

# Méthodes numériques avancées

Julien Yvonnet

École doctorale SIE, Université Paris-Est

Laboratoire Modélisation et Simulation Multi Echelle, Université Paris-Est, 5 Bd Descartes,  
77454 Marne-la-Vallée cedex 2

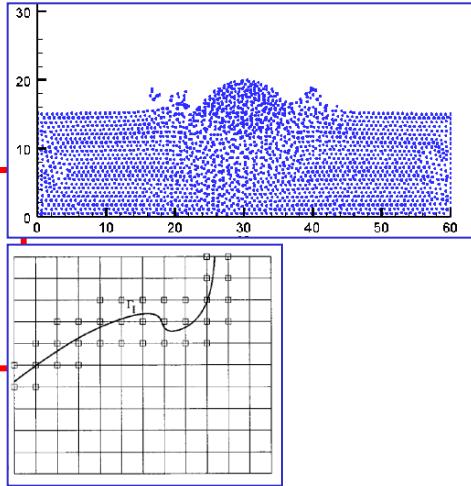
[Julien.yvonnet@univ-paris-est.fr](mailto:Julien.yvonnet@univ-paris-est.fr)

# Planning

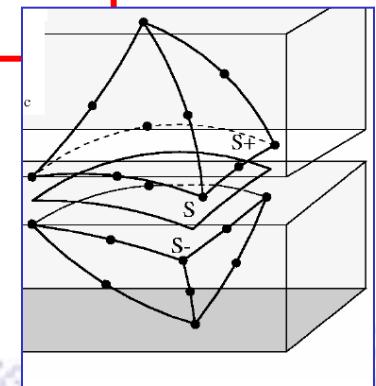
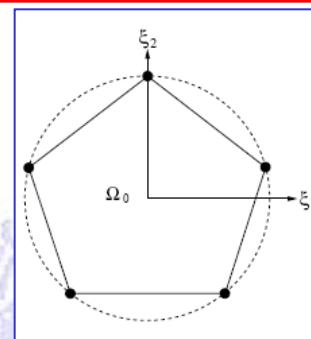
Dates	Lundi 3 mars 2014	Mardi 4 mars 2014	Mercredi 5 mars 2014	Jeudi 6 mars 2014	Vendredi 7 mars 2014
Intitulés des cours	9h00-12h00 Julien Yvonnet  Méthodes numériques pour la simulation des phénomènes en grandes déformations, fissuration et modélisation des interfaces complexes (méthodes sans maillage, XFEM, level-set, champs de phase)	9h00-10h00 Julien Yvonnet  Méthodes numériques pour alléger les problèmes non linéaires (méthodes de réduction de modèle, méthode asymptotique numérique)		9h30-12h30 Marc Bonnet  Méthodes d'éléments de frontière	8h30-12h30 C. Soize  Problématique et méthodologie des modélisations probabilistes en mécanique numérique
	10h30-12h30 Vincent Monchiet  Homogénéisation par Méthode FFT				
	14h00-17h00 P. Gosselet  Algorithmes parallèles et décomposition de domaines	14h00-17h00 J. Yvonnet  Méthodes numériques pour le calcul multi-échelle des solides : échelles micro, nano, quantiques et couplages entre échelles  B10 Bis, Lavoisier 1 <sup>er</sup> étage	.	14h00-17h00 Marc Bonnet  Méthodes d'éléments de frontière	14h00 -15h30 C. Desceliers  Eléments finis stochastiques, identification de champs stochastiques et propagation d'ondes en milieu aléatoire  15h45-17h15 E. Capiez-Lernout  Recalage des modèles numériques stochastiques et conception robuste

# Sommaire

## 1. Méthodes permettant de s'affranchir du maillage

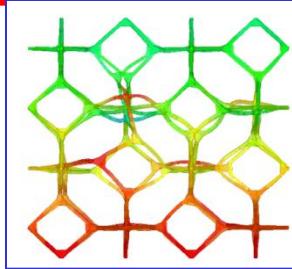


## 2. Méthodes d'éléments finis « avancés »

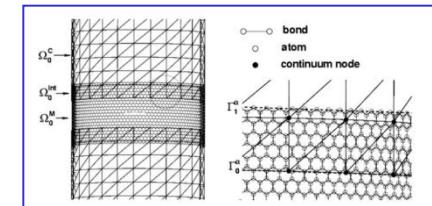


# Sommaire

## 3. Méthodes alternatives de résolution des problèmes non-linéaires



## 4. Méthodes multi- échelles



# 1. Méthodes permettant de s'affranchir du maillage

1.1. Méthodes sans maillage

1.2. Méthodes avancées avec maillage

# 1. Méthodes permettant de s'affranchir du maillage

## 1.1. Méthodes sans maillage

- o Une méthode sans maillage, de consistance d'ordre 0, où les conditions aux limites sont difficiles à imposer : **SPH**

- o deux méthodes sans maillage de consistance arbitraire, où les conditions aux limites sont difficiles à imposer : **RKPM** et **EFG**

- o Une méthode « presque » sans maillage, de consistance d'ordre 1, où les conditions aux limites sont faciles à imposer : **NEM**

## 1.2. Méthodes avancées avec maillage

- o Une méthode avec maillage, où les discontinuités peuvent être introduites indépendamment du maillage **PUM**, **XFEM**

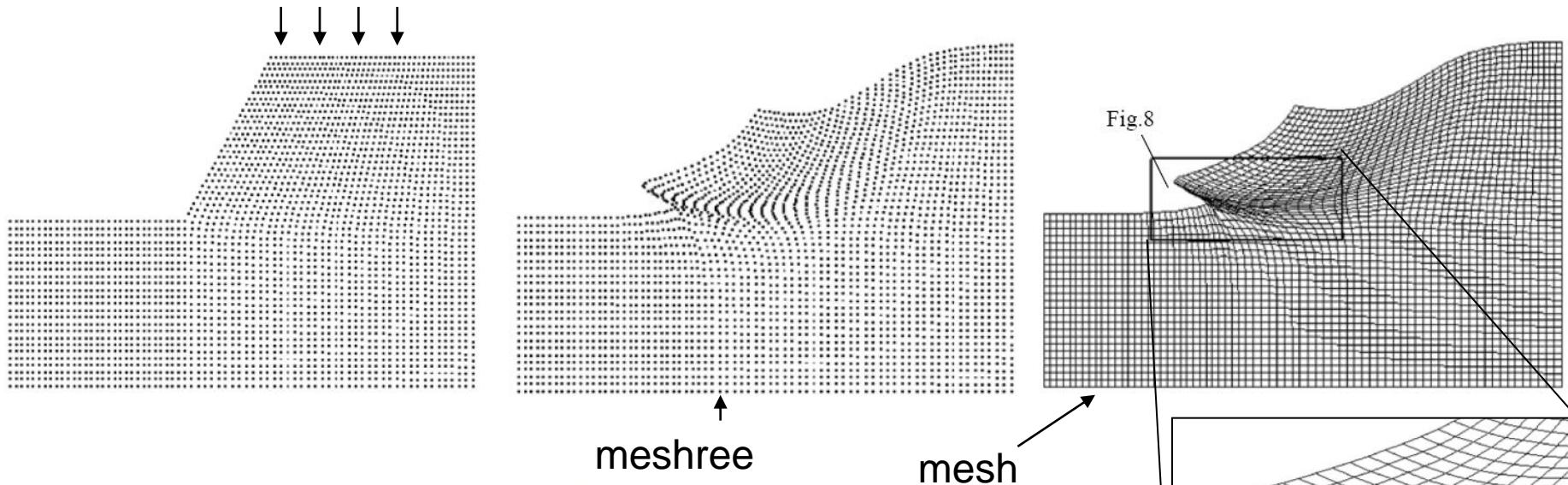
- o Une méthode avec **éléments « cohésifs »**

- o Une méthode avec maillage où les **éléments** sont des **polygones quelconques**

# 1.1. Les méthodes sans maillage

- Problème

- Grandes déformations, interfaces mobiles, fragmentation...



Problèmes de remaillages 3D : temps de calculs,  
automatisation, robustesse...

# Rappel : méthode des éléments finis

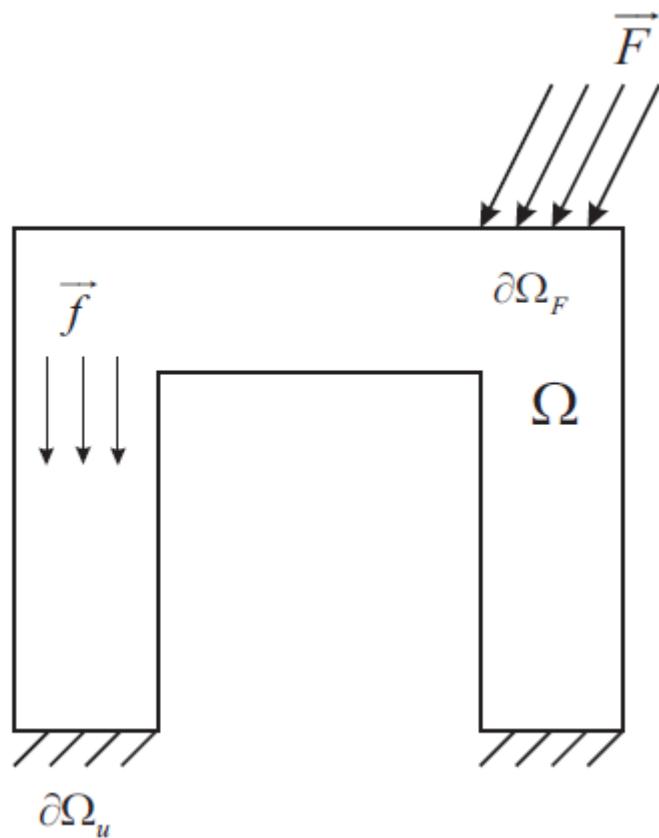
Equations sous forme forte

$$\operatorname{div}(\sigma) + \mathbf{f} = 0 \text{ dans } \Omega$$

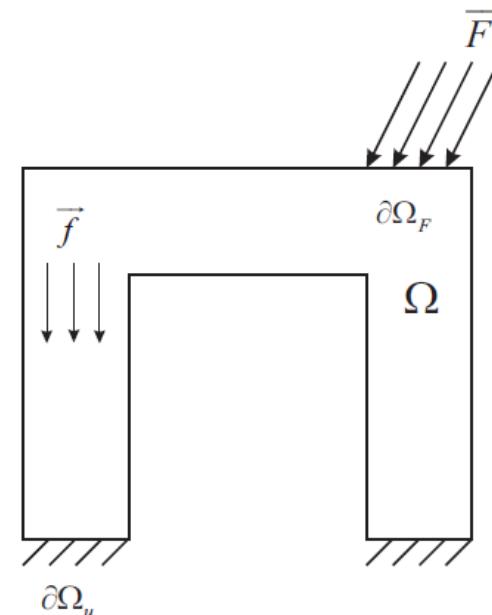
et

$$\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} \text{ sur } \partial\Omega_u$$

$$\sigma \mathbf{n} = \bar{\mathbf{F}} \text{ sur } \partial\Omega_F.$$



# Rappel : méthode des éléments finis



Forme faible des équations

Trouver  $\mathbf{u} \in H^1(\Omega)$  et  $\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}}$  sur  $\partial\Omega_u$  tel que :

$$W_{int}^*(\mathbf{u}, \mathbf{u}^*) = W_{ext}^*(\mathbf{u}^*) \quad \forall \mathbf{u}^* \in H_0^1(\Omega) \quad (4)$$

où  $W_{int}^*(\mathbf{u}, \mathbf{u}^*)$  est le travail virtuel des efforts intérieurs et  $W_{ext}^*(\mathbf{u}^*)$  est le travail virtuel des efforts extérieurs. Ces termes sont donnés explicitement par

$$\int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}^*) d\Omega = \int_{\partial\Omega_F} \mathbf{F} \cdot \mathbf{u}^* d\Gamma + \int_{\Omega} \mathbf{f} \cdot \mathbf{u}^* d\Omega \quad (5)$$

où  $\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}) = \frac{1}{2} (\mathbf{grad}(\mathbf{u}) + (\mathbf{grad}(\mathbf{u}))^T)$  est le tenseur des déformations linéarisé. Pour  $\mathbf{u}^*$  un déplacement virtuel on a  $\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}^*) = \frac{1}{2} (\mathbf{grad}(\mathbf{u}^*) + (\mathbf{grad}(\mathbf{u}^*))^T)$ . La méthode des éléments finis consiste à chercher une solution approchée de  $\mathbf{u}(\mathbf{x})$  dans la structure.

