_{2,n+1}^{(i)}} A^{\alpha\beta} \bar{a}_{n+1}^{\gamma\delta,(i)} \right) \\ &\quad + 4 (\bar{J}_{s,n+1}^{(i)})^2 \left(\frac{\partial^2 \phi_{n+1}^{e,(i)}}{\partial I_{2,n+1}^{(i)} \partial I_{1,n+1}^{(i)}} \bar{a}_{n+1}^{\alpha\beta,(i)} A^{\gamma\delta} + (\bar{J}_{s,n+1}^{(i)})^2 \frac{\partial^2 \phi_{n+1}^{e,(i)}}{\partial (I_{2,n+1}^{(i)})^2} \bar{a}_{n+1}^{\alpha\beta,(i)} \bar{a}_{n+1}^{\gamma\delta,(i)} \right) \\ &\quad + 4 (\bar{J}_{s,n+1}^{(i)})^2 \frac{\partial \phi_{n+1}^{e,(i)}}{\partial I_{2,n+1}^{(i)}} \bar{a}_{n+1}^{\alpha\beta,(i)} \bar{a}_{n+1}^{\gamma\delta,(i)} - 2 (\bar{J}_{s,n+1}^{(i)})^2 \frac{\partial \phi_{n+1}^{e,(i)}}{\partial I_{2,n+1}^{(i)}} \left(\bar{a}_{n+1}^{\alpha\gamma,(i)} \bar{a}_{n+1}^{\delta\beta,(i)} + \bar{a}_{n+1}^{\alpha\delta,(i)} \bar{a}_{n+1}^{\gamma\beta,(i)} \right). \end{aligned} \quad (0.11)$$

Les composantes $C_{0,n+1}^{d,\alpha\beta\gamma\delta,(i)}$ sont elles données par :

$$C_{0,n+1}^{d,\alpha\beta\gamma\delta,(i)} = \frac{\partial \phi_{n+1}^{e,(i)}}{\partial \bar{e}_{\alpha\beta,n+1}^{(i)}} \frac{\partial d_{n+1}^{(i)}}{\partial \bar{e}_{\gamma\delta,n+1}^{(i)}}. \quad (0.12)$$

À partir de l'expression de la loi d'évolution de l'endommagement (5.10), on calcule séparément :

$$\frac{\partial d_{n+1}^{(i)}}{\partial \bar{e}_{\gamma\delta,n+1}^{(i)}} = \begin{cases} \frac{1}{(\kappa')_{n+1}^{(i)}} \frac{\partial \phi_{n+1}^{e,(i)}}{\partial \bar{e}_{\alpha\beta,n+1}^{(i)}} & \text{si } \kappa^{-1}(Y_{n+1}^{\max,(i)}) > 0 \text{ et } Y(\bar{\underline{e}}_{n+1}^{(i)}) > Y_n^{\max} \\ 0 & \text{si } \kappa^{-1}(Y_{n+1}^{\max,(i)}) < 0 \text{ ou } Y(\bar{\underline{e}}_{n+1}^{(i)}) < Y_n^{\max}, \end{cases} \quad (0.13)$$

où κ' désigne la dérivée de la fonction κ . Les deux valeurs prises par la dérivée de $d_{n+1}^{(i)}$ ne correspondent pas à des cas complémentaires car $d_{n+1}^{(i)}$ n'est pas dérivable en $Y_{n+1}^{\max,(i)} = Y_D$, ni en $Y(\bar{\underline{e}}_{n+1}^{(i)}) = Y_n^{\max}$. Dans les cas où on est en ces points, on choisit de prendre la valeur non nulle pour la dérivée de $d_{n+1}^{(i)}$. En posant :

$$W_{n+1}^{(i)} = \begin{cases} 1 & \text{si } \kappa^{-1}(Y_{n+1}^{\max,(i)}) \geq 0 \text{ et } Y(\bar{\underline{e}}_{n+1}^{(i)}) \geq Y_n^{\max} \\ 0 & \text{sinon,} \end{cases} \quad (0.14)$$

on a alors :

$$\begin{aligned} C_{0,n+1}^{d,\alpha\beta\gamma\delta,(i)} &= \frac{W_{n+1}^{(i)}}{(\kappa')_{n+1}^{(i)}} \frac{\partial \phi_{n+1}^{e,(i)}}{\partial \bar{e}_{\alpha\beta,n+1}^{(i)}} \frac{\partial \phi_{n+1}^{e,(i)}}{\partial \bar{e}_{\gamma\delta,n+1}^{(i)}} \\ &= 4 \frac{W_{n+1}^{(i)}}{(\kappa')_{n+1}^{(i)}} \left(\frac{\partial \phi_{n+1}^{e,(i)}}{\partial I_{1,n+1}^{(i)}} A^{\alpha\beta} + \frac{\partial \phi_{n+1}^{e,(i)}}{\partial I_{2,n+1}^{(i)}} (\bar{J}_{s,n+1}^{(i)})^2 \bar{a}_{n+1}^{\alpha\beta,(i)} \right) \left(\frac{\partial \phi_{n+1}^{e,(i)}}{\partial I_{1,n+1}^{(i)}} A^{\gamma\delta} + \frac{\partial \phi_{n+1}^{e,(i)}}{\partial I_{2,n+1}^{(i)}} (\bar{J}_{s,n+1}^{(i)})^2 \bar{a}_{n+1}^{\gamma\delta,(i)} \right). \end{aligned} \quad (0.15)$$

À partir des relations (0.3) et (0.4) liant les modules tangents, on obtient finalement :

$$\underline{\underline{C}}_0^{an} = \left((1-d) C_0^{e,\alpha\beta\gamma\delta} - C_0^{d,\alpha\beta\gamma\delta} \right) \bar{a}_\alpha \otimes \bar{a}_\beta \otimes \bar{a}_\gamma \otimes \bar{a}_\delta. \quad (0.16)$$

Ainsi les modules tangents $\underline{\underline{C}}_0^{an}$ et $\underline{\underline{C}}_M^{an}$ ont les mêmes composantes sur les bases covariantes $(\underline{A}_\alpha)_\alpha$ et $(\bar{a}_\alpha)_\alpha$, respectivement.

0.2 Modules discrets

Dans cette partie nous allons définir les modules tangents $\underline{\underline{C}}_N^{an}$ et $\underline{\underline{C}}_M^{an}$ qui sont introduits dans l'équation (0.9) de l'Annexe A, et nous allons détailler leur calcul.

$\underline{\underline{C}}_N^{an}$ et $\underline{\underline{C}}_M^{an}$ sont les modules tangents associés aux deux composantes de l'opérateur $\mathbf{t}_{n+1}()$ introduit dans l'équation (5.1)₂ à travers \mathbf{t}_{n+1}^* (\mathbf{t}_{n+1}^* et \mathbf{t}_{n+1} sont liés par l'éq. (5.3)), qui correspond à la forme incrémentale de la loi de comportement d'une discontinuité que nous avons développé dans la section 5.4.2.

De manière plus générale, nous allons définir le module tangent cohérent associé à $\underline{T}_{\Gamma_0, n+1}^{(i)}$, dont $\overline{\underline{C}}_N^{an}$ et $\overline{\underline{C}}_M^{an}$ en sont des composantes. Pour cela, comme nous l'avons fait dans le cas de la définition du module tangent continu, replaçons-nous dans le contexte des calculs de l'Annexe A, lorsqu'on cherche à déterminer la dérivée directionnelle de h^e associée à une variation de $\underline{u}_{n+1}^{(i)}$ dans la direction $\Delta \underline{u}_{n+1}^{(i)}$. Dans la configuration matérielle, on peut écrire la loi de comportement sous la forme incrémentale $\underline{T}_{\Gamma_0, n+1}^{(i)} = \underline{T}_{\Gamma_0, n+1}^{(i)}(\overline{\underline{U}}_{n+1}, E_n)$. On définit alors le module tangent cohérent $\overline{\underline{C}}^{an}$ associé à $\underline{T}_{\Gamma_0, n+1}^{(i)}$ par :

$$\mathcal{D}(\underline{T}_{\Gamma_0, n+1}^{(i)})[\Delta \underline{u}_{n+1}^{(i)}] = \overline{\underline{C}}_{n+1}^{an, (i)} \cdot \mathcal{D}(\overline{\underline{U}}_{n+1}^{(i)})[\Delta \underline{u}_{n+1}^{(i)}]. \quad (0.17)$$

On a alors :

$$\overline{\underline{C}}_{n+1}^{an, (i)} = \frac{\partial \underline{T}_{\Gamma_0, n+1}^{(i)}}{\partial \overline{\underline{U}}_{n+1}^{(i)}} = \underbrace{\frac{\partial t_{N, n+1}^{(i)}}{\partial \alpha_{N, n+1}^{(i)}}}_{\overline{\underline{C}}_{N, n+1}^{an, (i)}} \underline{N} \otimes \underline{N} + \underbrace{\frac{\partial t_{M, n+1}^{(i)}}{\partial \alpha_{M, n+1}^{(i)}}}_{\overline{\underline{C}}_{M, n+1}^{an, (i)}} \underline{M} \otimes \underline{M} \quad (0.18)$$

On détermine d'abord le module tangent $\overline{\underline{C}}_{N, n+1}^{an, (i)}$, associé à la direction \underline{N} , d'après les cas établis dans la section 5.4.2.

Cas N-1 : $\alpha_{N, n+1}^{(i)} < 0$

le module tangent prend la valeur correspondant à une évolution élastique :

$$\overline{\underline{C}}_{N, n+1}^{an, (i)} = \begin{cases} 10^{12} & \text{si } \overline{\underline{\zeta}}_{N, n+1}^{(i)} = 0 \\ \frac{t_c}{\overline{\underline{\zeta}}_{N, n+1}^{(i)}} \exp\left(-\frac{t_c}{G_c} \overline{\underline{\zeta}}_{N, n+1}^{(i)}\right) & \text{si } \overline{\underline{\zeta}}_{N, n+1}^{(i)} \neq 0. \end{cases} \quad (0.19)$$

Les valeurs prises par le module tangent sont justifiées dans les cas N-2 et N-3.

Cas N-2 : $\alpha_{N, n+1}^{(i)} = 0$ et $Q_{N, n+1}^{(i)} = 0$

Si $f_{N, n+1}^{(i)} < 0$, l'interface est rigide (elle n'est pas endommagée) et on a $\overline{\underline{C}}_{N, n+1}^{an, (i)} = +\infty$. Si $f_{N, n+1}^{(i)} = 0$, on est sur le point de bifurcation du passage de la branche rigide à la branche adoucissante de la loi cohésive. Le module $\overline{\underline{C}}_{N, n+1}^{an, (i)}$ n'est donc pas défini, on choisit de prendre la valeur du module tangent associé à la branche adoucissante. On choisit donc finalement :

$$\overline{\underline{C}}_{N, n+1}^{an, (i)} = \begin{cases} 10^{12} & \text{si } f_{N, n+1}^{(i)} < 0 \\ -\frac{t_c^2}{G_c} & \text{si } f_{N, n+1}^{(i)} = 0, \end{cases} \quad (0.20)$$

où la valeur prise par $\overline{\overline{C}}_{N,n+1}^{an,(i)}$ dans le cas où $f_{N,n+1}^{(i)} = 0$ est justifiée dans le *Cas N-3*.

Cas N-3 : $\alpha_{N,n+1}^{(i)} \geq 0$ et $Q_{N,n+1}^{(i)} \neq 0$

D'après l'équation d'état (5.16), on a :

$$\overline{\overline{C}}_{N,n+1}^{an,(i)} = \frac{1}{Q_{N,n+1}^{(i)}} \left(1 - \frac{\alpha_{N,n+1}^{(i)}}{Q_{N,n+1}^{(i)}} \frac{\partial Q_{N,n+1}^{(i)}}{\partial \alpha_{N,n+1}^{(i)}} \right). \quad (0.21)$$

Or, d'après la loi d'évolution (5.12)₂, on a :

$$\frac{\partial Q_{N,n+1}^{(i)}}{\partial \alpha_{N,n+1}^{(i)}} = \frac{\partial \overline{\overline{\zeta}}_{N,n+1}^{(i)}}{\partial \alpha_{N,n+1}^{(i)}} \frac{1}{t_c} \exp \left(\frac{t_c \overline{\overline{\zeta}}_{N,n+1}^{(i)}}{G_c} \right) \left(1 + \frac{t_c \overline{\overline{\zeta}}_{N,n+1}^{(i)}}{G_c} \right), \quad (0.22)$$

et d'après la loi d'évolution (5.12)₁, on a :

$$\overline{\overline{\zeta}}_{N,n+1}^{(i)} = \begin{cases} \overline{\overline{\zeta}}_{N,n} & \text{si } \alpha_{N,n+1}^{(i)} \leq \overline{\overline{\zeta}}_{N,n} \text{ (incrément élastique)} \\ \alpha_{N,n+1}^{(i)} & \text{si } \alpha_{N,n+1}^{(i)} \geq \overline{\overline{\zeta}}_{N,n} \text{ (incrément dissipatif)}. \end{cases} \quad (0.23)$$

Le module tangent $\overline{\overline{C}}_{N,n+1}^{an,(i)}$ n'est pas défini en $\alpha_{N,n+1}^{(i)} = \overline{\overline{\zeta}}_{N,n}$ car on se situe sur l'intersection entre la branche élastique et la branche adoucissante, mais on choisit dans ce cas de prendre la valeur du module tangent associé à la branche adoucissante (incrément dissipatif). On a donc finalement :

$$\overline{\overline{C}}_{N,n+1}^{an,(i)} = \begin{cases} \frac{t_c}{\overline{\overline{\zeta}}_{N,n+1}^{(i)}} \exp \left(-\frac{t_c \overline{\overline{\zeta}}_{N,n+1}^{(i)}}{G_c} \right) & \text{si } \alpha_{N,n+1}^{(i)} < \overline{\overline{\zeta}}_{N,n} \text{ (incrément élastique)} \\ -\frac{t_c^2}{G_c} \exp \left(-\frac{t_c \overline{\overline{\zeta}}_{N,n+1}^{(i)}}{G_c} \right) & \text{si } \alpha_{N,n+1}^{(i)} \geq \overline{\overline{\zeta}}_{N,n} \text{ (incrément dissipatif)}. \end{cases} \quad (0.24)$$

Remarque :

┌ dans le cas où $\alpha_{N,n+1}^{(i)} = \overline{\overline{\zeta}}_{N,n} = 0$, on retrouve bien la valeur prise par
 $\overline{\overline{C}}_{N,n+1}^{an,(i)}$ dans le *Cas N-2* lorsque $f_{N,n+1}^{(i)} = 0$.

On détermine maintenant le module tangent $\overline{\overline{C}}_{M,n+1}^{an,(i)}$, associé à la direction \underline{M} , d'après les cas établis dans la section 5.4.2.

Cas M-1 : $\alpha_{M,n+1}^{(i)} = 0$ et $Q_{M,n+1}^{(i)} = 0$

De manière similaire au *Cas N-2*, on a :

$$\bar{\bar{C}}_{M,n+1}^{an,(i)} = \begin{cases} 10^{12} & \text{si } f_{M,n+1}^{(i)} < 0 \\ -\frac{t_c^2}{G_c} & \text{si } f_{M,n+1}^{(i)} = 0, \end{cases} \quad (0.25)$$

Cas M-2 : $Q_{M,n+1}^{(i)} \neq 0$

De manière similaire au *Cas N-3*, on a :

$$\bar{\bar{C}}_{M,n+1}^{an,(i)} = \begin{cases} \frac{t_c}{\bar{\bar{\zeta}}_{M,n+1}^{(i)}} \exp\left(-\frac{t_c}{G_c} \bar{\bar{\zeta}}_{M,n+1}^{(i)}\right) & \text{si } |\alpha_{M,n+1}^{(i)}| < \bar{\bar{\zeta}}_{M,n} \text{ (incrément élastique)} \\ -\frac{t_c^2}{G_c} \exp\left(-\frac{t_c}{G_c} \bar{\bar{\zeta}}_{M,n+1}^{(i)}\right) & \text{si } |\alpha_{M,n+1}^{(i)}| \geq \bar{\bar{\zeta}}_{M,n} \text{ (incrément dissipatif)}. \end{cases} \quad (0.26)$$

Annexe C

Algorithme implémenté dans le code FORTRAN pour résoudre le modèle de la membrane avec des discontinuités fortes

Cette Annexe présente la structure de l'algorithme implémenté dans le code FORTRAN pour résoudre le problème de la membrane dans le cadre de la modélisation de la rupture d'un microcapsule en écoulement avec un modèle de discontinuités fortes.

```

call [q, α, d, Q̄, ξ̄] = Solve_solid(d̂, α, d, Q̄, ξ̄)
call [Fint, M, α, d, Q̄, ξ̄] = Assembly(d̂, α, d, Q̄, ξ̄)
for e = 1 to Ne do // Loop over elements
    call [ā.., ā••, ā] = Local_metric_curv(d̂, α)
    Compute tangent basis â = â(d̂) ;
    Compute tangent basis ā = ā(â, α) from eq. (3.14) ;
    call [τ••, d, can] = Return_map_bulk(A••, ā.., ā••, d)
    Store dn = d // Store d at time step n
    Compute Y = φe(A••, ā.., ā••) from eq. (2.18)2 ;
    Compute d = max(d, [κ-1(Y)]+) according to eq. (5.10) ;
    Compute τ•• = τ••(A••, ā.., ā••, d) from eq. (5.11) ;
    Compute can = can(A••, ā.., ā••, d, dn) from eq. (0.16) of Appendix B
    if loc = 1 or d ≥ dc then // Localized element
        if loc = 0 then // Onset localization
            loc = 1 ;
            call [N•, M•, tc] = Disc_initialize(τ••)
            tc = maxeigenval(τ••) ;
            n = maxeigenvec(τ••) ;
            m = mineigenvec(τ••) ;
            Compute N• and M• from eq. (2.41) ;
            call [t, α, Q̄, ξ̄, Can] = Return_map_disc(α, Q̄, ξ̄)
            Store ξ̄n = ξ̄ ;
            Compute ξ̄ = ξ̄(ξ̄, α) from eq. (5.12)1 ;
            Compute Q̄ = Q̄(ξ̄, tc, Gc) from eq. (5.12)2 ;
            // Direction N
            if αN < 0 then
                αN = 0 ;
                tN = n•,T n•,T τ•• -  $\frac{\gamma}{\Delta t} \Delta \alpha_N$  according to eq. (5.13) ;
                Compute CanN = CanN(ξ̄N, tc, Gc) from eq. (0.19) of Appendix B
        (continued in Algorithm 5) ;

```

Algorithm 4: Structure de l’algorithme implémenté sur FORTRAN pour résoudre le problème de la membrane avec des discontinuités fortes, sur un pas de temps (début). Les équations dont il est fait référence correspondent au chapitre 4, sauf celles données sous la forme 0.X.

```

call [q, α, d, Q̄, ξ̄] = Solve_solid(d̂, α, d, Q̄, ξ̄)
call [Fint, M, α, d, Q̄, ξ̄] = Assembly(d̂, α, d, Q̄, ξ̄)
  for e = 1 to Ne do // Loop over elements
    (...);
    if loc = 1 or d ≥ dc then // Localized element
      (...);
      call [t, α, Q̄, ξ̄, C̄an] = Return_map_disc(α, Q̄, ξ̄)
      (...);
      // Direction N
      if αN < 0 then
        | (...);
        (continued from Algorithm 4);
      else if αN = 0 et QN = 0 then
        | tN = n•#,T n•b,T τ•• -  $\frac{\gamma}{\Delta t} \Delta \alpha_N$  according to eq. (5.14);
        | if fN > 0 then
        | | tN = tc according to eq. (5.15);
        | Compute C̄Nan = C̄Nan(fN, tc, Gc) from eq. (0.20) of Appendix B
      else
        | Compute tN = tN(αN, Q̄N) from eq. (5.16);
        | Compute C̄Nan = C̄Nan(αN, ξ̄N, ξ̄N,n, tc, Gc) from eq. (0.24) of
        | Appendix B
      // Direction M
      if αM = 0 et Q̄M = 0 then
        | tM = m•#,T n•b,T τ•• -  $\frac{\gamma}{\Delta t} \Delta \alpha_M$  according to eq. (5.17);
        | if fM > 0 then
        | | Compute tM = tM(tM, tc) from eq. (5.18);
        | Compute C̄Man = C̄Man(fM, tc, Gc) from eq. (0.25) of Appendix B
      else
        | Compute tM = tM(αM, Q̄M) from eq. (5.19);
        | Compute C̄Man = C̄Man(αM, ξ̄M, ξ̄M,n, tc, Gc) from eq. (0.26) of
        | Appendix B
      (continued in Algorithm 6);

```

Algorithm 5: Structure de l'algorithme implémenté sur FORTRAN pour résoudre le problème de la membrane avec des discontinuités fortes, sur un pas de temps (suite). Les équations dont il est fait référence correspondent au chapitre 4, sauf celles données sous la forme 0.X.

```

call [q, α, d, Q̄, ξ̄] = Solve_solid(d̂, α, d, Q̄, ξ̄)
call [Fint, M, α, d, Q̄, ξ̄] = Assembly(d̂, α, d, Q̄, ξ̄)
  for e = 1 to Ne do // loop over elements
    (...);
    if loc = 1 or d ≥ dc then // localized element
      (continued from Algorithm 5);
      Compute he = he(τ••, t, n#, nb) from eq. (3.17)2;
      Compute h*e = he +  $\frac{\gamma}{\Delta t} \Delta \alpha$  from eq. (4.51);
      Compute Khαe = Khαe(τ••, n#, n#, nb,ns, α, can, C̄an, ā••) from eq. (5.9);
      Compute Khα*e = Khαe +  $\frac{\gamma}{\Delta t} \mathbf{1}$  from eq. (5.9)1;
      while |h*e| > tol do
        α = α - (Khα*e)-1 h*e;
        call [ā••, ā••, ā] = Local_metric_curv(d̂, α)
        call [τ••, d, can] = Return_map_bulk(A••, ā••, ā••, d)
        call [t, α, Q̄, ξ̄, C̄an] = Return_map_disc(α, Q̄, ξ̄)
        Compute he = he(τ••, t, n#, nb) from eq. (3.17)2;
        Compute h*e = he +  $\frac{\gamma}{\Delta t} \Delta \alpha$  from eq. (4.51);
        Compute Khαe = Khαe(τ••, n#, n#, nb,ns, α, can, C̄an, ā••) from eq.
          (5.9);
        Compute Khα*e = Khαe +  $\frac{\gamma}{\Delta t} \mathbf{1}$  from eq. (5.9)1;
      // Elementary matrices for global equilibrium
      Fint,e = ∫S0e BT τ•• dS0;
      Me = ∫Se NT N dS;
      Solve Fint - Mq = 0 (eq. (3.17)1) to find q;
  
```

Algorithm 6: Structure de l'algorithme implémenté sur FORTRAN pour résoudre le problème de la membrane avec des discontinuités fortes, sur un pas de temps (fin). Les équations dont il est fait référence correspondent au chapitre 4, sauf celles données sous la forme 0.X.