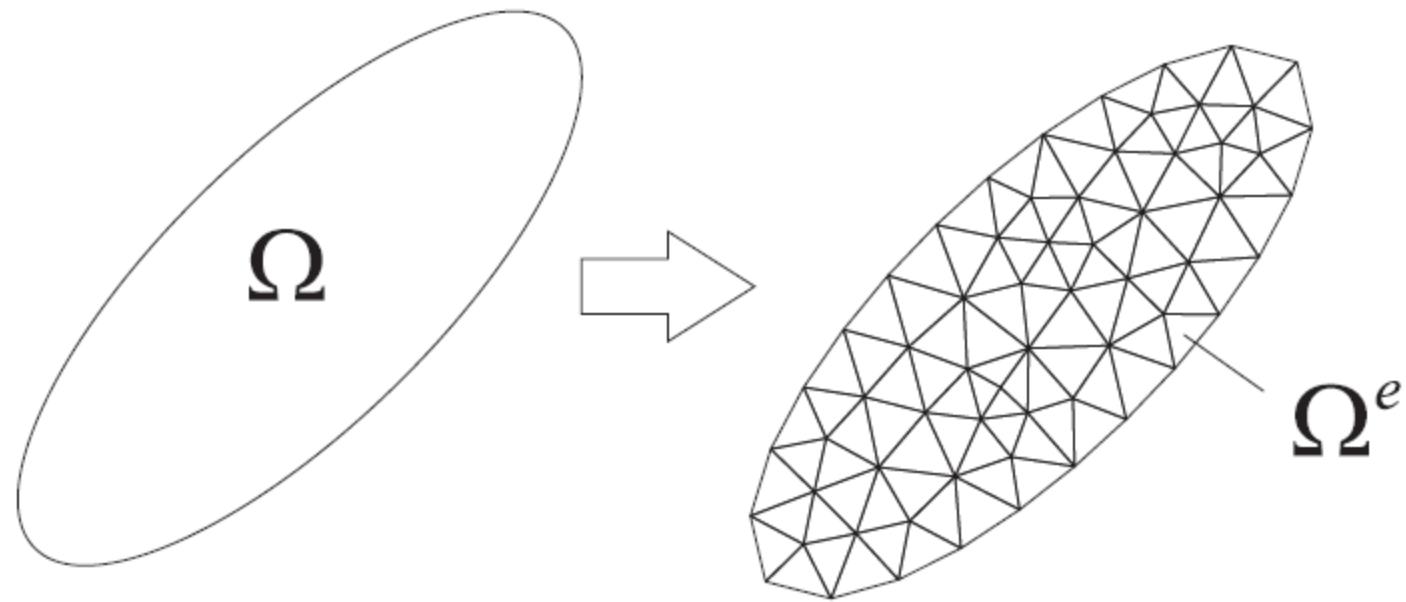
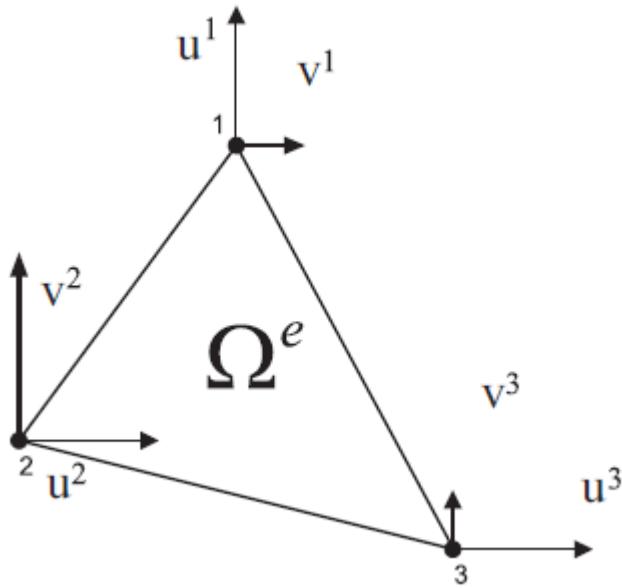


FIGURE 2 – Domaine et maillage associé.



Approximation éléments finis dans un élément

$$\mathbf{u}(x,y) = \begin{cases} u_x = a_1 + b_1x + c_1y = N_1(x,y)u^1 + N_2(x,y)u^2 + N_3(x,y)u^3 \\ u_y = a_2 + b_2x + c_2y = N_1(x,y)v^1 + N_2(x,y)v^2 + N_3(x,y)v^3 \end{cases},$$

$$\mathbf{u}(x,y) = \begin{bmatrix} N_1 & 0 & N_2 & 0 & N_3 & 0 \\ 0 & N_1 & 0 & N_2 & 0 & N_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u^1 \\ v^1 \\ u^2 \\ v^2 \\ u^3 \\ v^3 \end{bmatrix}.$$

$$[\varepsilon(x, y)] = \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ 2\varepsilon_{xy} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} \\ \frac{\partial v}{\partial y} \\ \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} \frac{\partial N_1}{\partial x} u^1 + \frac{\partial N_2}{\partial x} u^2 + \frac{\partial N_3}{\partial x} u^3 \\ \frac{\partial N_1}{\partial y} v^1 + \frac{\partial N_2}{\partial y} v^2 + \frac{\partial N_3}{\partial y} v^3 \\ \frac{\partial N_1}{\partial y} u^1 + \frac{\partial N_2}{\partial y} u^2 + \frac{\partial N_3}{\partial y} u^3 + \frac{\partial N_1}{\partial x} v^1 + \frac{\partial N_2}{\partial x} v^2 + \frac{\partial N_3}{\partial x} v^3 \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} \frac{\partial N_1}{\partial x} & 0 & \frac{\partial N_2}{\partial x} & 0 & \frac{\partial N_3}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial N_1}{\partial y} & 0 & \frac{\partial N_2}{\partial y} & 0 & \frac{\partial N_3}{\partial y} \\ \frac{\partial N_1}{\partial y} & \frac{\partial N_1}{\partial x} & \frac{\partial N_2}{\partial y} & \frac{\partial N_2}{\partial x} & \frac{\partial N_3}{\partial y} & \frac{\partial N_3}{\partial x} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u^1 \\ v^1 \\ u^2 \\ v^2 \\ u^3 \\ v^3 \end{bmatrix},$$

ou

$$[\varepsilon(x, y)] = \mathbf{Bq}^e.$$

Sur un élément on a :

$$\int_{\Omega^e} \mathbf{B} \mathbf{q}^{e*} \cdot \mathbf{C} \mathbf{B} \mathbf{q}^e d\Omega = \int_{\partial \Omega_F^e} \mathbf{F} \cdot \mathbf{N} \mathbf{q}^{e*} d\Gamma + \int_{\Omega^e} \mathbf{f} \cdot \mathbf{N} \mathbf{q}^{e*} d\Omega$$

ou encore

$$\int_{\Omega^e} \mathbf{q}^{e*T} \mathbf{B}^T \mathbf{C} \mathbf{B} \mathbf{q}^e d\Omega = \int_{\partial \Omega_F^e} \mathbf{q}^{e*T} \mathbf{N}^T \mathbf{F} d\Gamma + \int_{\Omega^e} \mathbf{q}^{e*T} \mathbf{N}^T \mathbf{f} d\Omega.$$

On obtient finalement un système d'équations de la forme :

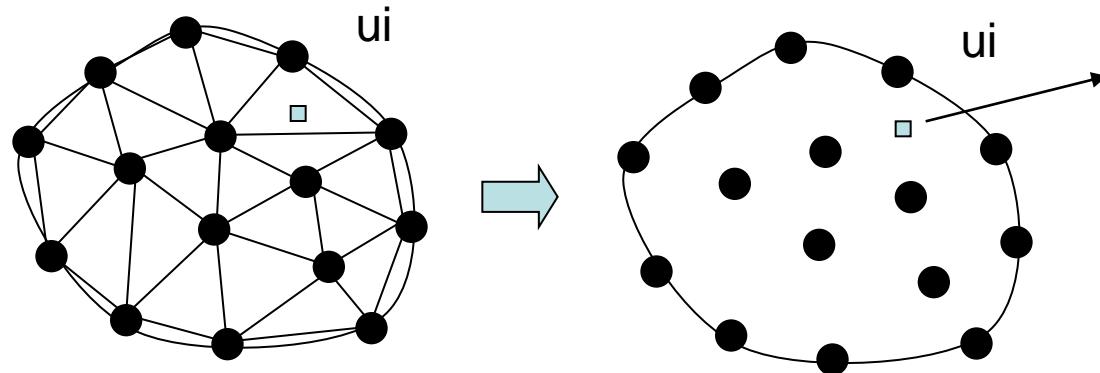
$$\mathbf{K}^e \mathbf{q}^e = \mathbf{F}^e$$

avec

$$\mathbf{K}^e = \int_{\Omega^e} \mathbf{B}^T \mathbf{C} \mathbf{B} d\Omega , \quad \mathbf{F}^e = \int_{\partial \Omega_F^e} \mathbf{N}^T \mathbf{F} d\Gamma + \int_{\Omega^e} \mathbf{N}^T \mathbf{f} d\Omega.$$

# Les méthodes sans maillage

Comment se passer du maillage ?



$$u^h(x) = \sum_{i=1}^n N_i(x)u_i ?$$

Méthode de Galerkin

# La méthode SPH [Lucy 77, Monaghan 82]

Produit de convolution

$$(f * g)(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x - y)g(y)dy = \int_{-\infty}^{+\infty} g(x - y)f(y)dy$$

On peut représenter une fonction sous la forme

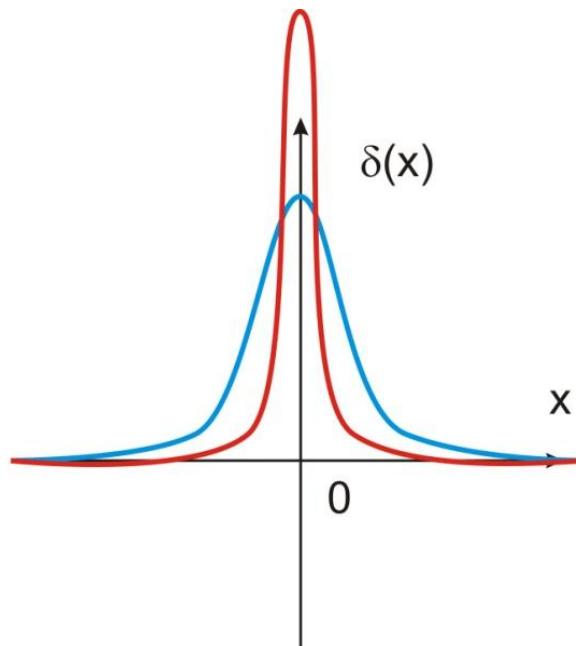
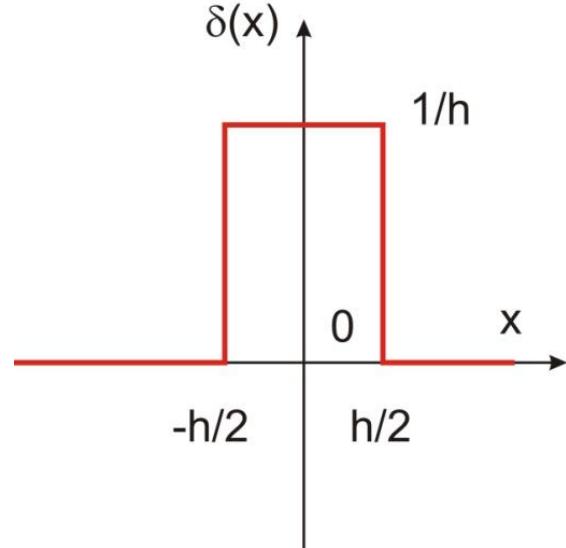
$$f(x) = (f * \delta)(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x - y)\delta(y)dy$$

# La méthode SPH [Lucy 77, Monaghan 82]

Fonction de Dirac

$$\delta(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \delta_h(x)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) dx = 1$$



$$\delta_h(x) = \begin{cases} 1/(2 * h) & \text{si } x > -h/2 \text{ et } x < h/2 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

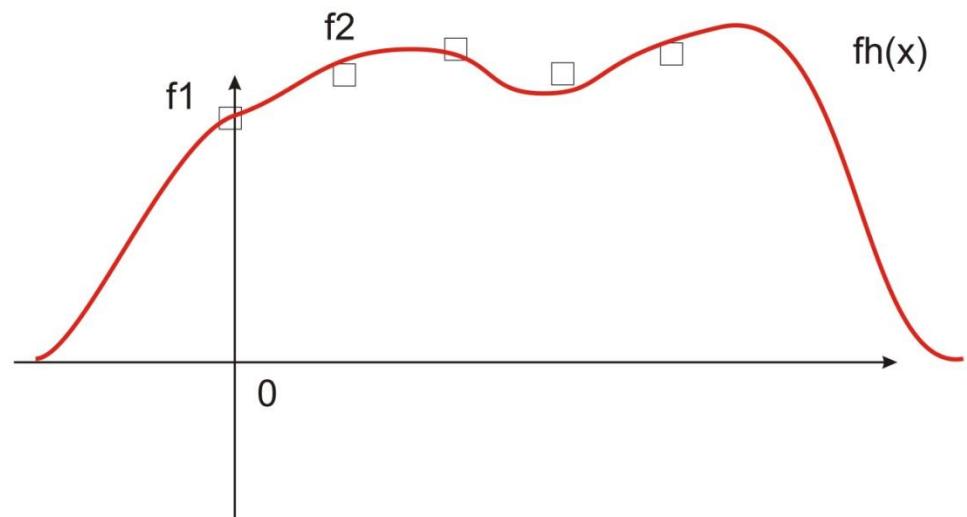
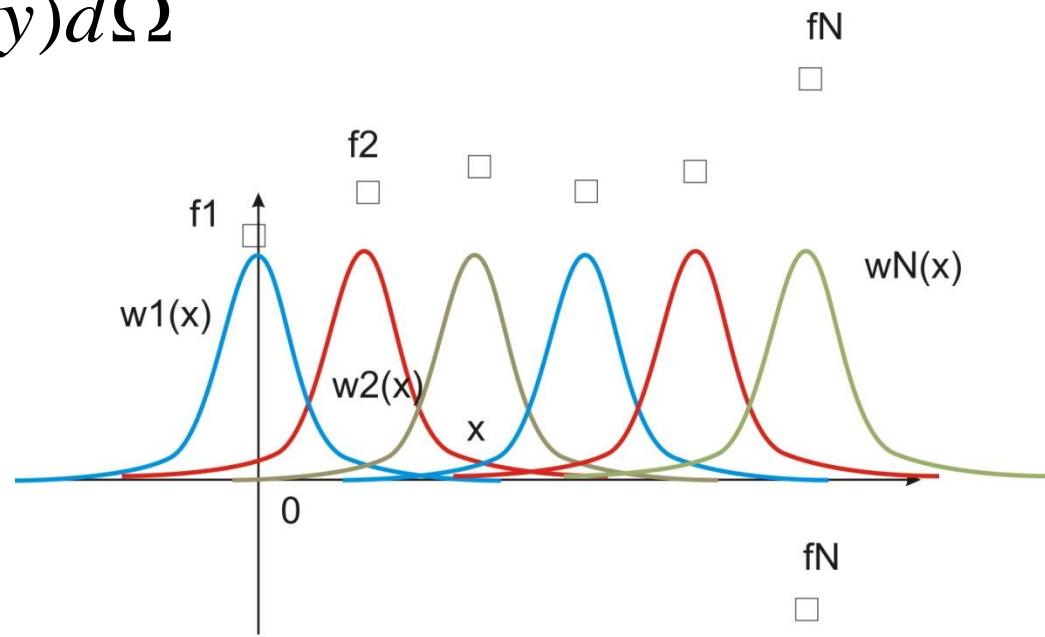
$$\delta_h(x) = \frac{1}{h\sqrt{\pi}} e^{-x^2/h^2}$$