Annexe D

Résultats complémentaires sur la rupture d'une membrane en traction

Cette Annexe contient la Figure qui est commentée dans la partie 6.3 du chapitre 4.

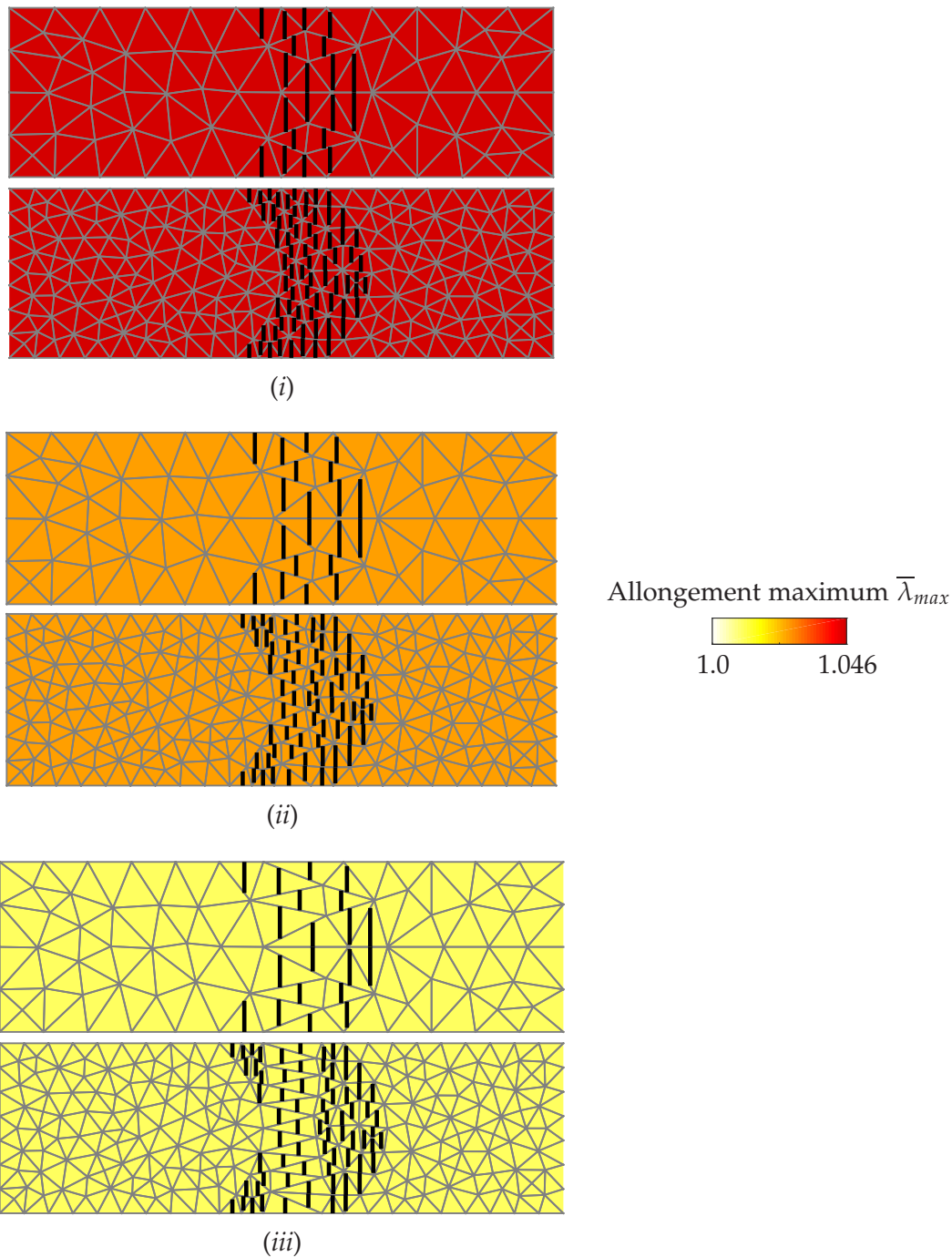


Figure 0.1 – Cartographie de l’allongement principal maximum $\bar{\lambda}_{max}$ (défini dans l’équation (6.2) du chapitre 4) : à l’instant où la localisation apparaît dans la membrane (i), à un instant correspondant à un point sur les courbes de la Figure 6.4 du chapitre 4 entre les points B et C (ii), et (iii) pour un allongement de la membrane de 7% ($U(t)/L = 0.07$). Les maillages correspondent aux configurations déformées \hat{S} (sans agrandissement) des maillages de la Figure 6.3 du chapitre 4, le maillage (a) étant celui représenté sur le dessus. Les traits forts représentent les discontinuités dans les éléments localisés. Les résultats sont obtenus pour $Y_D/G_s = 10^{-3}$, $Y_C/G_s = 10^{-2}$, $G_c/(G_s L) = 5 \times 10^{-4}$, et $(\gamma L)/(\Delta t G_s) = 100$. Pour la valeur de d_c , voir la Figure 6.3 du chapitre 4.

Annexe E

Résultats complémentaires sur la rupture d'une
microcapsule en écoulement hyperbolique plan pour

$$G_c = 0.05$$

Cette Annexe contient les Figures commentées dans la partie 6.4.2 du chapitre 4.

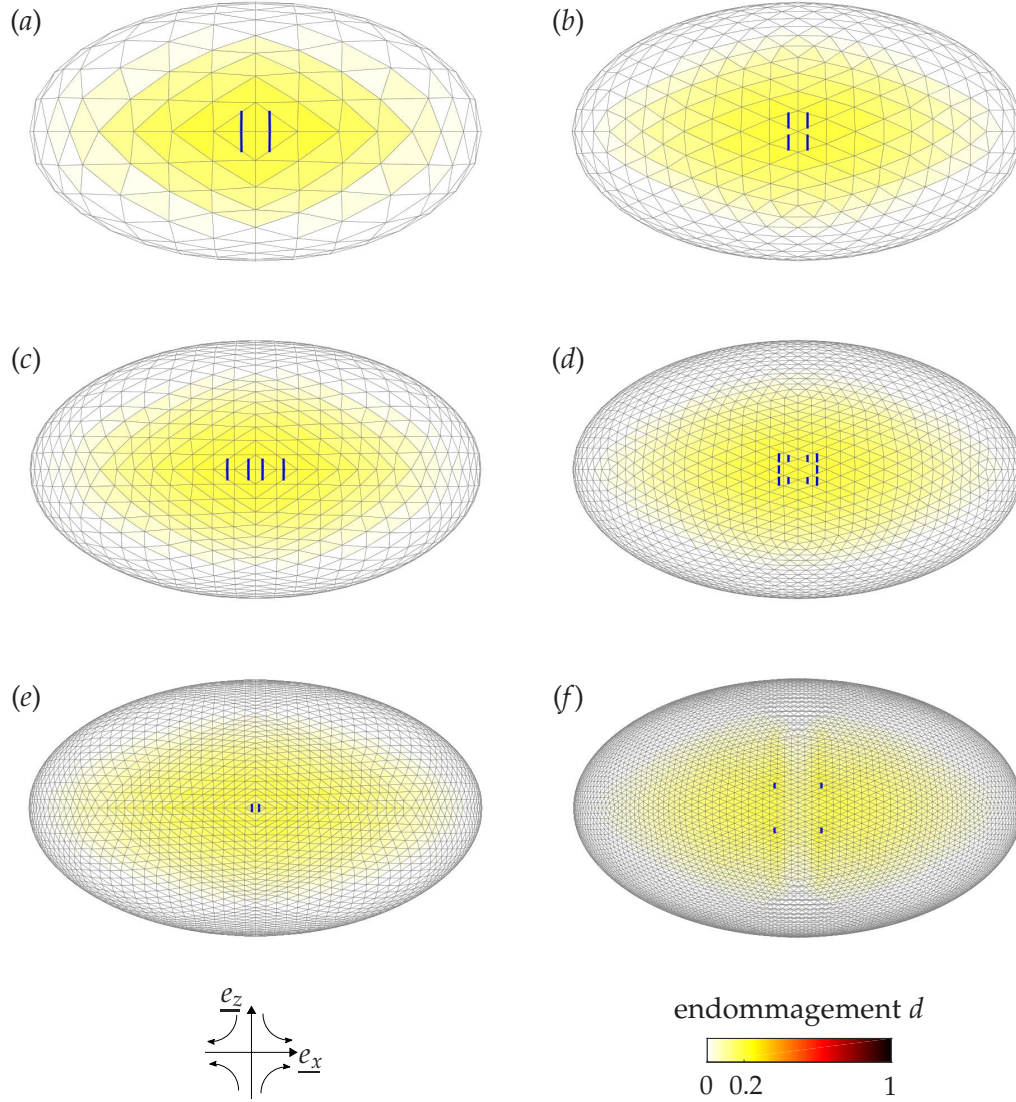


Figure 0.1 – Cartographie de la variable d’endommagement d à l’instant t_ℓ de l’initiation de la localisation ($d = d_c$), pour chacun des six maillages contenant (a) 512 ($t_\ell = 0.485$), (b) 1280 ($t_\ell = 0.480$), (c) 2048 ($t_\ell = 0.480$), (d) 5120 ($t_\ell = 0.475$), (e) 8192 ($t_\ell = 0.495$), et (f) 20480 ($t_\ell = 0.465$) éléments. La capsule est observée dans sa configuration courante dans le plan (e_x, e_z) . Les résultats sont obtenus pour $Ca = 0.1$, $Y_D = 0.025$, $Y_C = 0.25$, $d_c = 0.2$, $G_c = 0.05$, $\Delta t = 10^{-4}$, et $\gamma = 0$. Les lignes de discontinuités sont représentées en traits forts bleus. Toutes les images sont à la même échelle.