Idée : utiliser des fonctions de delta Dirac « régularisées » appelées fonctions poids pour approximer une fonction décrite à partir de valeurs discrètes

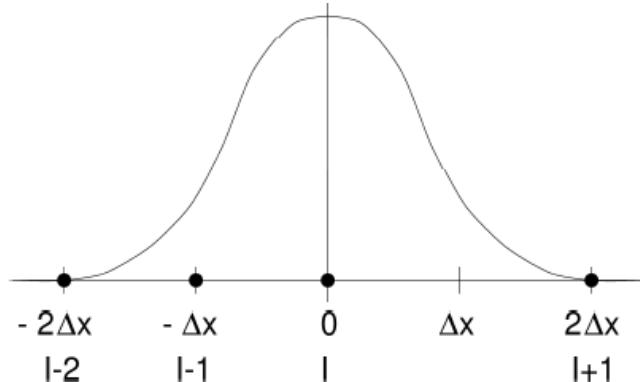
$$f^h(x) = \int_{\Omega} w(x-y) f(y) d\Omega$$

$$f^h(x) = \sum_i w^i(x) f_i$$

$$\int_{\Omega} w(x) d\Omega = 1$$



# La méthode SPH [Lucy 77, Monaghan 82]



## Exemples de fonction poids

exponential:  $w(\bar{s}) = \begin{cases} e^{-(\bar{s}/\alpha)^2} & \text{for } \bar{s} \leq 1 \\ 0 & \text{for } \bar{s} > 1 \end{cases} \quad \mathbf{s} = \| \mathbf{x} - \mathbf{y} \|$

cubic spline:  $w(\bar{s}) = \begin{cases} \frac{2}{3} - 4\bar{s}^2 + 4\bar{s}^3 & \text{for } \bar{s} \leq \frac{1}{2} \\ \frac{4}{3} - 4\bar{s} + 4\bar{s}^2 - \frac{4}{3}\bar{s}^3 & \text{for } \frac{1}{2} < \bar{s} \leq 1 \\ 0 & \text{for } \bar{s} > 1 \end{cases}$

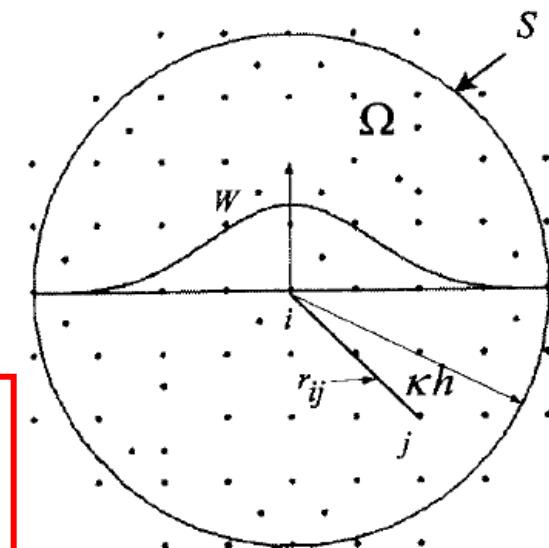
quartic spline:  $w(\bar{s}) = \begin{cases} 1 - 6\bar{s}^2 + 8\bar{s}^3 - 3\bar{s}^4 & \text{for } \bar{s} \leq 1 \\ 0 & \text{for } \bar{s} > 1 \end{cases}$

# Approximation SPH

- Approximation de type particules

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}) &= \int_{\Omega} f(\mathbf{x}') W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' \\ &\approx \sum_{j=1}^N f(\mathbf{x}_j) W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j, h) \Delta V_j \end{aligned}$$

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} f(\mathbf{x}_j) W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j, h)$$



# Approximation SPH

- Représentation des dérivées

$$\langle \nabla \cdot f(\mathbf{x}) \rangle = \int_{\Omega} [\nabla \cdot f(\mathbf{x}')] W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}'$$

$$[\nabla \cdot f(\mathbf{x}')] W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) =$$

$$\nabla \cdot [f(\mathbf{x}') W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)] - f(\mathbf{x}') \cdot \nabla W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)$$

$$\langle \nabla \cdot f(\mathbf{x}) \rangle =$$

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot [f(\mathbf{x}') W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)] d\mathbf{x}' - \int_{\Omega} f(\mathbf{x}') \cdot \nabla W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}'$$

# Approximation SPH

- Représentation des dérivées

$$\langle \nabla \cdot f(\mathbf{x}) \rangle =$$

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot [f(\mathbf{x}') W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)] d\mathbf{x}' - \int_{\Omega} f(\mathbf{x}') \cdot \nabla W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}'$$

Théorème de la divergence

$$\langle \nabla \cdot f(\mathbf{x}) \rangle = \int_S f(\mathbf{x}') W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) \cdot \vec{n} dS - \int_{\Omega} f(\mathbf{x}') \cdot \nabla W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}'$$

W est à support compact :

$$\boxed{\langle \nabla \cdot f(\mathbf{x}) \rangle = - \int_{\Omega} f(\mathbf{x}') \cdot \nabla W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}'}$$

# La méthode SPH [Lucy 77, Monaghan 82]

$$u^h(\mathbf{x}) = \int_{\Omega} w(\mathbf{x} - \mathbf{y}, h) u(\mathbf{y}) d\Omega_{\mathbf{y}},$$

Evaluation numérique de l'intégrale

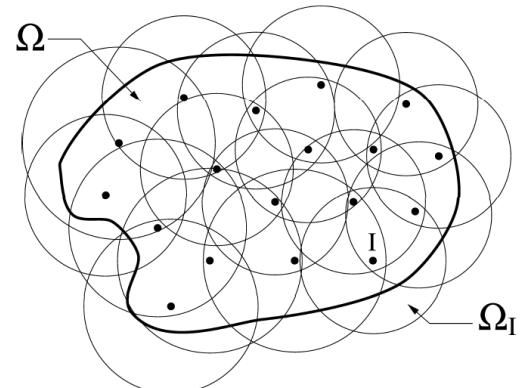
$$\rightarrow u^h(\mathbf{x}) = \sum_I w(\mathbf{x} - \mathbf{x}_I) u_I \Delta V_I$$

**Difficulté 1 : Quelle définition de  $\Delta V_I$  ??**

$$\rightarrow u^h(\mathbf{x}) = \sum_I \phi_I(\mathbf{x}) u_I$$

$$\phi_I(\mathbf{x}) = w(\mathbf{x} - \mathbf{x}_I) \Delta V_I.$$

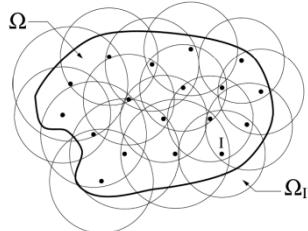
Fonctions de forme SPH



# La méthode SPH [Lucy 77, Monaghan 82]

Les points clé de la méthode

- 1) Le domaine est représenté par une ensemble de particules distribuées arbitrairement



- 2) Le champ approximé est représenté par un produit de convolution

$$u^h(\mathbf{x}) = \int_{\Omega} w(\mathbf{x} - \mathbf{y}, h) u(\mathbf{y}) d\Omega_{\mathbf{y}},$$

- 3) Une représentation discrète du produit de convolution est utilisée

$$u^h(\mathbf{x}) = \sum_I w(\mathbf{x} - \mathbf{x}_I) u_I \Delta V_I$$

- 4) L'approximation de type particule est calculée à chaque pas de temps, pour chaque distribution spatiale des particules

- 5) L'approximation discrète est appliquée aux EDP pour produire un système discret d'équations différentielles par rapport au temps

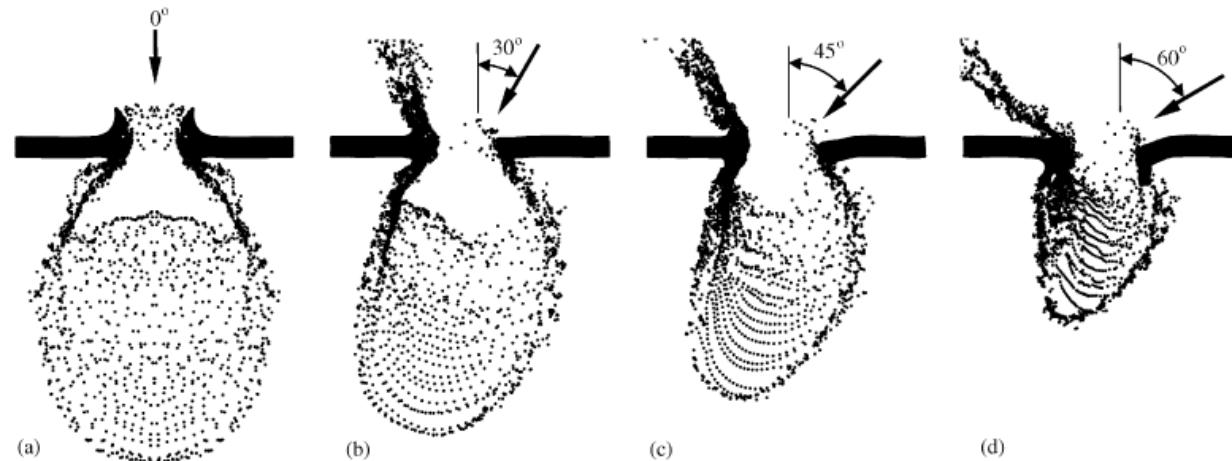
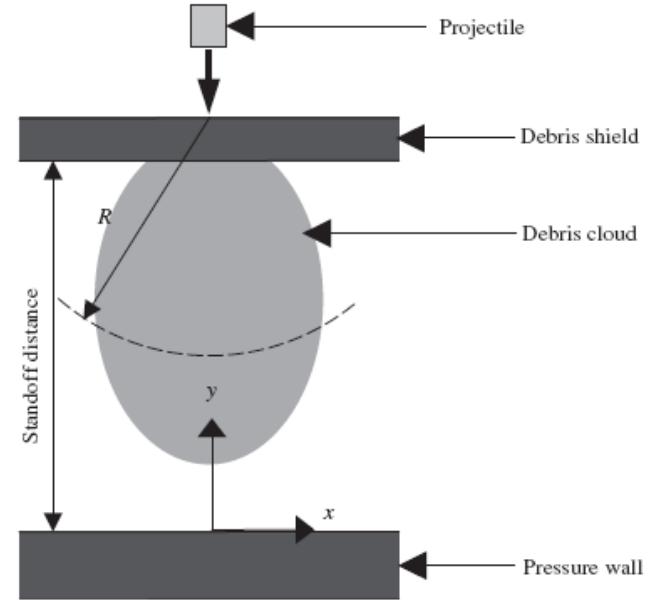
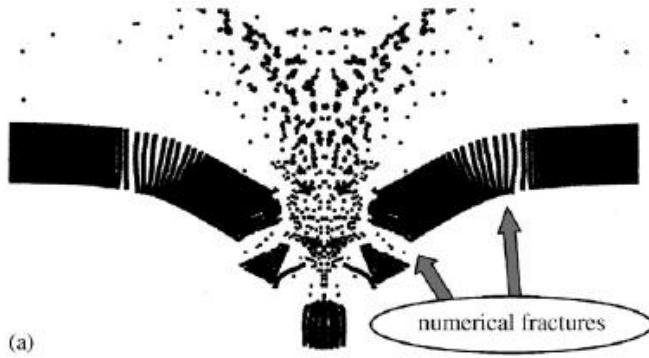
- 6) Les équations discrètes sont résolues par un schéma de discréétisation en temps explicite