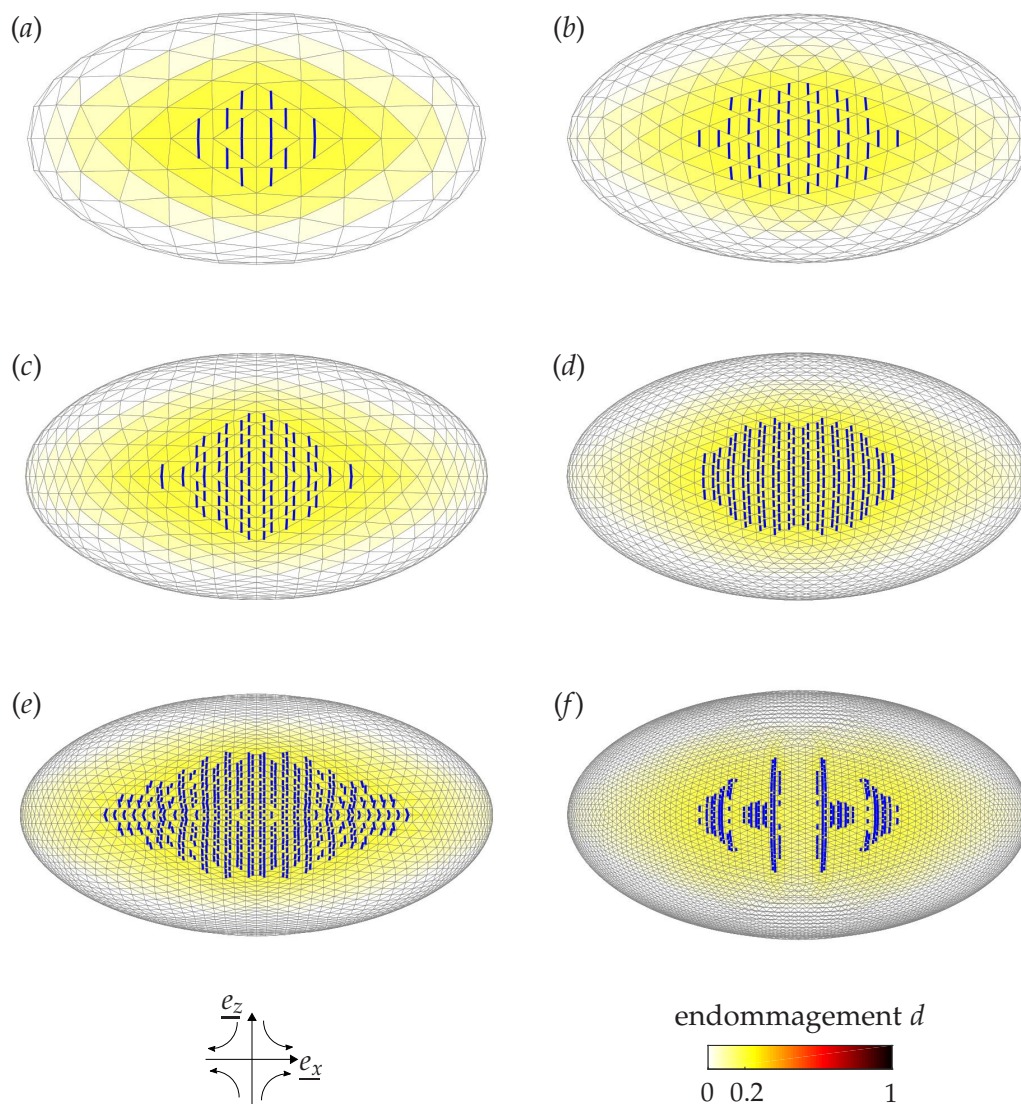


Figure 0.2 – Cartographie de la variable d’endommagement d à l’instant t_1 lorsque $\bar{u}_{N,max} = 0.01$, pour chacun des six maillages contenant (a) 512 ($t_1 = 0.570$), (b) 1280 ($t_1 = 0.595$), (c) 2048 ($t_1 = 0.620$), (d) 5120 ($t_1 = 0.615$), (e) 8192 ($t_1 = 0.745$), et (f) 20480 ($t_1 = 0.600$) éléments. La capsule est observée dans sa configuration courante dans le plan (e_x, e_z) . Les résultats sont obtenus pour $Ca = 0.1$, $Y_D = 0.025$, $Y_C = 0.25$, $d_c = 0.2$, $G_c = 0.05$, $\Delta t = 10^{-4}$, et $\gamma = 0$. Les lignes de discontinuités sont représentées en traits forts bleus. Toutes les images sont à la même échelle.

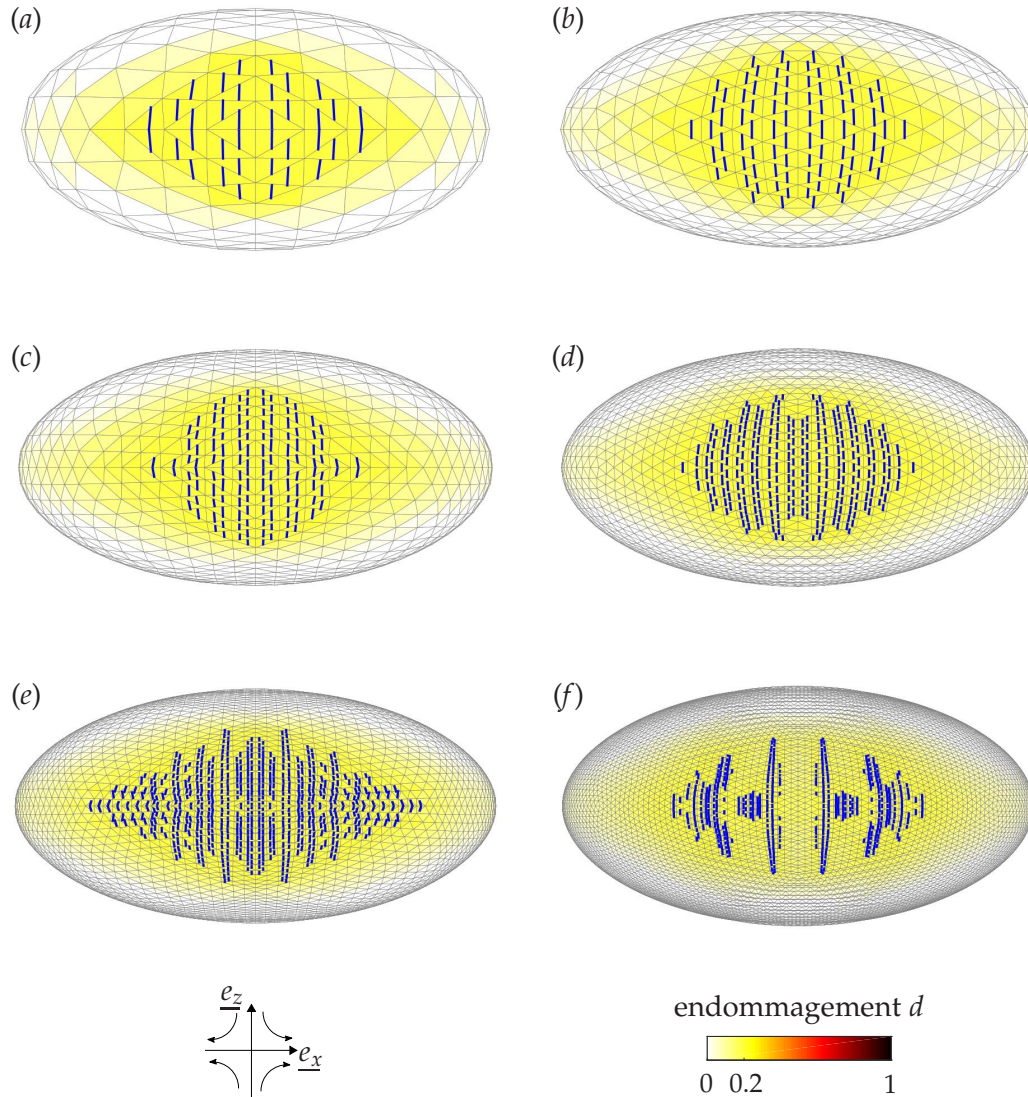


Figure 0.3 – Cartographie de la variable d'endommagement d à l'instant t_f lorsque $\bar{u}_{N,max} = 0.05$, pour chacun des six maillages contenant (a) 512 ($t_f = 0.730$), (b) 1280 ($t_f = 0.815$), (c) 2048 ($t_f = 0.810$), (d) 5120 ($t_f = 0.800$), (e) 8192 ($t_f = 0.940$), et (f) 20480 ($t_f = 0.770$) éléments. La capsule est observée dans sa configuration courante dans le plan $(\underline{e}_x, \underline{e}_z)$. Les résultats sont obtenus pour $Ca = 0.1$, $Y_D = 0.025$, $Y_C = 0.25$, $d_c = 0.2$, $G_c = 0.05$, $\Delta t = 10^{-4}$, et $\gamma = 0$. Les lignes de discontinuités sont représentées en traits forts bleus. Toutes les images sont à la même échelle.

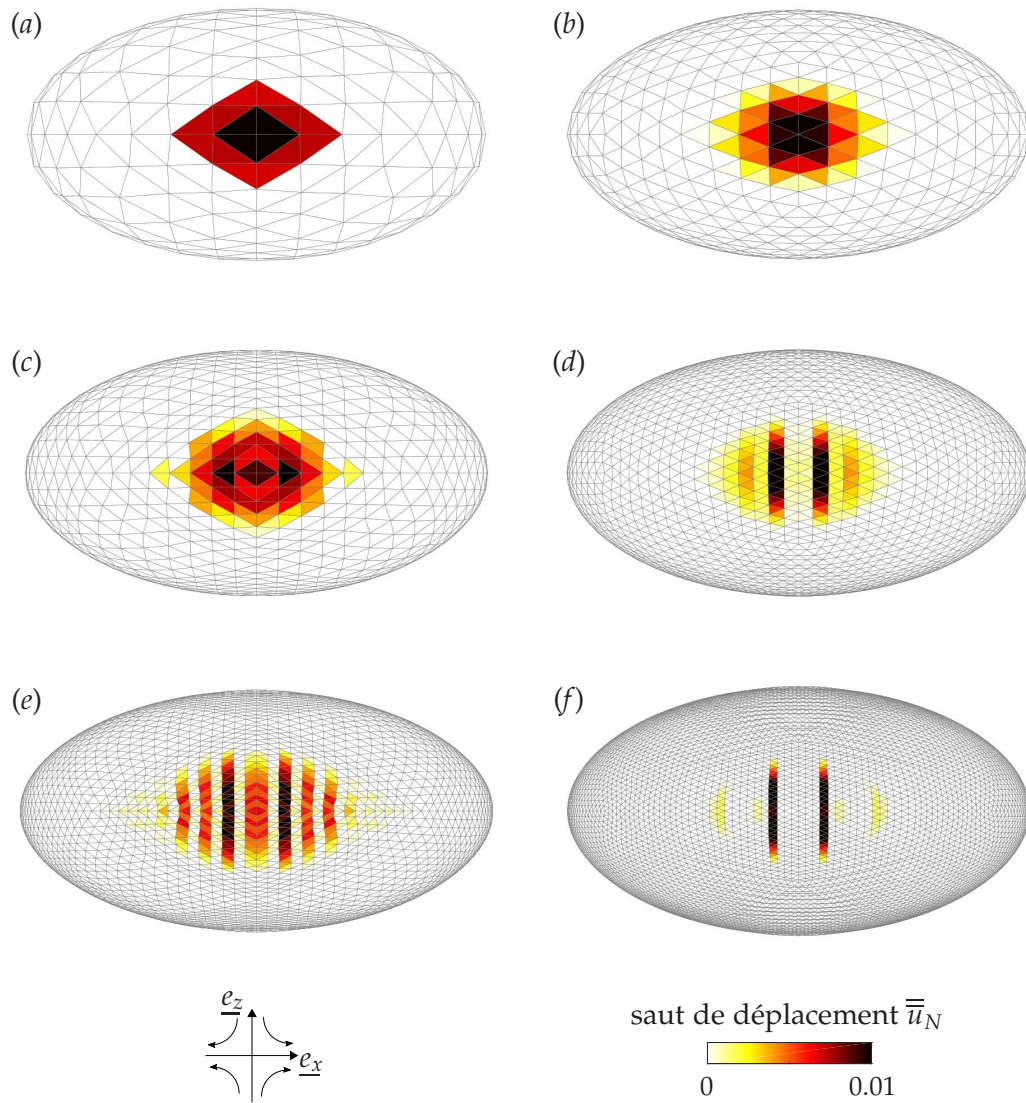


Figure 0.4 – Cartographie du saut de déplacement \bar{u}_N à l'instant t_1 lorsque $\bar{u}_{N,max} = 0.01$, pour chacun des six maillages contenant (a) 512 ($t_1 = 0.570$), (b) 1280 ($t_1 = 0.595$), (c) 2048 ($t_1 = 0.620$), (d) 5120 ($t_1 = 0.615$), (e) 8192 ($t_1 = 0.745$), et (f) 20480 ($t_1 = 0.600$) éléments. La capsule est observée dans sa configuration courante dans le plan (\vec{e}_x, \vec{e}_z) . Les résultats sont obtenus pour $Ca = 0.1$, $Y_D = 0.025$, $Y_C = 0.25$, $d_c = 0.2$, $G_c = 0.05$, $\Delta t = 10^{-4}$, et $\gamma = 0$. Toutes les images sont à la même échelle.

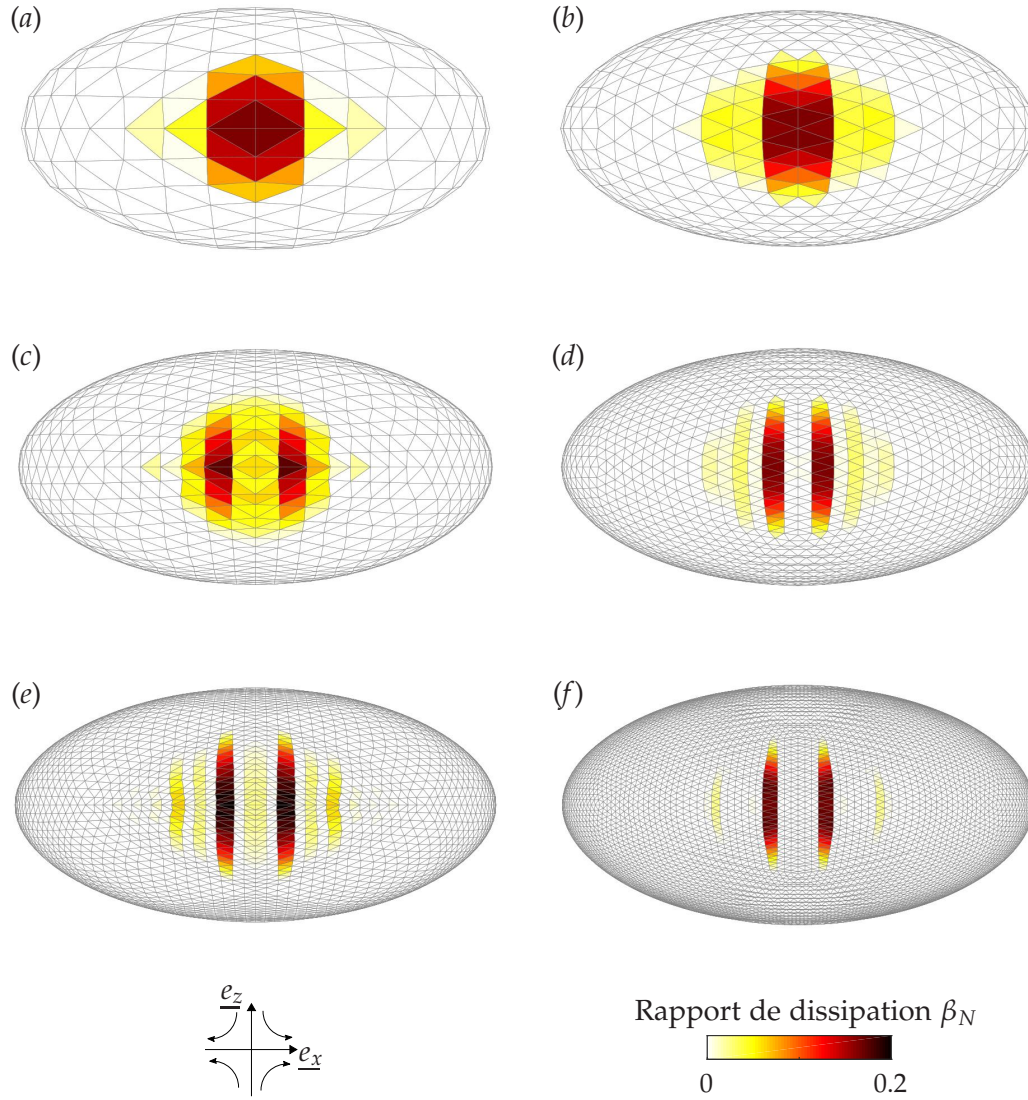


Figure 0.5 – Cartographie du rapport de dissipation β_N à l’instant t_f lorsque $\overline{u}_{N,max} = 0.05$, pour chacun des six maillages contenant (a) 512 ($t_f = 0.730$), (b) 1280 ($t_f = 0.815$), (c) 2048 ($t_f = 0.810$), (d) 5120 ($t_f = 0.800$), (e) 8192 ($t_f = 0.940$), et (f) 20480 ($t_f = 0.770$) éléments. La capsule est observée dans sa configuration courante dans le plan $(\underline{e}_x, \underline{e}_z)$. Les résultats sont obtenus pour $Ca = 0.1$, $Y_D = 0.025$, $Y_C = 0.25$, $d_c = 0.2$, $G_c = 0.05$, $\Delta t = 10^{-4}$, et $\gamma = 0$. Toutes les images sont à la même échelle.

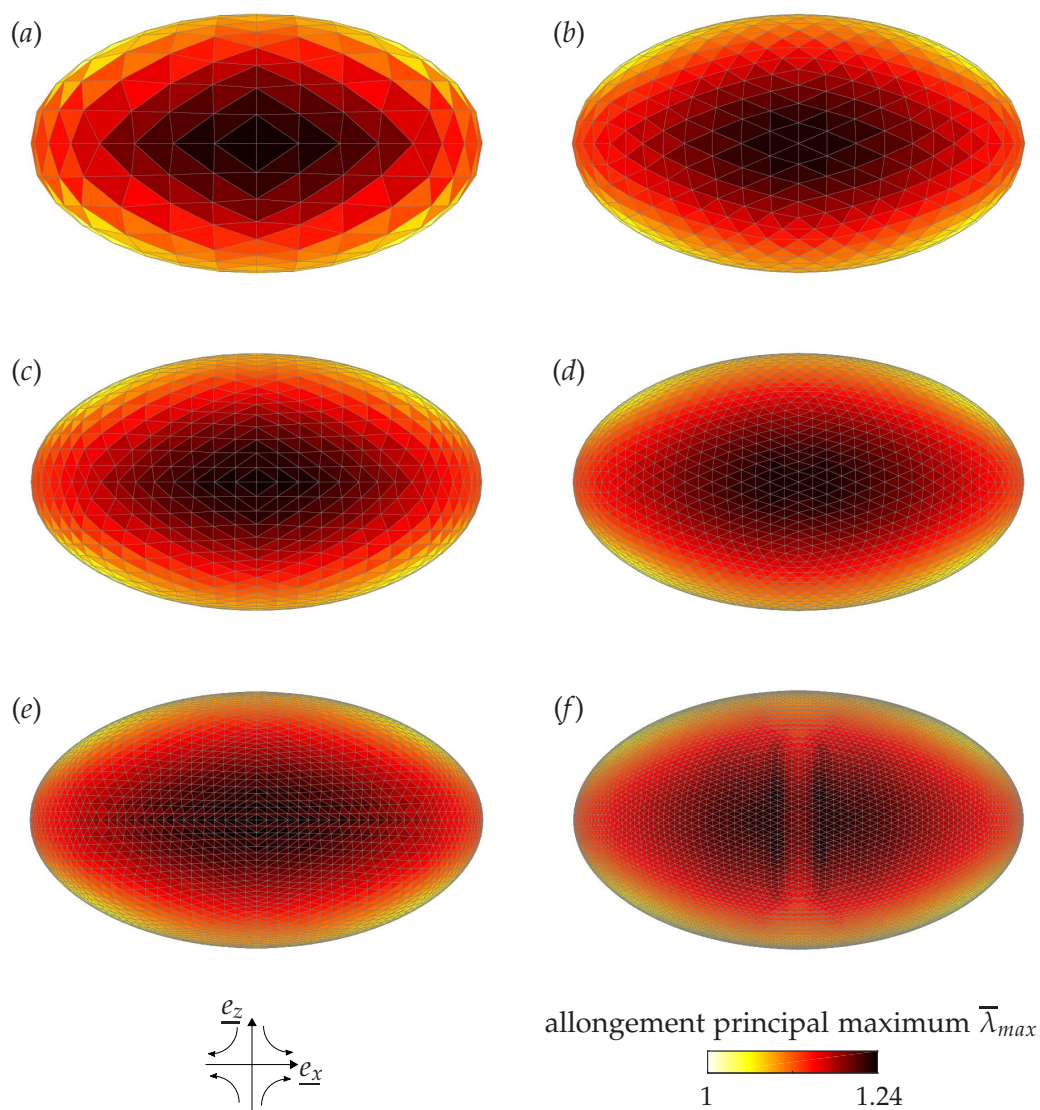


Figure 0.6 – Cartographie de l’allongement principal maximum $\bar{\lambda}_{max}$ à l’instant t_ℓ de l’initiation de la localisation ($d = d_c$), pour chacun des six maillages contenant (a) 512 ($t_\ell = 0.485$), (b) 1280 ($t_\ell = 0.480$), (c) 2048 ($t_\ell = 0.480$), (d) 5120 ($t_\ell = 0.475$), (e) 8192 ($t_\ell = 0.495$), et (f) 20480 ($t_\ell = 0.465$) éléments. La capsule est observée dans sa configuration courante dans le plan $(\underline{e}_x, \underline{e}_z)$. Les résultats sont obtenus pour $Ca = 0.1$, $Y_D = 0.025$, $Y_C = 0.25$, $d_c = 0.2$, $G_c = 0.05$, $\Delta t = 10^{-4}$, et $\gamma = 0$. Toutes les images sont à la même échelle.