# La méthode SPH [Lucy 77, Monaghan 82]

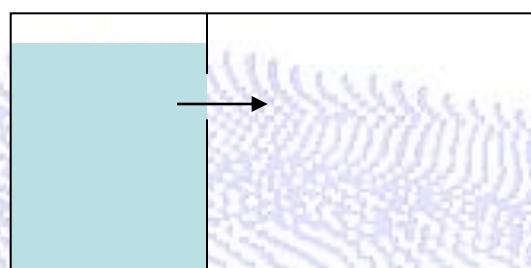
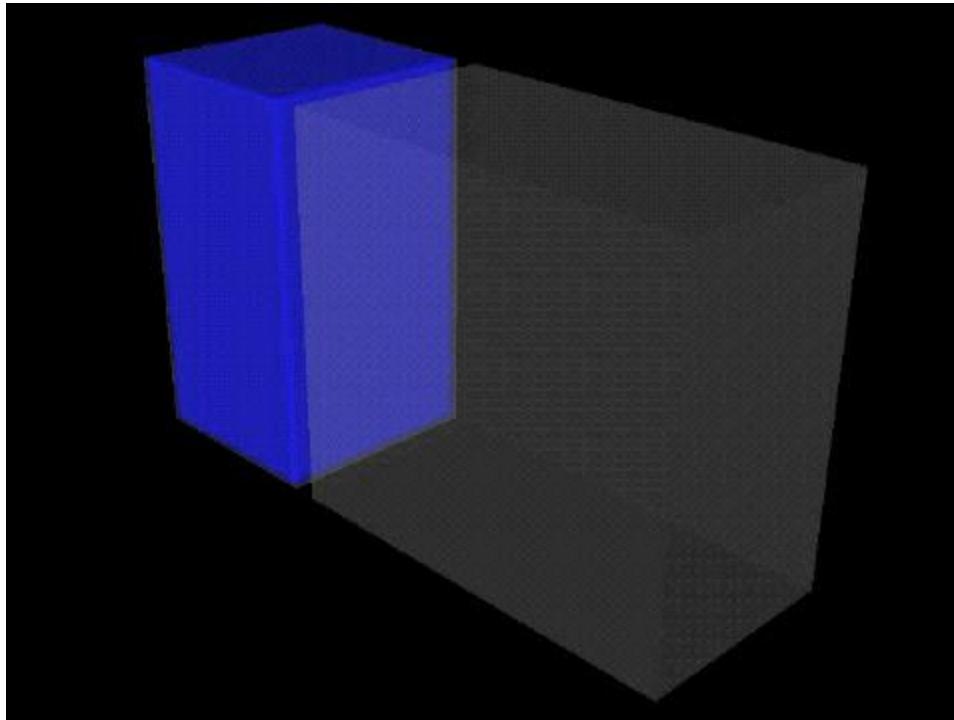
**Difficulté 2** : l'approximation SPH ne peut reproduire exactement que des champs constants, pas linéaire

**Difficulté 3** : imposition des conditions aux limites (l'approximation n'est pas interpolante, l'influence des nœuds intérieurs n'est pas nulle)

# Exemples : simulations d'impacts



# Animation: Exemple fuite d'un réservoir



# La méthode des éléments diffus

[Nayroles, Touzot, Villon, 1992]

Approximation de type moindres carrés mobiles :

$$\mathbf{u}^h(\mathbf{x}) = \mathbf{p}^T(\mathbf{x})\mathbf{a}(\mathbf{x})$$

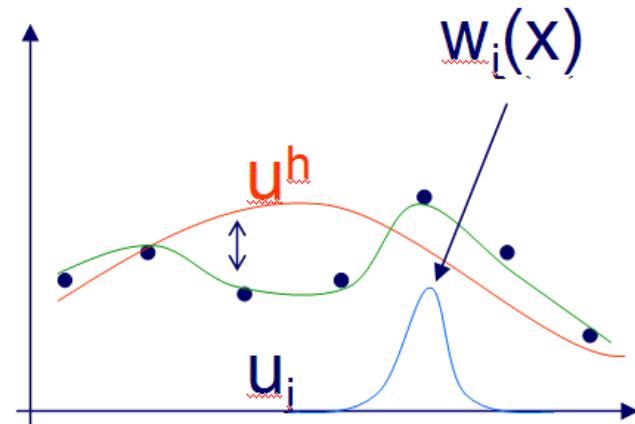
$$\text{ex : } \mathbf{p}^T(\mathbf{x}) = [1, x, y, z]$$

On peut prendre un polynôme d'ordre N, à condition qu'un point d'intégration soit couvert par le support de N noeuds

Les coefficients  $a_i$  sont obtenus en chaque point  $x$  en minimisant :

$$J = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n w_i(\mathbf{x}) \underbrace{\left[ \mathbf{p}^T(\mathbf{x})\mathbf{a}(\mathbf{x}) - u_i \right]^2}_{\mathbf{u}^h(\mathbf{x})}$$

Fonction poids



# La méthode des éléments diffus

$$\underset{\mathbf{a}(\mathbf{x})}{\text{Min}} \quad J = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n w_i(\mathbf{x}) [\mathbf{p}^T(\mathbf{x})\mathbf{a}(\mathbf{x}) - u_i]^2$$



$$\mathbf{u}^h(\mathbf{x}) = \mathbf{p}^T(\mathbf{x})\mathbf{a}(\mathbf{x})$$

Système linéaire

$$\boxed{\mathbf{A}\mathbf{a} = \mathbf{B}\mathbf{u}}$$

$$\frac{\partial u^h(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial p^T(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} a(\mathbf{x})$$

Dérivée « diffuse »

$$A_{jk} = \sum_{i=1}^n w_i(\mathbf{x}) p_j(\mathbf{x}_i) p_k(\mathbf{x}_i)$$

$$\phi(\mathbf{x}) = \mathbf{p}^T(\mathbf{x}) \mathbf{A}^{-1} \mathbf{B}$$

$$B_{ij} = w_i(\mathbf{x}) p_j(\mathbf{x}_i)$$

$$\frac{\partial \phi(x)}{\partial x_i} = \frac{\partial p^T(x)}{\partial x_i} A^{-1} B$$

Fonctions de forme DEM et dérivées

# La méthode Element Free Galerkin (EFG) [Belytschko et al. 94]

Element Free Galerkin [Belytschko 94]:

Même démarche, seules les dérivées changent (dérivées complètes)

$$\frac{\partial u^h(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial p^T(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} a(\mathbf{x}) + \boxed{p^T(\mathbf{x}) \frac{\partial a(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}}}$$

La modification de la méthode EFG

$$\frac{\partial \Psi(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial \mathbf{p}^T(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{A}^{-1}(\mathbf{x}) \mathbf{B}(\mathbf{x}) + \mathbf{p}^T(\mathbf{x}) \mathbf{A}^{-1}(\mathbf{x}) \frac{\partial \mathbf{B}(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} - \mathbf{p}^T(\mathbf{x}) \mathbf{A}^{-1}(\mathbf{x}) \frac{\partial \mathbf{A}(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{A}^{-1} \mathbf{B}(\mathbf{x})$$

Dérivées des fonctions de forme

Conclusion : on peut reproduire un polynôme d'ordre quelconque (avantage par rapport à SPH), mêmes problèmes de conditions aux limites

# La méthode RKPM [Liu et al. 1995]

Objectif : modifier SPH pour obtenir une consistance d'ordre supérieur (linéaire, quadratique)+ application dans les formes faibles

$$\text{SPH : } u^K(\mathbf{x}) = \int_{\Omega} \Phi_a(\mathbf{x} - \mathbf{y}) u(\mathbf{y}) \, d\mathbf{y},$$

$$\int_{\Omega} \Phi_a(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \, d\mathbf{y} = 1$$

$$u^K(\mathbf{x}) \rightarrow u(\mathbf{x}) \quad \text{as } a \rightarrow 0.$$

# La méthode RKPM [Liu et al. 1995]

$$u^R(\mathbf{x}) = \int_{\Omega} \underbrace{C(\mathbf{x}; \mathbf{x} - \mathbf{y})}_{\text{Fonction de correction}} \Phi_a(\mathbf{x} - \mathbf{y}) u(\mathbf{y}) \, d\mathbf{y}$$



Fonction de correction

$$C(\mathbf{x}; \mathbf{x} - \mathbf{y}) = \mathbf{b}^T(\mathbf{x}) \mathbf{H}(\mathbf{x} - \mathbf{y})$$

Fonction à reproduire :

exemple : monômes

jusqu'à l'ordre N

$$\mathbf{H}^T(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = [1, x_1 - y_1, x_2 - y_2, x_3 - y_3, (x_1 - y_1)^2, \dots, (x_3 - y_3)^N],$$

$$\mathbf{b}^T(\mathbf{x}) = [b_0(\mathbf{x}), b_1(\mathbf{x}), \dots]$$

Déterminés en imposant les N conditions de consistance

# La méthode RKPM [Liu et al. 1995]

Si l'on choisit une consistance (reproduction d'un polynôme donné), et des fonctions poids identiques

**Les méthodes EFG et RKPM produisent des fonctions de forme identiques !**

$$\mathbf{u}^h(\mathbf{x}) = \mathbf{p}^T(\mathbf{x})\mathbf{a}(\mathbf{x}) \quad = \quad u^h(\mathbf{x}) = \sum_{I=1}^{NP} \Psi_I(\mathbf{x}) \mathbf{d}_I$$
$$\boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}) = \mathbf{p}^T(\mathbf{x})\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B} \quad \quad \quad \Psi_I(\mathbf{x}) = C(\mathbf{x}; \mathbf{x} - \mathbf{x}_I) \Phi_a(\mathbf{x} - \mathbf{x}_I)$$

EFG

RKPM

Pour ces deux méthodes : on peut reproduire un polynôme d'ordre quelconque (avantage par rapport à SPH), Mêmes problèmes de conditions aux limites

# Difficultés des méthodes « MLS »

1) Conditions aux limites difficiles à imposer : les fonctions de forme ne vérifient pas la propriété du delta de Kronecker

$$\phi_i(\mathbf{x}_j) = \delta_{ij} \quad u^h(x_i) \neq u_i$$

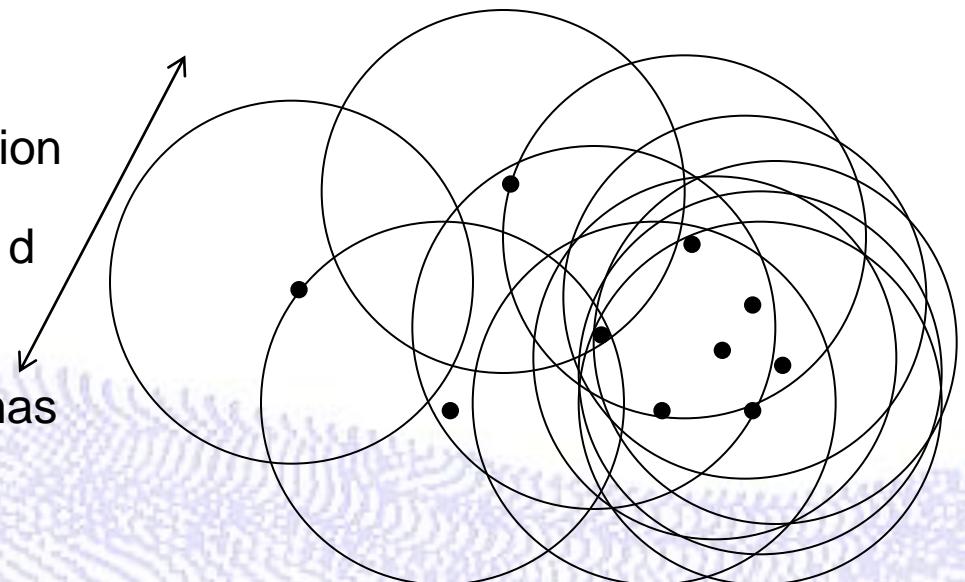
De plus l'influence des nœuds intérieurs ne s'annule pas sur le bord

2) Le choix de la taille du support des fonctions de forme est délicat :

- Trop grand : qualité médiocre
- Trop petit : instabilité de la solution

3) Intégration numérique :

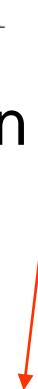
Les fonctions de forme ne sont pas polynomiales : pas de schémas d'intégration « exacts »



# La méthode des éléments naturels (NEM) [Traversoni 1994, Sambridge et Braun, 1995]

$$\mathbf{u}^h(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n (\phi_i(\mathbf{x})) \mathbf{u}_i$$

Approximation de type  
Galerkin



Fonctions  
de forme  
NEM

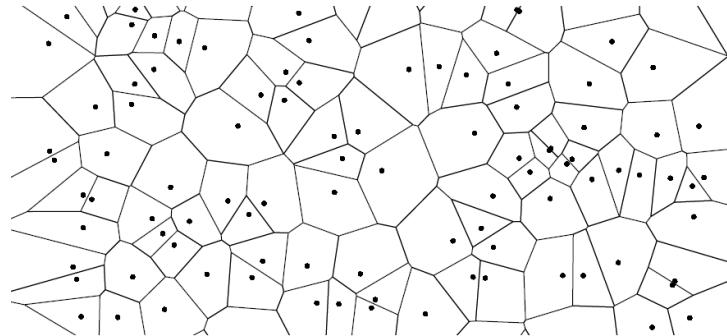
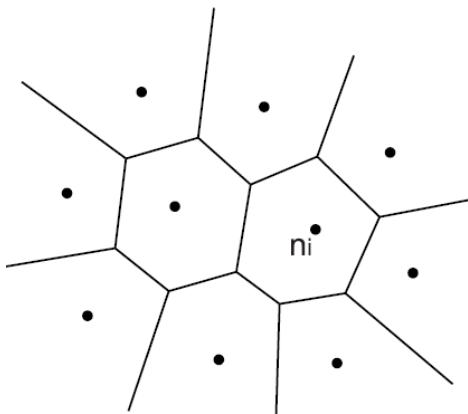
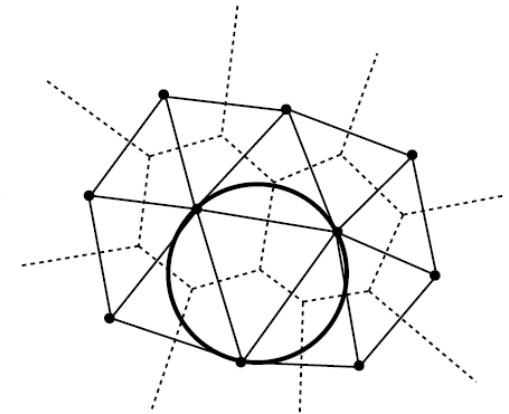