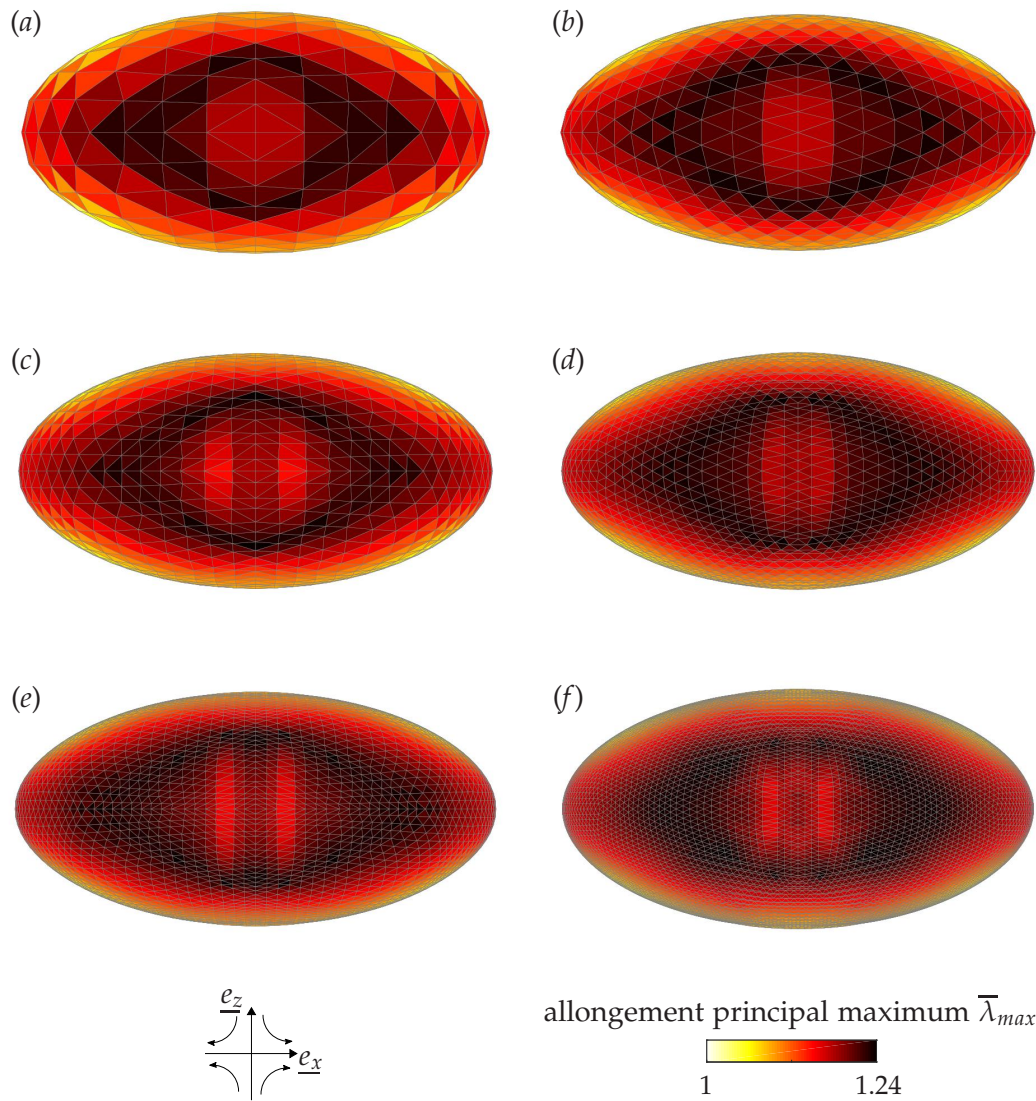


Figure 0.7 – Cartographie de l’allongement principal maximum $\bar{\lambda}_{max}$ à l’instant t_f où $\bar{u}_{N,max} = 0.05$ pour chacun des six maillages contenant (a) 512 ($t_f = 0.730$), (b) 1280 ($t_f = 0.815$), (c) 2048 ($t_f = 0.810$), (d) 5120 ($t_f = 0.800$), (e) 8192 ($t_f = 0.940$), et (f) 20480 ($t_f = 0.770$) éléments. La capsule est observée dans sa configuration courante dans le plan $(\underline{e}_x, \underline{e}_z)$. Les résultats sont obtenus pour $Ca = 0.1$, $Y_D = 0.025$, $Y_C = 0.25$, $d_c = 0.2$, $G_c = 0.05$, $\Delta t = 10^{-4}$, et $\gamma = 0$. Toutes les images sont à la même échelle.

Bibliographie

- ABKARIAN, M., FAIVRE, M., HORTON, R., SMISTRUP, K., BEST-POPESCU, C. A. & STONE, H. A. 2008 Cellular-scale hydrodynamics. *Biomed. Mater.* **3**, 034011.
- ABRAHAM, R., MARSDEN, J. E. & RATTU, T. 1988 *Manifolds, Tensor Analysis, and Applications, Applied Mathematical Sciences*, vol. 75. New York, NY : Springer New York.
- ALEXIADIS, A. 2014 A smoothed particle hydrodynamics and coarse-grained molecular dynamics hybrid technique for modelling elastic particles and breakable capsules under various flow conditions. *Int. J. Numer. Meth. Eng.* **100** (10), 713–719.
- ALEXIADIS, A. 2015 A new Framework for Modelling the Dynamics and the Breakage of Capsules, Vesicles and Cells in Fluid Flow. *Proc. IUTAM* **16**, 80–88.
- ARMERO, F. & LINDER, C. 2008 New finite elements with embedded strong discontinuities in the finite deformation range. *Comput. Method. Appl. M.* **197**, 3138–3170.
- BAGCHI, P. & KALLURI, R. M. 2010 Rheology of a dilute suspension of liquid-filled elastic capsules. *Phys. Rev. E* **81** (5), 056320.
- BARENBLATT, G. I. 1962 The mathematical theory of equilibrium cracks in brittle fracture. In *Advances in applied mechanics*, , vol. 7, pp. 55–129. Elsevier.
- BARTHÈS-BIESEL, D. 1980 Motion of a spherical microcapsule freely suspended in a linear shear flow. *J. Fluid Mech.* **100** (4), 831–853.
- BARTHÈS-BIESEL, D. 1991 Role of interfacial properties on the motion and deformation of capsules in shear flow. *Physica A* **172** (1-2), 103–124.

- BARTHÈS-BIESEL, D. 2016 Motion and Deformation of Elastic Capsules and Vesicles in Flow. *Annu. Rev. Fluid Mech.* **48** (1), 25–52.
- BARTHÈS-BIESEL, D., DIAZ, A. & DHENIN, E. 2002 Effect of constitutive laws for two-dimensional membranes on flow-induced capsule deformation. *J. Fluid Mech.* **460**, 211–222.
- BARTHÈS-BIESEL, D. & RALLISON, J. M. 1981 The time-dependent deformation of a capsule freely suspended in a linear shear flow. *J. Fluid Mech.* **113**, 251.
- BARTHÈS-BIESEL, D. & SGAIER, H. 1985 Role of membrane viscosity in the orientation and deformation of a spherical capsule suspended in shear flow. *J. Fluid Mech.* **160**, 119–135.
- BAUER, J., ZÄHRES, M., ZELLERMANN, A., KIRSCH, M., PETRAT, F., DE GROOT, H. & MAYER, C. 2010 Perfluorocarbon-filled poly(lactide-co-glycolide) nano- and microcapsules as artificial oxygen carriers for blood substitutes : a physico-chemical assessment. *J. Microencapsul.* **27** (2), 122–132.
- BAŽANT, Z. P. & PIJAUDIER-CABOT, G. 1988 Nonlocal continuum damage, localization instability and convergence. *J. Appl. Mech.* **55**, 287–293.
- BAŽANT, Z. P. & JIRÁSEK, M. 2002 Nonlocal integral formulations of plasticity and damage : survey of progress. *J. Eng. Mech.* **128** (11), 1119–1149.
- BELYTSCHKO, T. & BLACK, T. 1999 Elastic crack growth in finite elements with minimal remeshing. *Int. J. Numer. Meth. Eng.* **45** (5), 601–620.
- BENALLAL, A., BILLARDON, R. & GEYMONAT, G. 1993 Bifurcation and localization in rate-independent materials. some general considerations. In *Bifurcation and Stability of Dissipative Systems* (ed. Q. S. Nguyen), pp. 1–44. Springer.
- BESSON, J., CAILLETAUD, G., CHABOCHE, J.-L. & FOREST, S. 2010 *Non-Linear Mechanics of Materials*, pp. 127–194. Springer.
- BHUJBAL, S. V., DE VOSSL, P. & NICLOU, S. P. 2014 Drug and cell encapsulation : Alternative delivery options for the treatment of malignant brain tumors. *Adv. Drug Deliv. Rev.* **67–68**, 142–153.
- BOURDIN, B., FRANCFORT, G. A. & MARIGO, J. J. 2000 Numerical experiments in revisited brittle fracture. *J. Mech. Phys. Solids* **48** (4), 797–826.

- BUDE, J. 2015 Ductile fracture simulation using the strong discontinuity method. PhD thesis, Université de Technologie de Compiègne.
- CARIN, M., BARTHÈS-BIESEL, D., EDWARDS-LÉVY, F., POSTEL, C. & ANDREI, D. C. 2003 Compression of biocompatible liquid-filled HSA-alginate capsules : Determination of the membrane mechanical properties. *Biotechnol. Bioeng.* **82**, 207–212.
- CHABOCHE, J.-L., FEYEL, F. & MONERIE, Y. 2001 Interface debonding models : a viscous regularization with a limited rate dependency. *Int. J. Solids Struct.* **38** (18), 3127–3160.
- CHANG, K. S. & OLBRICHT, W. L. 1993a Experimental studies of the deformation and breakup of a synthetic capsule in steady and unsteady simple shear flow. *J. Fluid Mech.* **250**, 609–633.
- CHANG, K. S. & OLBRICHT, W. L. 1993b Experimental studies of the deformation of a synthetic capsule in extensional flow. *J. Fluid Mech.* **250**, 587–608.
- CHU, T. X., SALSAC, A.-V., LECLERC, E., BARTHÈS-BIESEL, D., WURTZ, H. & EDWARDS-LÉVY, F. 2011 Comparison between measurements of elasticity and free amino group content of ovalbumin microcapsule membranes : Discrimination of the cross-linking degree. *J. Colloid Interf. Sci.* **355**, 81–88.
- COLEMAN, B. D. & GURTIN, M. E. 1967 Thermodynamics with internal state variables. *J. Chem. Phys.* **47**, 597–613.
- COMELLAS, E., BELLOMO, F. J. & OLLER, S. 2016 A generalized finite-strain damage model for quasi-incompressible hyperelasticity using hybrid formulation : Generalized damage model for quasi-incompressible hyperelasticity. *Int. J. Numer. Meth. Eng.* **105** (10), 781–800.
- DAO, M., LIM, C. T. & SURESH, S. 2003 Mechanics of the human red blood cell deformed by optical tweezers. *J. Mech. Phys. Solids* **51** (11), 2259–2280.
- DE BORST, R., GUTIÉRREZ, M. A., WELLS, G. N., REMMERS, J. J. C. & ASKES, H. 2004 Cohesive-zone models, higher-order continuum theories and reliability methods for computational failure analysis : computational failure analysis. *Int. J. Numer. Meth. Eng.* **60** (1), 289–315.
- DIXIT, V. 1994 Development of a bioartificial liver using isolated hepatocytes. *Artif. Organs* **18** (5), 371–384.

- DODDI, S. K. & BAGCHI, P. 2008 Lateral migration of a capsule in a plane poiseuille flow in a channel. *Int. J. Multiphas. Flow* **34**, 966–986.
- DODSON, W. R. & DIMITRAKOPOULOS, P. 2008 Spindles, cusps, and bifurcation for capsules in stokes flow. *Phys. Rev. Lett.* **101**, 208102.
- DUGDALE, D. S. 1960 Yielding of steel sheets containing slits. *J. Mech. Phys. Solids* **8** (2), 100–104.
- DUPONT, C. 2014 Biomécanique de capsules en écoulement. PhD thesis, Université de Technologie de Compiègne.
- DUPONT, C., SALSAC, A.-V., BARTHÈS-BIESEL, D., VIDRASCU, M. & LE TALLEC, P. 2015 Influence of bending resistance on the dynamics of a spherical capsule in shear flow. *Phys. Fluids* **27** (5), 051902.
- DVORKIN, E. N., CUITINO, A. M. & GIOIA, G. 1990 Finite elements with displacement interpolated embedded localization lines insensitive to mesh size and distortions. *Int. J. Numer. Meth. Eng.* **30** (3), 541–564.
- EVANS, E. A. & SKALAK, R. 1980 *Mechanics and thermodynamics of biomembranes*. Boca Raton, Fla : CRC Pr.
- FOESSEL, É., WALTER, J., SALSAC, A.-V. & BARTHÈS-BIESEL, D. 2011 Influence of internal viscosity on the large deformation and buckling of a spherical capsule in a simple shear flow. *J. Fluid Mech.* **672**, 477–486.
- FRANCFORT, G. A. & MARIGO, J. J. 1998 Revisiting brittle fracture as an energy minimization problem. *J. Mech. Phys. Solids* **46** (8), 1319–1342.
- GAO, Y. F. & BOWER, A. F. 2004 A simple technique for avoiding convergence problems in finite element simulations of crack nucleation and growth on cohesive interfaces. *Model. Simul. Mater. Sc.* **12** (3), 453–463.
- GASSER, T. C. & HOLZAPFEL, G. A. 2003 Geometrically non-linear and consistently linearized embedded strong discontinuity models for 3D problems with an application to the dissection analysis of soft biological tissues. *Comput. Method. Appl. M.* **192** (47-48), 5059–5098.
- GHAEMI, A., PHILIPP, A., BAUER, A., LAST, K., FERY, A. & GEKLE, S. 2016 Mechanical behaviour of micro-capsules and their rupture under compression. *Chem. Eng. Sci.* **142**, 236 – 243.

- GRANDMAISON, N., BRANCHERIE, D. & SALSAC, A.-V. 2021 Modelling of damage of a liquid-core microcapsule in simple shear flow until rupture. *J. Fluid Mech.* **914**, A25–1–A25–27.
- GUBSPUN, J., GIRES, P.-Y., DE LOUBENS, C., BARTHÈS-BIESEL, D., DESCHAMPS, J., GEORGE-LIN, M., LEONETTI, M., LECLERC, E., EDWARDS-LÉVY, F. & SALSAC, A.-V. 2016 Characterization of the mechanical properties of cross-linked serum albumin microcapsules : effect of size and protein concentration. *Colloid Polym. Sci.* **294**, 1381–1389.
- HAMMER, P. C., MARLOWE, O. J. & STROUD, A. H. 1956 Numerical Integration Over Simplexes and Cones. *Mathematical Tables and Other Aids to Computation* **10**, 130–137.
- HILLERBORG, A., MODÉER, M. & PETERSSON, P.-E. 1976 Analysis of crack formation and crack growth in concrete by means of fracture mechanics and finite elements. *Cement Concrete Res.* **6** (6), 773–781.
- HOKANSON, J. & YAZDANI, S. 1997 A constitutive model of the artery with damage. *Mech. Res. Commun.* **24**, 151–159.
- HOLZAPFEL, G. A. & FEREIDONNEZHAD, B. 2017 Modeling of damage in soft biological tissues. In *Biomechanics of Living Organs* (ed. Y. Payan & J. Ohayon), pp. 101–123. Elsevier.
- HU, X.-Q., SALSAC, A.-V. & BARTHÈS-BIESEL, D. 2012 Flow of a spherical capsule in a pore with circular or square cross-section. *J. Fluid Mech.* **705**, 176–194.
- HU, X.-Q., SÉVÉNIÉ, B., SALSAC, A.-V., LECLERC, E. & BARTHÈS-BIESEL, D. 2013 Characterizing the membrane properties of capsules flowing in a square-section microfluidic channel : Effects of the membrane constitutive law. *Phys. Rev. E* **87** (6), 063008.
- HUESPE, A.E., NEEDLEMAN, A., OLIVER, J. & SÁNCHEZ, P.J. 2009 A finite thickness band method for ductile fracture analysis. *Int. J. Plasticity* **25** (12), 2349–2365.
- HUSMANN, M., REHAGE, H., DHENIN, E. & BARTHÈS-BIESEL, D. 2005 Deformation and bursting of nonspherical polysiloxane microcapsules in a spinning-drop apparatus. *J. Colloid Interf. Sci.* **282**, 109–119.
- JIRÁSEK, M. 2000 Conditions of uniqueness for finite elements with embedded cracks.
- JOHNSTON, A. P. R., CORTEZ, C., ANGELATOS, A. S. & CARUSO, F. 2006 Layer-by-layer engineered capsules and their applications. *Curr. Opin. Colloid In.* **11** (4), 203–209.

- JOUNG, S., SONG, M. & KIM, D. 2020 Synthetic capsule breakup in simple shear flow. *Phys. Fluids* **32** (11), 113603.
- KACHANOV, L. M. 1958 On time to rupture in creep conditions (in russian). *Izv Akad. Nauk. SSR Otd. Tekh. Nauk.* **8**, 26–31.
- KACHANOV, L. M. 1986 *Introduction to continuum damage mechanics*. Dordrecht : Springer.
- KELLER, S. R. & SKALAK, R. 1982 Motion of a tank-treading ellipsoidal particle in a shear flow. *J. Fluid Mech.* **120**, 27–47.
- KESSLER, S., FINKEN, R. & SEIFERT, U. 2008 Swinging and tumbling of elastic capsules in shear flow. *J. Fluid Mech.* **605**, 207–226.
- KHOLEIF, I. A. & WEYMANN, H. D. 1974 Motion of a single red blood cell in plane shear flow. *Biorheology* **11** (5), 337–348.
- KOLEVA, I. & REHAGE, H. 2012 Deformation and orientation dynamics of polysiloxane microcapsules in linear shear flow. *Soft Matter* **8**, 3681–3693.
- KRAJČINOVIC, D. 1989 Damage mechanics. *Mech. Mater.* **8**, 117–197.
- KUMAR, A., FRANCFORT, G. A. & LOPEZ-PAMIES, O. 2018 Fracture and healing of elastomers : A phase-transition theory and numerical implementation. *J. Mech. Phys. Solids* **112**, 523–551.
- KÜHTREIBER, W. M., LANZA, R. P. & CHICK, W. L., ed. 1999 *Cell Encapsulation Technology and Therapeutics*. Boston, MA : Birkhäuser Boston.
- LAC, É., BARTHÈS-BIESEL, D., PELEKASIS, N. A. & TSAMOPOULOS, J. 2004 Spherical capsules in three-dimensional unbounded Stokes flows : effect of the membrane constitutive law and onset of buckling. *J. Fluid Mech.* **516**, 303–334.
- LADYZHENSKAYA, O. A. 1969 *The mathematical theory of viscous incompressible flow*, , vol. 2. Gordon and Breach New York.
- LE GOFF, A., KAOUI, B., KURZAWA, G., HASZON, B. & SALSAC, A.-V. 2017 Squeezing biocapsules into a constriction : deformation till break-up. *Soft Matter* **13**, 7644–7648.
- LEFEBVRE, Y., LECLERC, E., BARTHÈS-BIESEL, D., WALTER, J. & EDWARDS-LÉVY, F. 2008 Flow of artificial microcapsules in microfluidic channels : A method for determining the elastic properties of the membrane. *Phys. Fluids* **20** (12), 123102.