Diagramme de Voronoï d'un ensemble de points



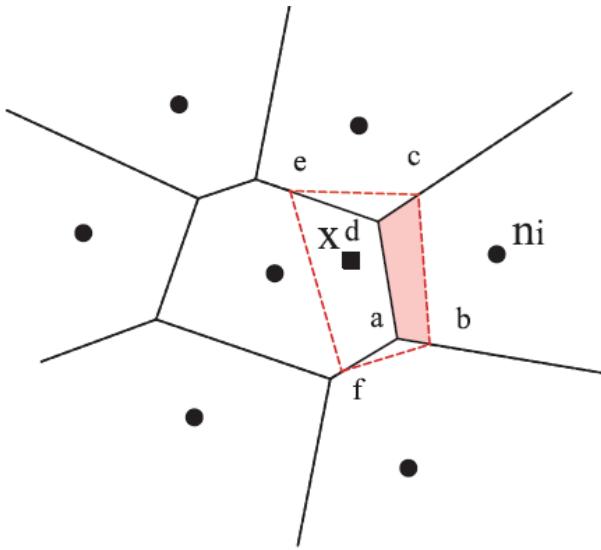
(a)



(b)

Diagramme de Voronoi et triangulation de Delaunay

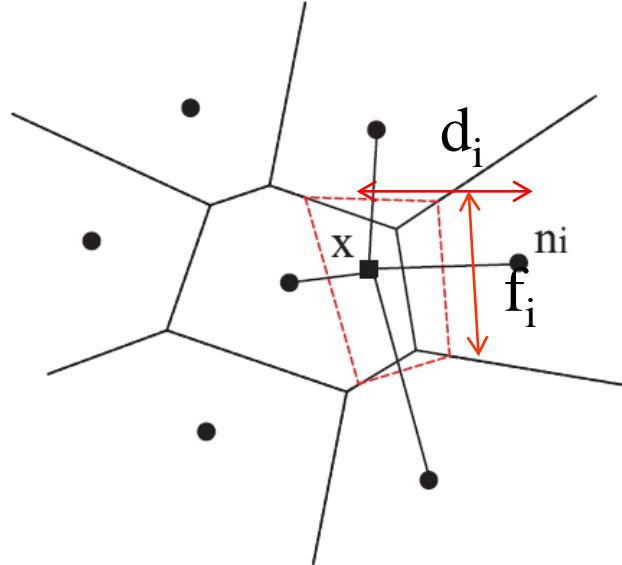
Une méthode « presque » sans maillage : la qualité de la solution ne dépend pas de l'arrangement spatial des nœuds, mais un maillage (diagramme de Voronoi) est nécessaire pour calculer les fonctions de forme



### Fonctions de forme NEM [Sibson 80]

$$\phi_i(\mathbf{x}) = \frac{\kappa_{xi}}{\kappa_x} , \quad \kappa_x = \sum_{i=1}^n \kappa_{xi}$$

$$\phi_i(\mathbf{x}) = \frac{\text{Aire}(abcd)}{\text{Aire}(bcef)}$$



### Fonctions de forme NEM « Non-Sibsonniennes » [Belikov 97]

$$\phi_i(\mathbf{x}) = \frac{\alpha_i(\mathbf{x})}{\sum_{j=1}^n \alpha_j(\mathbf{x})}, \quad \alpha_i(\mathbf{x}) = \frac{f_i(\mathbf{x})}{d_i(\mathbf{x})}$$

# Propriétés des fonctions de forme NEM

## [Sukumar 98]

1) Propriété du delta Kronecker

$$\phi_i(\mathbf{x}_j) = \delta_{ij}$$

2) Partition de l'unité

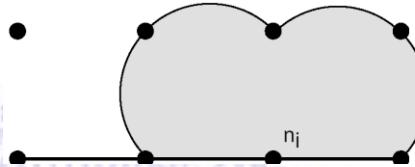
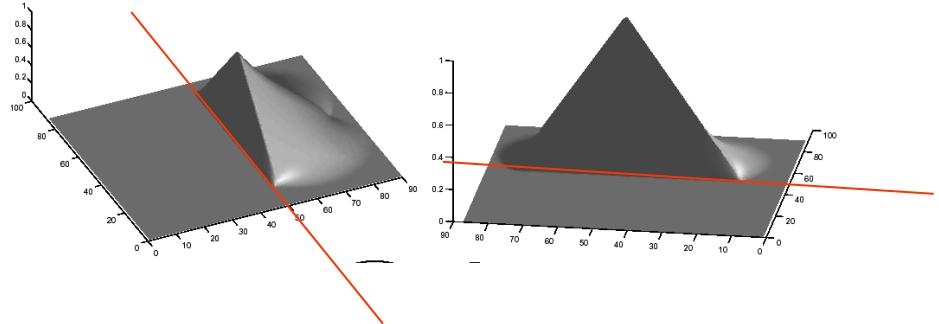
$$\sum_{i=1}^n \phi_i(\mathbf{x}) = 1 \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega$$

3) Consistance linéaire

$$\mathbf{x} = \sum_{i=1}^n \phi_i(\mathbf{x}) \mathbf{x}_i$$

4) Continuité  $C^\infty$  sauf aux nœuds ( $C^0$ ) et sur les cercles de Delaunay ( $C^1$ )

5) Stricte linéarité sur les bords du domaine convexe

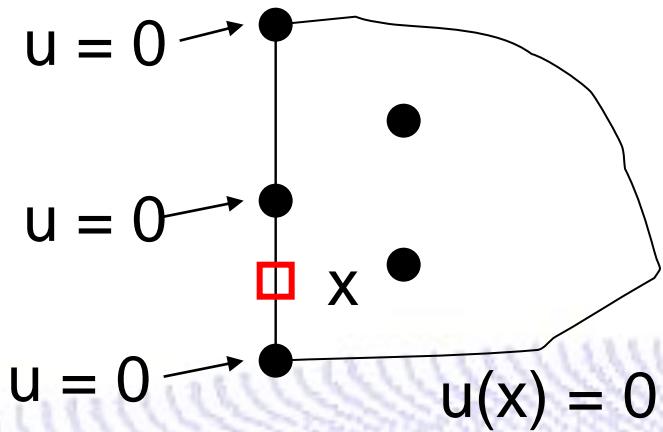


# La méthode des éléments naturels (NEM)

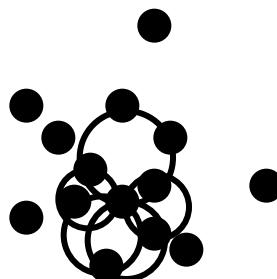
Avantage par rapport aux autres méthodes sans maillage

$$\phi_i(\mathbf{x}_j) = \delta_{ij}$$

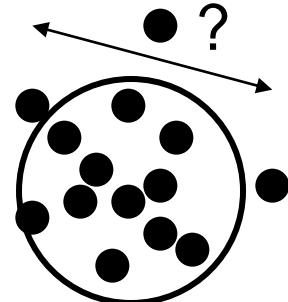
+ linéarité sur les bords convexes



2) Support (domaine d'influence) des fonctions de forme «auto-adaptatif »



NEM

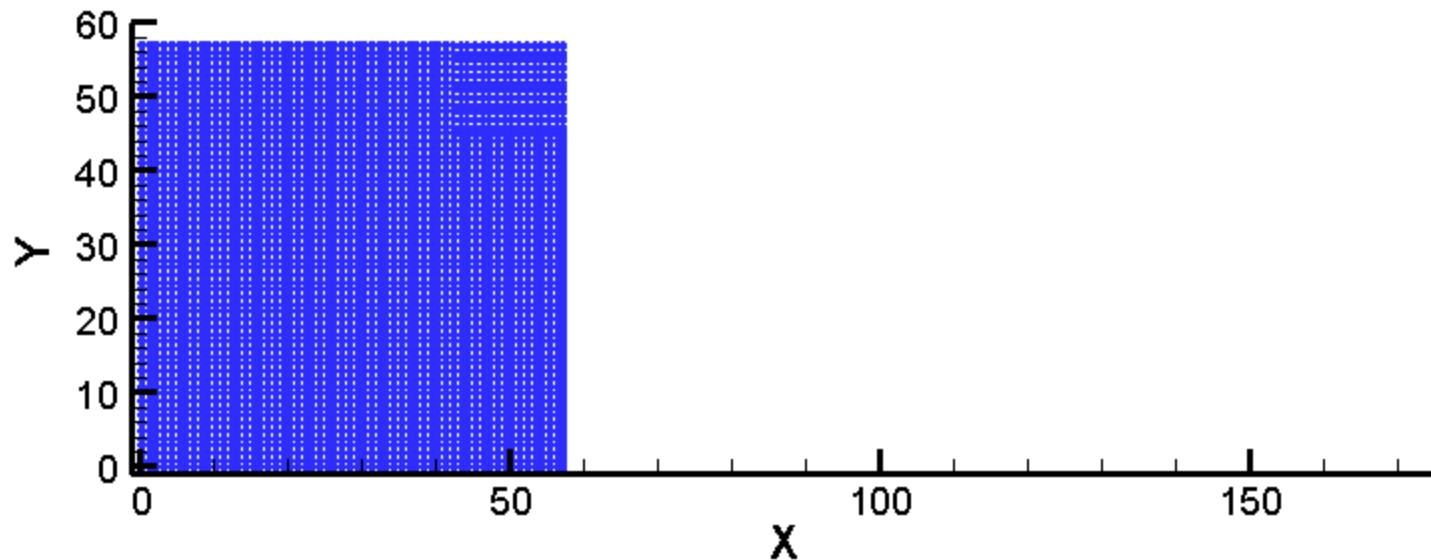


Moindres carrés mobiles

Inconvénients :

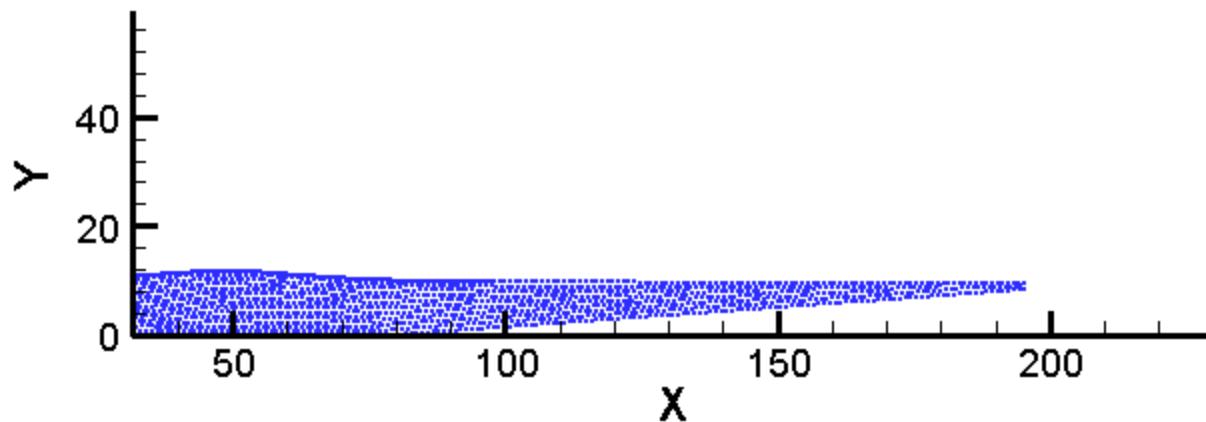
- Nécessité d'un diagramme de Voronoi
- Intégration numérique
- Approximations d'ordre 1 seulement
- Temps de calcul des fonctions de forme

# La méthode des éléments naturels (NEM)



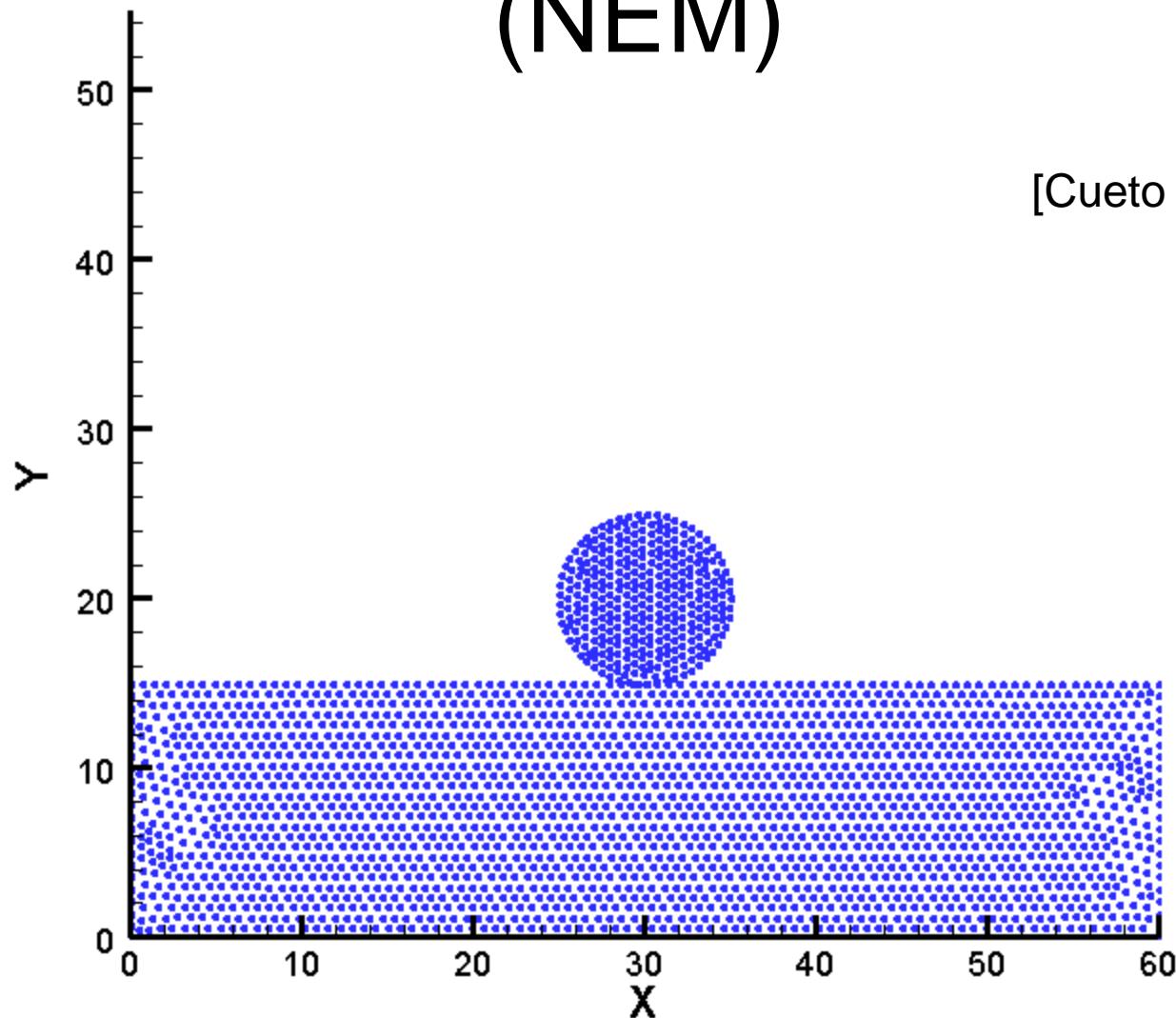
Problème de fluide avec surface libre  
[Cueto et al. 2004]