- LEMAITRE, J. & DESMORAT, R. 2005 *Engineering Damage Mechanics : Ductile, Creep, Fatigue and Brittle Failures*. Berlin Heidelberg : Springer-Verlag.
- LENORMAND, G., HÉNON, S., RICHERT, A., SIMÉON, J. & GALLET, F. 2001 Direct measurement of the area expansion and shear moduli of the human red blood cell membrane skeleton. *Biophys. J.* **81** (1), 43–56.
- LI, S., NICKELS, J. & PALMER, A. F. 2005 Liposome-encapsulated actin-hemoglobin (LEAcHb) artificial blood substitutes. *Biomaterials* **26**, 3759–3769.
- LI, X. & SARKAR, K. 2008 Front tracking simulation of deformation and buckling instability of a liquid capsule enclosed by an elastic membrane. *J. Comput. Phys.* **227**, 4998–5018.
- LI, X. Z., BARTHÈS-BIESEL, D. & HELMY, A. 1988 Large deformations and burst of a capsule freely suspended in an elongational flow. *J. Fluid Mech.* **187**, 179–196.
- MA, G. & SU, Z., ed. 2013 *Microspheres and microcapsules in biotechnology : design, preparation, and applications*. Singapore : Pan Stanford Publishing.
- MANZOLI, O. L. & SHING, P. B. 2005 Finite elements with embedded multiple cracks and non-uniform discontinuity modes. *Lat. Am. J. Solids Stru.* **2** (1), 65–76.
- MARIGO, J.-J. 1981 Formulation d'une loi d'endommagement d'un matériau élastique. *C. R. Acad. Sci. Paris. Série II* **292**, 1309–1312.
- MIEHE, C., WELSCHINGER, F. & HOFACKER, M. 2010 Thermodynamically consistent phase-field models of fracture : Variational principles and multi-field fe implementations. *Int. J. Numer. Meth. Eng.* **83** (10), 1273–1311.
- MOSLER, J. & SCHEIDER, I. 2011 A thermodynamically and variationally consistent class of damage-type cohesive models. *J. Mech. Phys. Solids* **59** (8), 1647–1668.
- MOËS, N. & BELYTSCHKO, T. 2002 Extended finite element method for cohesive crack growth. *Eng. Fract. Mech.* **69**, 813–833.
- MOËS, N., DOLBOW, J. & BELYTSCHKO, T. 1999 A finite element method for crack growth without remeshing. *Int. J. Numer. Meth. Eng.* **46** (1), 131–150.
- MOËS, N., STOLZ, C., BERNARD, P.-E. & CHEVAUGEON, N. 2011 A level set based model for damage growth : The thick level set approach. *Int. J. Numer. Meth. Eng.* **86** (3), 358–380.

- NATALI, A.N., PAVAN, P.G., CARNIEL, E.L., LUCISANO, M.E. & TAGLIALAVORO, G. 2005 Anisotropic elasto-damage constitutive model for the biomechanical analysis of tendons. *Med. Eng. Phys.* **27**, 209–214.
- NEEDLEMAN, A. 1988 Material rate dependence and mesh sensitivity in localization problems. *Comput. Method. Appl. M.* **67** (1), 69–85.
- OLIVER, J. 1996 Modelling strong discontinuities in solid mechanics via strain softening constitutive equations. part 1 : Fundamentals. *Int. J. Numer. Meth. Eng.* **39** (21), 3575–3600.
- OLIVER, J., HUESPE, A.E. & SÁNCHEZ, P.J. 2006 A comparative study on finite elements for capturing strong discontinuities : E-FEM vs X-FEM. *Comput. Method. Appl. M.* **195** (37-40), 4732–4752.
- OLIVER, J. & HUESPE, A. E. 2004a Continuum approach to material failure in strong discontinuity settings. *Comput. Method. Appl. M.* **193** (30), 3195–3220.
- OLIVER, J. & HUESPE, A. E. 2004b Theoretical and computational issues in modelling material failure in strong discontinuity scenarios. *Comput. Method. Appl. M.* **193**, 2987–3014.
- OLIVER, J., HUESPE, A. E., PULIDO, M. D. G. & SAMANIEGO, E. 2003 On the strong discontinuity approach in finite deformation settings. *Int. J. Numer. Meth. Eng.* **56** (7), 1051–1082.
- OMORI, T., ISHIKAWA, T., BARTHÈS-BIESEL, D., SALSAC, A.-V., WALTER, J., IMAI, Y. & YAMAGUCHI, T. 2011 Comparison between spring network models and continuum constitutive laws : Application to the large deformation of a capsule in shear flow. *Phys. Rev. E* **83** (4), 041918.
- ORTIZ, M., LEROY, Y. & NEEDLEMAN, A. 1987 A finite element method for localized failure analysis. *Comput. Method. Appl. M.* **61** (2), 189–214.
- ORTIZ, M. & PANDOLFI, A. 1999 Finite-deformation irreversible cohesive elements for three-dimensional crack-propagation analysis. *Int. J. Numer. Meth. Eng.* **44** (9), 1267–1282.
- PEERLINGS, R. H. J., DE BORST, R., BREKELMANS, W. A. M. & DE VREE, J. H. P. 1996 Gradient enhanced damage for quasi-brittle materials. *Int. J. Numer. Meth. Eng.* **39**, 3391–3403.

- PIETRUSZCZAK, ST. & MRÓZ, Z. 1981 Finite element analysis of deformation of strain-softening materials. *Int. J. Numer. Meth. Eng.* **17** (3), 327–334.
- POZRIKIDIS, C. 1992 *Boundary Integral and Singularity Methods for Linearized Viscous Flow*. Cambridge : Cambridge University Press.
- POZRIKIDIS, C. 1995 Finite deformation of liquid capsules enclosed by elastic membranes in simple shear flow. *J. Fluid Mech.* **297**, 123–152.
- POZRIKIDIS, C. 2001 Effect of membrane bending stiffness on the deformation of capsules in simple shear flow. *J. Fluid Mech.* **440**, 269–291.
- RAHMAT, A., BARIGOU, M. & ALEXIADIS, A. 2019 Deformation and rupture of compound cells under shear : A discrete multiphysics study. *Phys. Fluids* **31** (5), 051903.
- RAMANUJAN, S. & POZRIKIDIS, C. 1998 Deformation of liquid capsules enclosed by elastic membranes in simple shear flow : large deformations and the effect of fluid viscosities. *J. Fluid Mech.* **361**, 117–143.
- RICE, J. R. 1976 The localization of plastic deformation. In *Theoretical and Applied Mechanics* (ed. W. T. Koiter), pp. 207–220. Proceedings of the 14th ICTAM, Delft (Netherlands) : North-Holland Publishing Company.
- RUIZ-RIANCHO, I. N., ALEXIADIS, A., ZHANG, Z. & GARCIA HERNANDEZ, A. 2021 A Discrete Multi-Physics Model to Simulate Fluid Structure Interaction and Breakage of Capsules Filled with Liquid under Coaxial Load. *Processes* **9** (2), 354.
- SCHENK, O. & GÄRTNER, K. 2004 Solving unsymmetric sparse systems of linear equations with PARDISO. *Future Gener. Comp. Sy.* **20**, 475–487.
- SCHMID SCHOENBEIN, H. 1975 Erythrocyte rheology and the optimization of mass transport in the microcirculation. *Blood Cells* **1** (2), 285–306.
- SCHMID-SCHÖNBEIN, H. & WELLS, R. 1969 Fluid drop-like transition of erythrocytes under shear. *Science* **165** (3890), 288–291.
- SECOMB, T. W. & SKALAK, R. 1982 Surface flow of viscoelastic membranes in viscous fluids. *Q. J. Mech. Appl. Math.* **35** (2), 233–247.
- SIMO, J. & OLIVER, J. 1994 A new approach to the analysis and simulation of strain softening in solids. In *Fracture and Damage in Quasibrittle Structures* (ed. M. Jirasek Z. P. Bazant, Z. Bittnar & J. Mazars), pp. 25–39. London (England) : E FN Spon.

- SIMO, J. C. & TAYLOR, R. L. 1985 Consistent tangent operators for rate-independent elastoplasticity. *Comput. Method. Appl. M.* **48** (1), 101–118.
- SKALAK, R., TOZEREN, A., ZARDA, R.P. & CHIEN, S. 1973 Strain Energy Function of Red Blood Cell Membranes. *Biophys. J.* **13** (3), 245–264.
- SU, J., HU, B.-H., LOWE, W. L., KAUFMAN, D. B. & MESSERSMITH, P. B. 2010 Anti-inflammatory peptide-functionalized hydrogels for insulin-secreting cell encapsulation. *Biomaterials* **31**, 308–314.
- SUI, Y., CHEN, X.B., CHEW, Y.T., ROY, P. & LOW, H.T. 2010 Numerical simulation of capsule deformation in simple shear flow. *Comput. Fluids* **39** (2), 242–250.
- SUKUMAR, N., MOËS, N., MORAN, B. & BELYTSCHKO, T. 2000 Extended finite element method for three-dimensional crack modelling. *Int. J. Numer. Meth. Eng.* **48**, 1549–1570.
- UNVERFEHRT, A., KOLEVA, I. & REHAGE, H. 2014 Wrinkling, tumbling and swinging microcapsules in simple shear flow. *AIP Conf. Proc.* **1593**, 746–749.
- UNVERFEHRT, A., KOLEVA, I. & REHAGE, H. 2015 Deformation, orientation and bursting of microcapsules in simple shear flow : Wrinkling processes, tumbling and swinging motions. *J. Phys. Conf. Ser.* **602**, 012002.
- WALTER, A., REHAGE, H. & LEONHARD, H. 2000 Shear-induced deformations of polyamide microcapsules. *Colloid Polym. Sci.* **278** (2), 169–175.
- WALTER, A., REHAGE, H. & LEONHARD, H. 2001 Shear induced deformation of microcapsules : shape oscillations and membrane folding. *Colloid. Surface. A* **183-185**, 123–132.
- WALTER, J. 2009 Couplage intégrales de frontières–éléments finis : application aux capsules sphériques et ellipsoïdales en écoulement. PhD thesis, Université de Technologie de Compiègne.
- WALTER, J., SALSAC, A.-V., BARTHÈS-BIESEL, D. & LE TALLEC, P. 2010 Coupling of finite element and boundary integral methods for a capsule in a Stokes flow. *Int. J. Numer. Meth. Eng.* **83**, 829–850.
- WELLS, G. N., DE BORST, R. & SLUYS, L. J. 2002 A consistent geometrically non-linear approach for delamination. *Int. J. Numer. Meth. Eng.* **54** (9), 1333–1355.
- WELLS, G. N. & SLUYS, L. J. 2001 A new method for modelling cohesive cracks using finite elements. *Int. J. Numer. Meth. Eng.* **50** (12), 2667–2682.

- ZHANG, M., FABIILLI, M. L., HAWORTH, K. J., FOWLKES, J. B., KRIPFGANS, O. D., ROBERTS, W. W., IVES, K. A. & CARSON, P. L. 2010 Initial Investigation of Acoustic Droplet Vaporization for Occlusion in Canine Kidney. *Ultrasound Med Biol* **36** (10), 1691–1703.
- ZHOU, H. & POZRIKIDIS, C. 1995 Deformation of liquid capsules with incompressible interfaces in simple shear flow. *J. Fluid Mech.* **283**, 175–200.
- ZUIDAM, N. J. & NEDOVIC, V., ed. 2010 *Encapsulation Technologies for Active Food Ingredients and Food Processing*. New York, NY : Springer New York.