# La méthode des éléments naturels (NEM)



[Cueto et al. 2004]

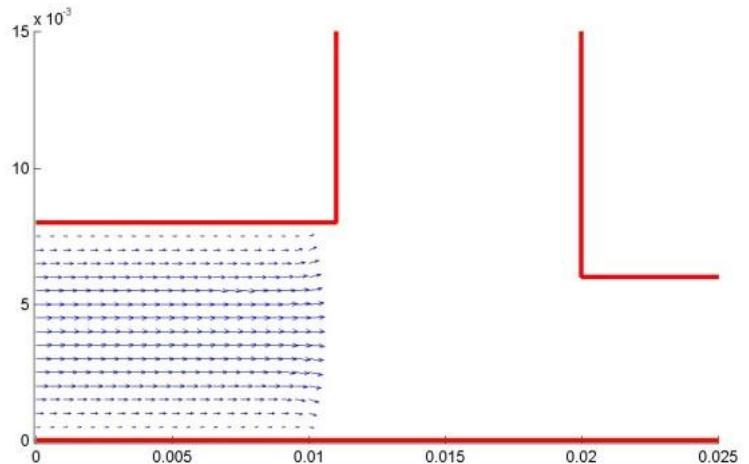
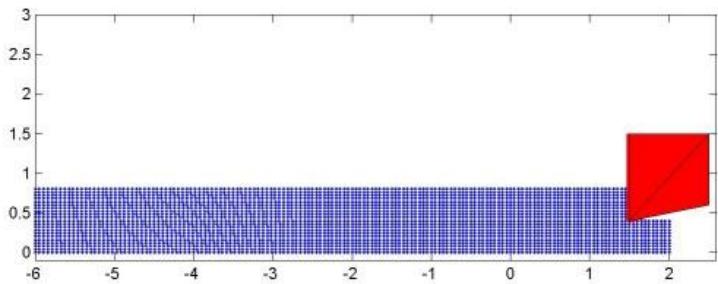
# La méthode des éléments naturels (NEM)



[Cueto et al. 2004]

# La méthode des éléments naturels (NEM)

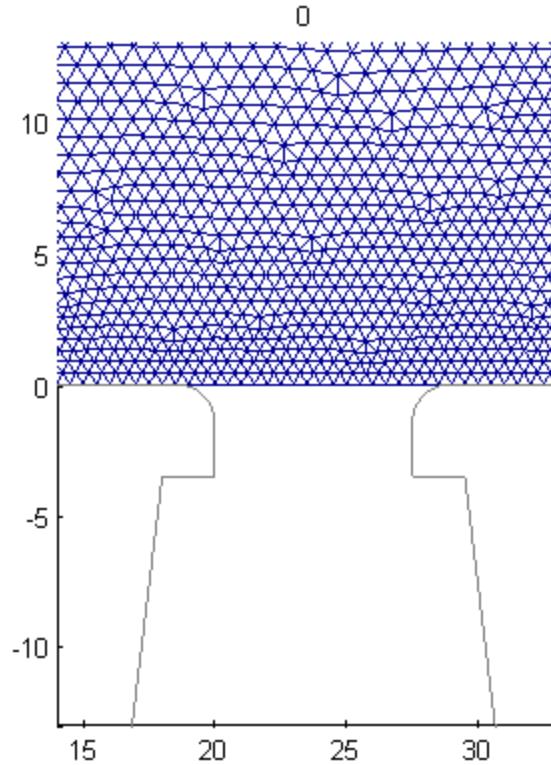
Problèmes de mise en forme : grandes déformations



[Chinesta et al. 2004]

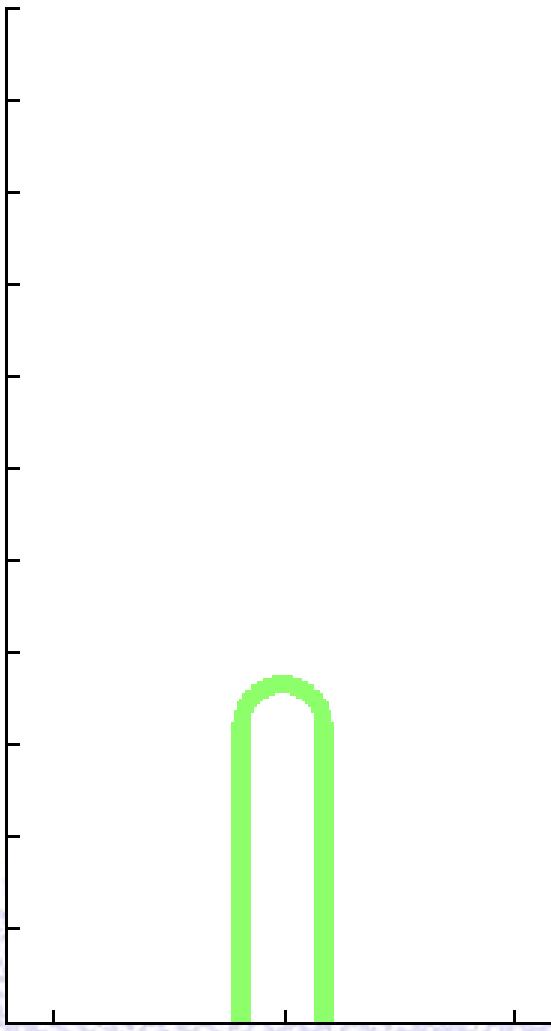
Injection [Cueto et al. 2004]

# La méthode des éléments naturels (NEM)



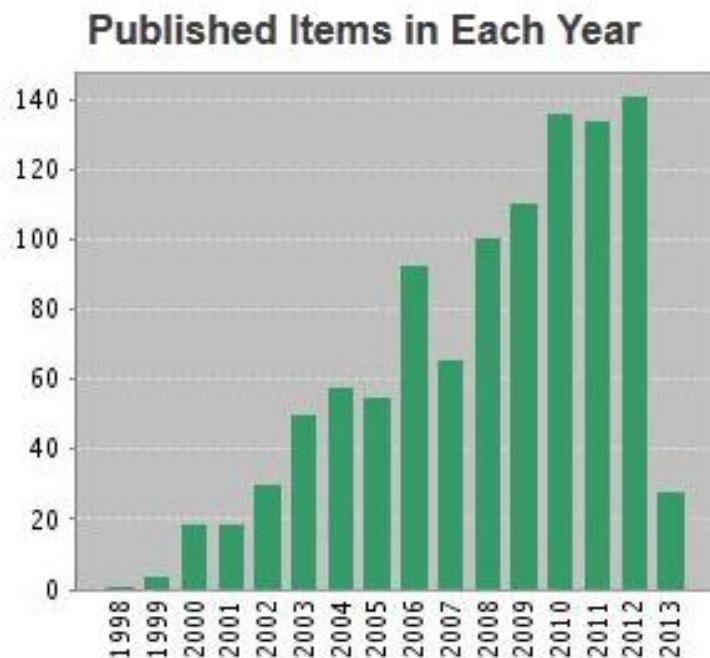
Extrusion [Cueto et al. 2004]

# La méthode des éléments naturels (NEM)



Soufflage de bouteilles [Cosson et al. 2009]

# Meshfree methods

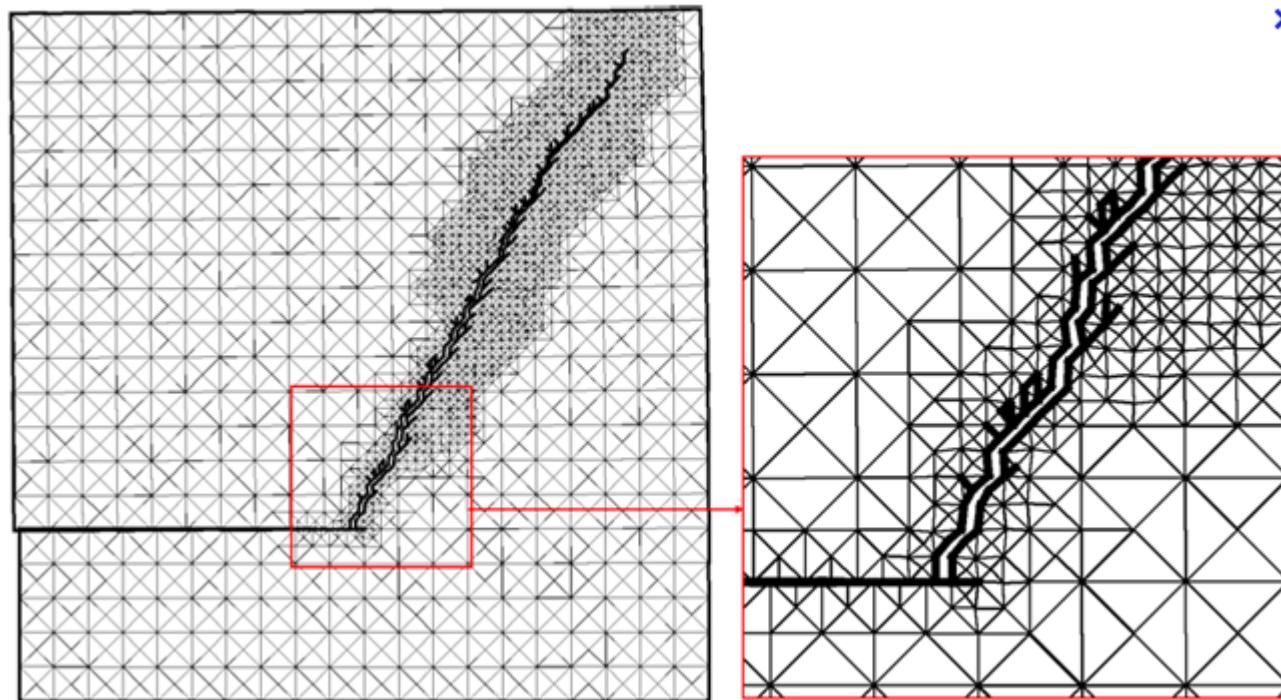


Articles publiés sur les méthodes sans maillage (ISI WEB OF SCIENCE)  
(environ **3300 articles**)

# Méthodes avancées avec maillage

- Méthode de partition de l'unité/XFEM
- Méthode d'éléments finis cohésifs

# Propagation de fissures : problématique



Nécessité de remaillage en pointe de fissure

# Méthode de partition de l'unité

[Babuška et Melenk 1995]

Idée : enrichir l'approximation avec des fonctions non présentes dans la base

$$u^h(x) = \sum_{i=1}^n N_i(x)u_i + \boxed{\sum_{j=1}^M f_j(x)\alpha_j}$$

Pour conserver une action locale de l'enrichissement

$$u^h(x) = \sum_{i=1}^n N_i(x)u_i + \sum_{i=1}^N N_i(x) \left( \sum_{j=1}^M f_j(x)\alpha_j \right)$$

$$u^h(x) = \sum_{i=1}^n N_i(x)u_i + \sum_{i=1}^n N_i(x)g(x)a_i$$

**PUM**

# La méthode X-FEM

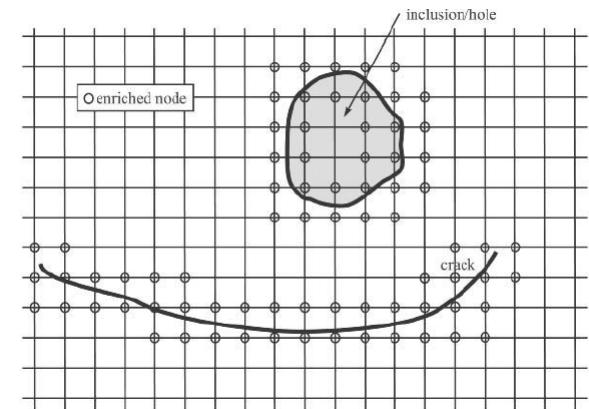
[Belytschko et Black 1999, Moës et al 1999]

X-FEM = PU+FEM+enrichissement discontinu

(+ fonctions singulières en pointe de fissure...)

$$u^h(x) = \sum_{i=1}^n N_i(x)u_i + \sum_{j=1}^M N_j(x)g(x)\alpha_j$$

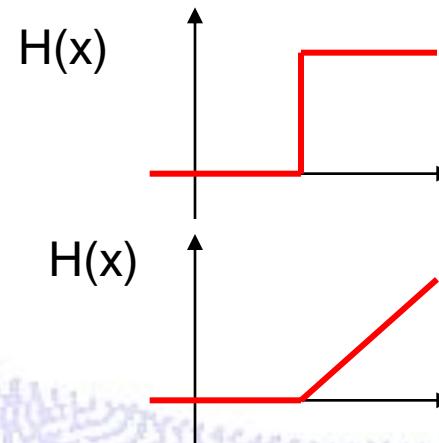
$$= H(x)$$



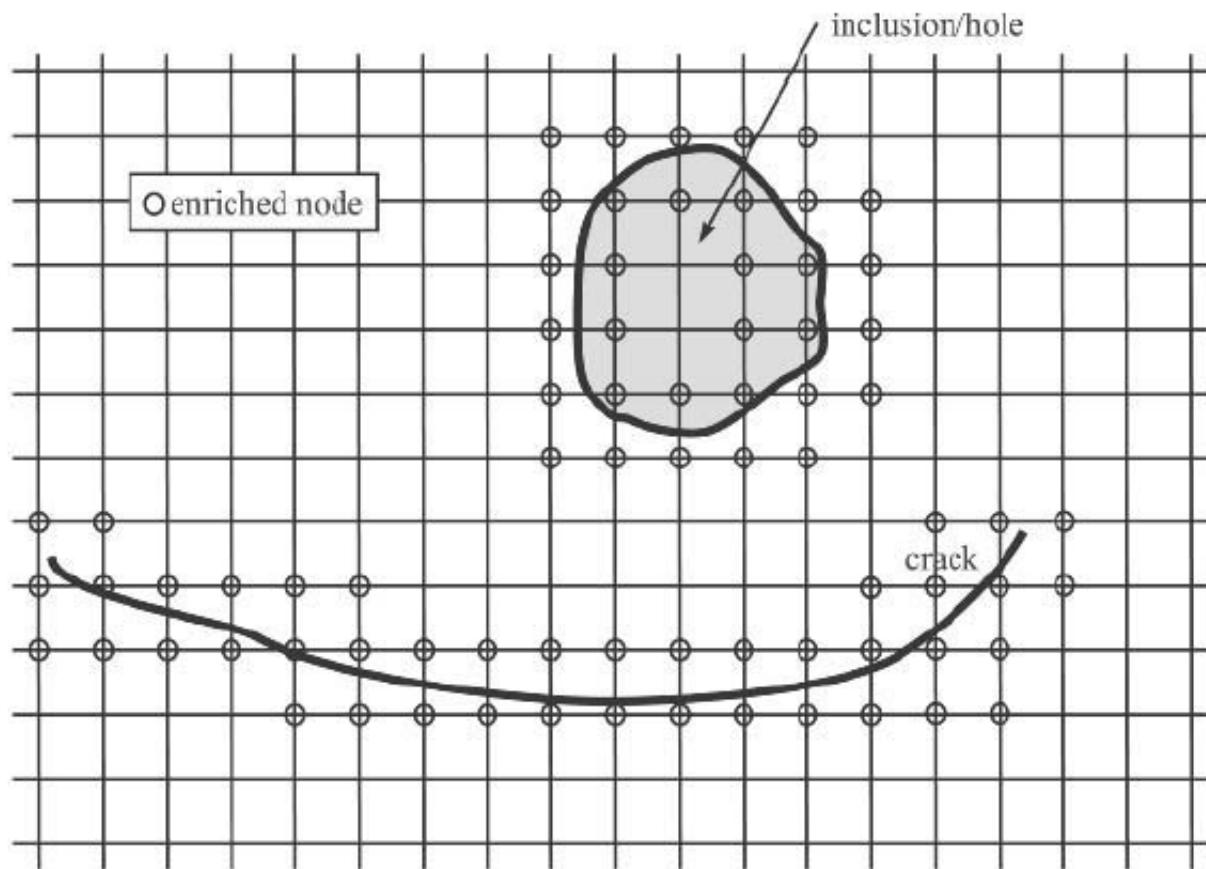
Fonctions de Heaviside ou fonctions « rampes »

Autre modification : enrichissement des seuls nœud dont le support est coupé par la discontinuité

Applications : Fissuration, interfaces....



# La méthode X-FEM



# La méthode X-FEM

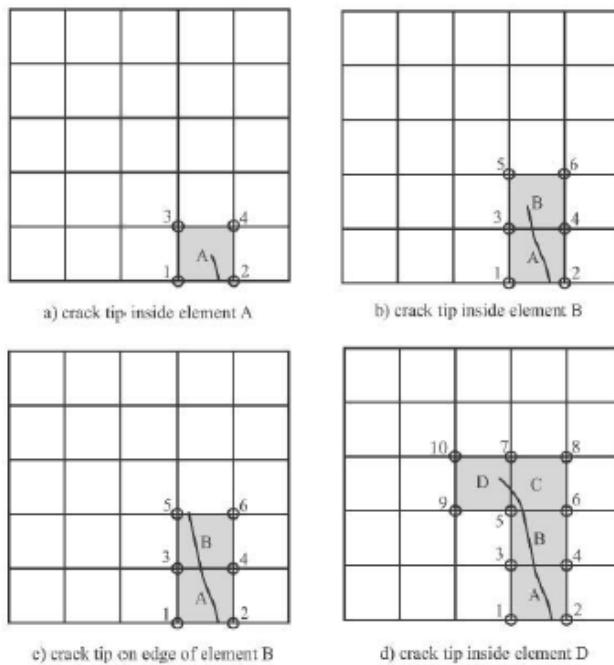
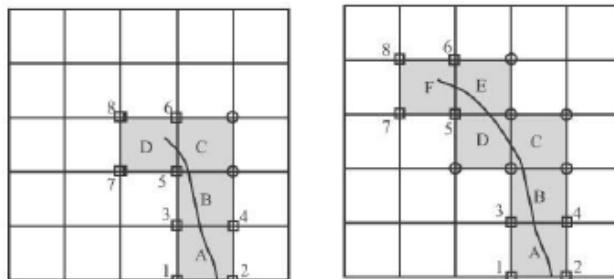
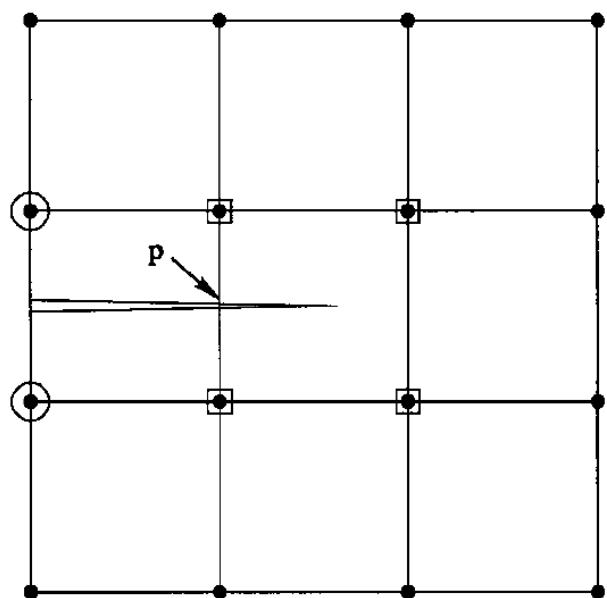


Figure 3.18 Enrichment nodes at different stages of crack propagation.



# La méthode X-FEM

Propagation de fissures [Moës et al. 1999]



- Nœuds enrichis avec des fonctions discontinues
- Nœuds enrichis avec des fonctions singulières

$$\{F_l(r, \theta)\} \equiv \left\{ \sqrt{r} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right), \sqrt{r} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right), \sqrt{r} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \sin(\theta), \sqrt{r} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \sin(\theta) \right\}$$

$$\mathbf{u}^h = \sum_{i \in I} \mathbf{u}_i \phi_i + \sum_{j \in J} \mathbf{b}_j \phi_j H(\mathbf{x}) + \sum_{k \in K} \phi_k \left( \sum_{l=1}^4 \mathbf{c}_k^l F_l(\mathbf{x}) \right)$$

# Partie III

## Une approche XFEM pour la modélisation des matériaux hétérogènes avec énergies de surface et propriétés effectives dépendantes de la taille

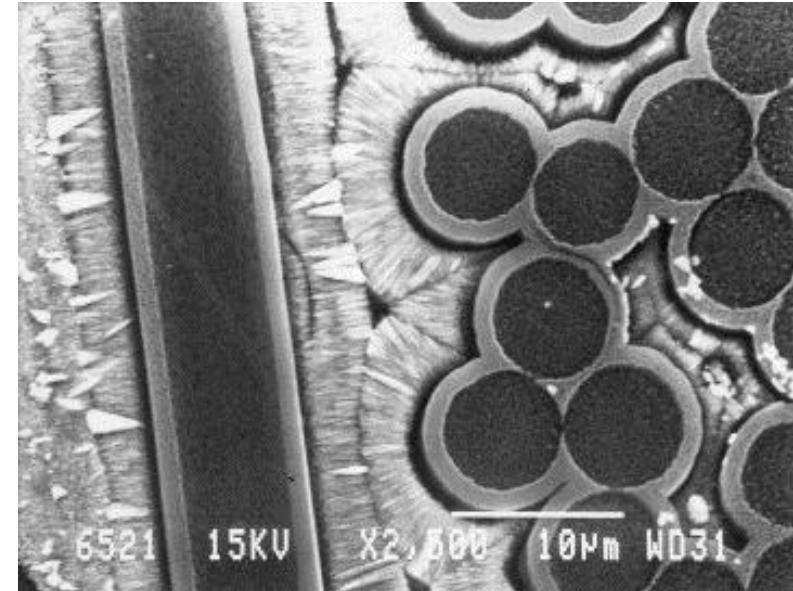
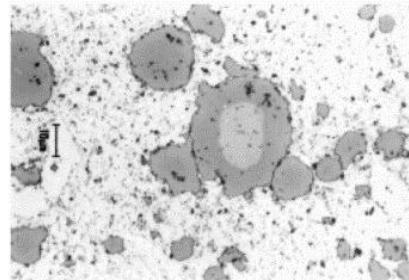
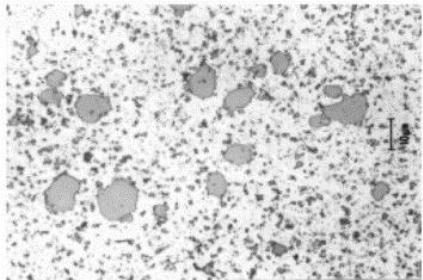
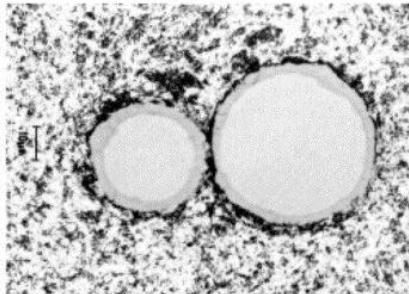
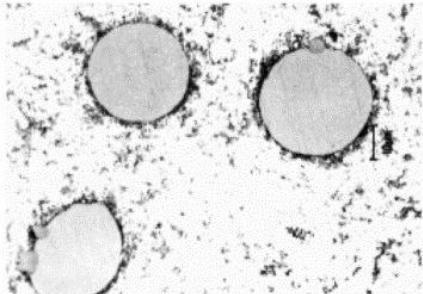
J. Yvonet<sup>(1)</sup>, Q.-C. He<sup>(1)</sup>, E. Monteiro<sup>(2)</sup>, C. Toulemonde<sup>(3)</sup>, J. Sanahuja<sup>(3)</sup>, H. Le Quang<sup>(1)</sup>, Q.-Z. Zhu<sup>(1)</sup>

(1) MSME UMR CNRS 8208, Université Paris-Est, Marne-la-Vallée

(2) PIMM, ENSAM Paris

(3) EDF R&D MMC renardières

# Interphases dans les microstructures

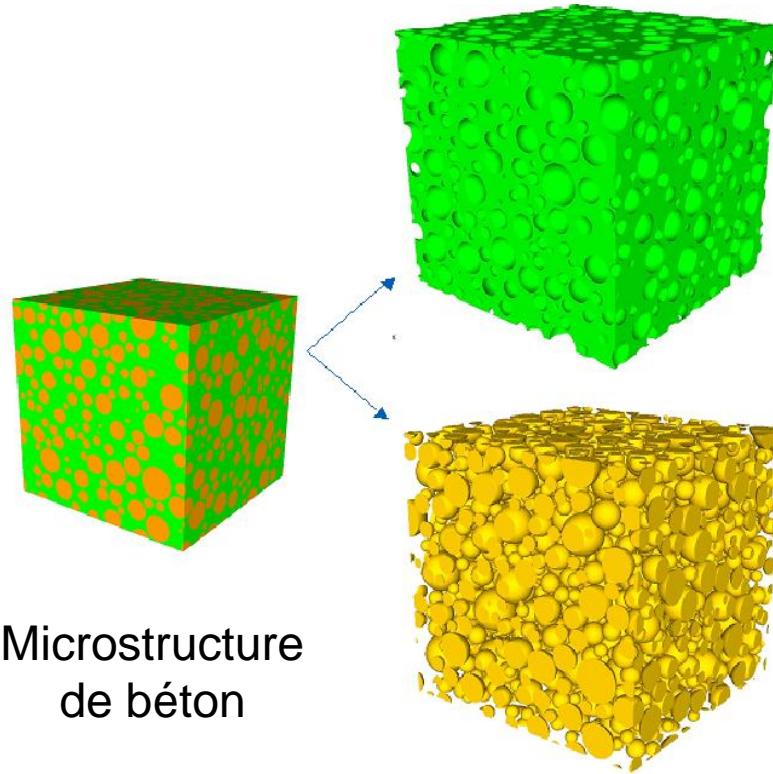


**Composite à matrice Al 2014  
renforcée avec  $(\text{Ni}_3\text{Al})_p$**   
[Torralba et al. , Compos. A, 2002]

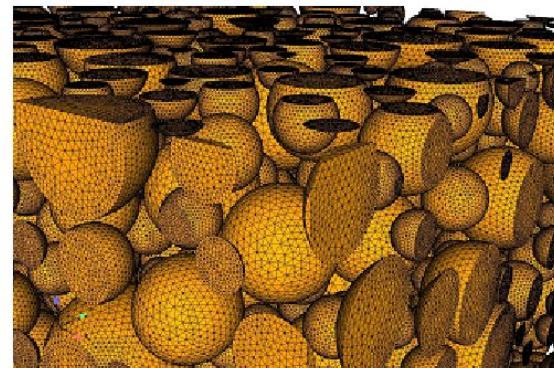
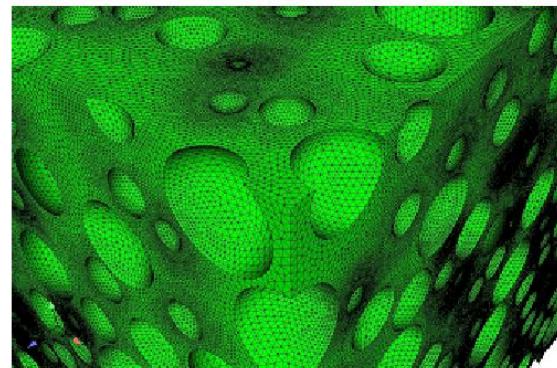
Interphase de Pyrocarbone déposée sur  
fibres de composites 2·5D C<sub>f</sub>–SiC [Boitier  
et al. J. Eur. Ceram. Soc, 1998]

# Modélisation numérique des microstructures avec interphases/énergie de surface

**Problème: description des interfaces pour les microstructures complexes et maillage des interphases**



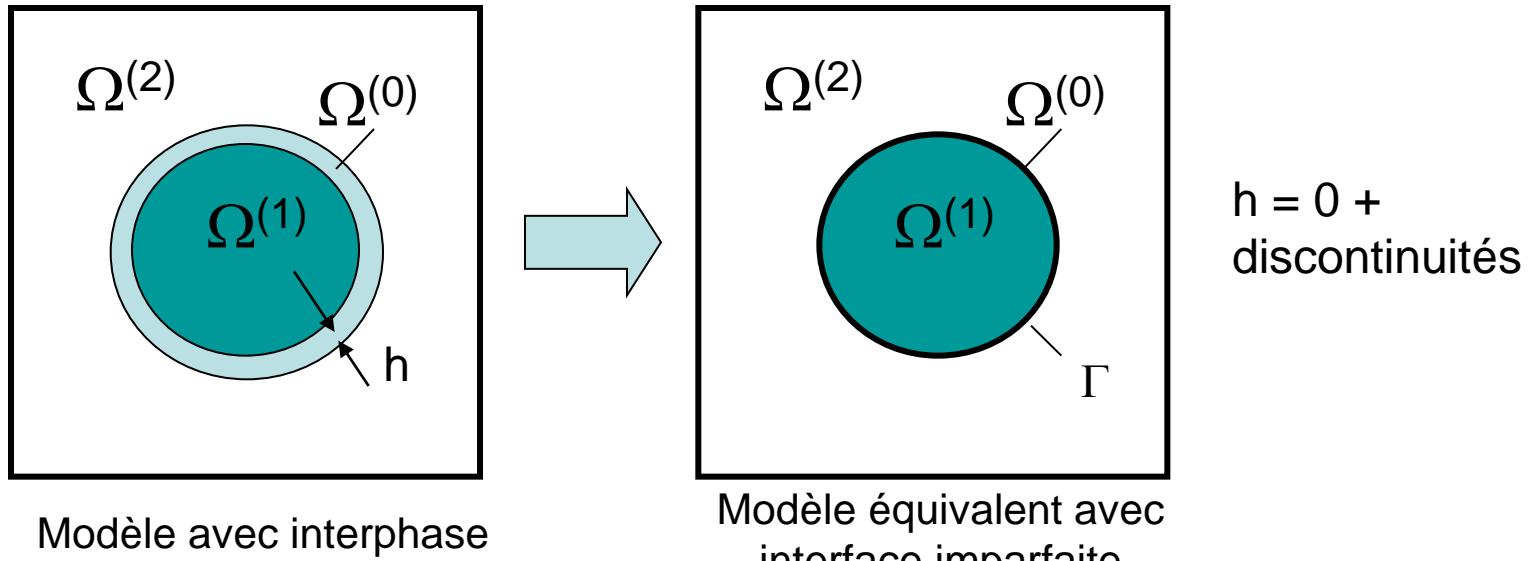
Maillage CEA + Solver  
SYRTHES



# Objectifs

- Proposer une démarche de modélisation et de simulation numérique permettant :
  - De prendre en compte les effets de taille liés aux énergies de surface
  - D'éviter le maillage des interphases dans leur épaisseur
  - D'éviter le maillage explicite des interfaces
  - De prendre en compte les discontinuités de façon précise

# Modélisation des énergies de surface et des interphases par des modèles d'interfaces imparfaites



Cas 1: propriétés du matériau de l'interphase >> propriétés de l'inclusion/de la matrice

Applications : effets de surface dans les **nanocomposites**, composites à **fibres revêtues** de matériaux **fortement conducteur**...

Cas 2: propriétés du matériau de l'interphase << propriétés de l'inclusion/de la matrice

Applications : zones **de transitions** entre mortier et inclusion dans le béton, **imperfections à l'interface** fibres/matrice dans les composites, effets de **barrière thermique** due à des oxydes à l'interface, **résistance de Kapitza**....

# Modèles d'interfaces imparfaites, cas extrêmes (voir cadre général dans [Gu and He, JMPS 2011])

## Problème de conduction

Interphase faiblement conductrice

$$\varepsilon \ll 1 \quad h \approx \varepsilon h^{\text{ref}}, \mathbf{K}^{(0)} \approx \varepsilon \mathbf{K}^{\text{ref}}$$

$$\mathbf{K}^{(1)} \approx \mathbf{K}^{\text{ref}}, \mathbf{K}^{(2)} \approx \mathbf{K}^{\text{ref}}$$

Conditions de continuité à l'interface

$$[[T]] = -h \frac{\mathbf{q} \cdot \mathbf{n}}{\mathbf{n} \cdot \mathbf{K}^{(0)} \mathbf{n}}$$

$$[[\mathbf{q} \cdot \mathbf{n}]] = 0$$

Interface hautement conductrice

$$\varepsilon \ll 1 \quad h \approx \varepsilon h^{\text{ref}}, \mathbf{K}^{(0)} \approx \frac{1}{\varepsilon} \mathbf{K}^{\text{ref}}$$

$$\mathbf{K}^{(1)} \approx \mathbf{K}^{\text{ref}}, \mathbf{K}^{(2)} \approx \mathbf{K}^{\text{ref}}$$

Conditions de continuité à l'interface

$$[[T]] = 0 \quad \mathbf{q}_s = \mathbf{k}_s : \nabla_s T$$

$$[[\mathbf{q} \cdot \mathbf{n}]] = h \operatorname{div}_s (\mathbf{S}^{(0)} \nabla_s T)$$

$$\mathbf{S}^{(0)} = \mathbf{K}^{(0)} - \frac{(\mathbf{K}^{(0)} \mathbf{n}) \otimes (\mathbf{K}^{(0)} \mathbf{n})}{\mathbf{K}^{(0)} : (\mathbf{n} \otimes \mathbf{n})}$$

# Modèles d'interfaces imparfaites, cas extrêmes (voir cadre général dans [Gu and He, JMPS 2011])

## Problème élastique

Interphase souple

$$\varepsilon \ll 1 \quad h \approx \varepsilon h^{ref}, \mathbf{C}^{(0)} \approx \varepsilon \mathbf{C}^{ref}$$

$$\mathbf{C}^{(1)} \approx \mathbf{C}^{ref}, \mathbf{C}^{(2)} \approx \mathbf{C}^{ref}$$

Conditions de continuité à l'interface

$$[[\mathbf{u}]] = \mathbf{F}^{(0)} \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n}$$

$$[[\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n}]] = 0$$

$$\mathbf{F}^{(0)} = \mathbf{Q}^{-1}$$

$$\mathbf{Q} = \mathbf{n} \mathbf{C} : \mathbf{n}$$

Interphase rigide

$$h \approx \varepsilon h^{ref}, \mathbf{C}^{(0)} \approx \frac{1}{\varepsilon} \mathbf{C}^{ref}$$

$$\mathbf{C}^{(1)} \approx \mathbf{C}^{ref}, \mathbf{C}^{(2)} \approx \mathbf{C}^{ref}$$

Conditions de continuité à l'interface

$$[[\mathbf{u}]] = 0$$

$$[[\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n}]] = -h \operatorname{div}_s (\boldsymbol{\sigma}_s)$$

OU : effets de surface dans les nanomatériaux : identifié à partir de calculs atomistiques

$$\mathbf{C}_s = h \mathbf{A}^{(0)}$$

# Résolution numérique par éléments finis : formes faibles associées

Problème de diffusion/thermique

Termes surfaciques associés à  
l'énergie de surface

$$\int_{\Omega} \mathbf{k}^{(i)} \nabla T \cdot \nabla \delta T d\Omega + \int_{\Gamma} \mathbf{k}_s \nabla_s T \cdot \nabla_s \delta T d\Gamma = \delta W_{ext}^{th}$$

$$\int_{\Omega} \mathbf{k}^{(i)} \nabla T \cdot \nabla \delta T d\Omega + \int_{\Gamma} [[T]] \cdot \alpha [[\delta T]] d\Gamma = \delta W_{ext}^{th}$$

Problème élastique

$$\int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\delta \mathbf{u}) d\Omega + \int_{\Gamma} \boldsymbol{\sigma}_s(\mathbf{u}) : \boldsymbol{\varepsilon}_s(\delta \mathbf{u}) d\Gamma = \delta W_{ext}^{meca}$$

$$\int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\delta \mathbf{u}) d\Omega + \int_{\Gamma} [[\delta \mathbf{u}]] K_s [[\mathbf{u}]] d\Gamma = \delta W_{ext}^{meca}$$

Matrice de  
rigidité de  
surface

Discrétisation FEM → Système linéaire  
d'équations  $(\mathbf{K} + \mathbf{K}_s) \mathbf{q} = \mathbf{F}$

# Modélisation des interfaces dans des maillages réguliers : la méthode X-FEM

Partition of Unity method (PUM) [Babuška et Melenk 1995]

Idée : enrichir l'approximation avec des fonctions non présentes dans la base

$$u^h(x) = \sum_{i=1}^n N_i(x)u_i + \boxed{\sum_{j=1}^M f_j(x)\alpha_j}$$

Pour conserver une action locale de l'enrichissement

$$u^h(x) = \sum_{i=1}^n N_i(x)u_i + \sum_{i=1}^N N_i(x) \left( \sum_{j=1}^M f_j(x)\alpha_j \right)$$

$$u^h(x) = \sum_{i=1}^n N_i(x)u_i + \sum_{i=1}^n N_i(x)g(x)a_i$$

PUM

# Modélisation des interfaces dans des maillages réguliers : la méthode X-FEM

Méthode XFEM [Belytschko et Black 1999,  
Moës et al 1999]

X-FEM = PUM+FEM+enrichissement discontinu

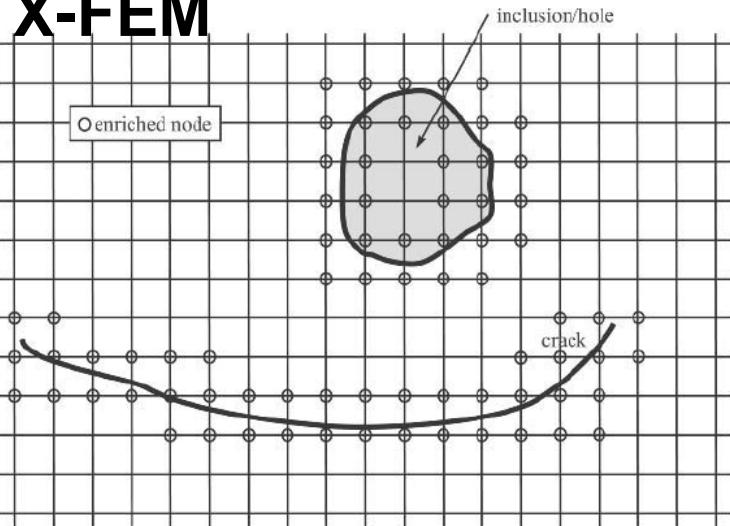
(+ fonctions singulières en pointe de fissure...)

$$u^h(x) = \sum_{i=1}^n N_i(x)u_i + \sum_{j=1}^M N_j(x)g(x)\alpha_j$$



Enrichissement des seuls nœuds dont le support est coupé par la discontinuité

Applications : Fissuration, interfaces....

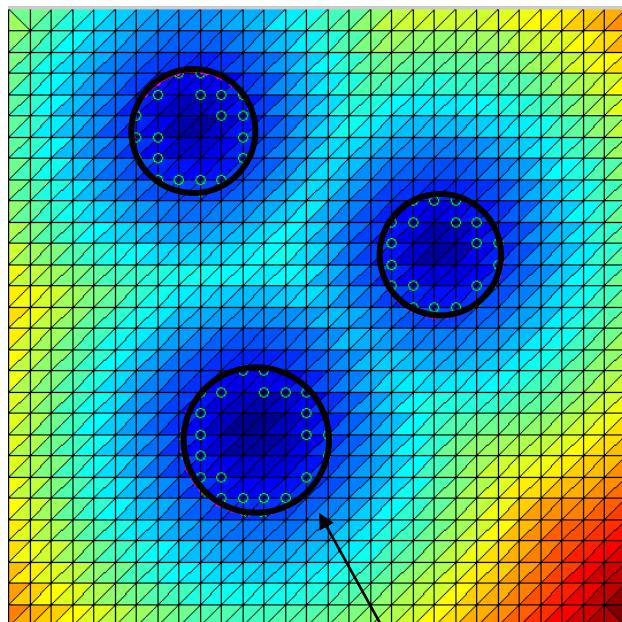


Fonctions de Heaviside ou fonctions « rampes »

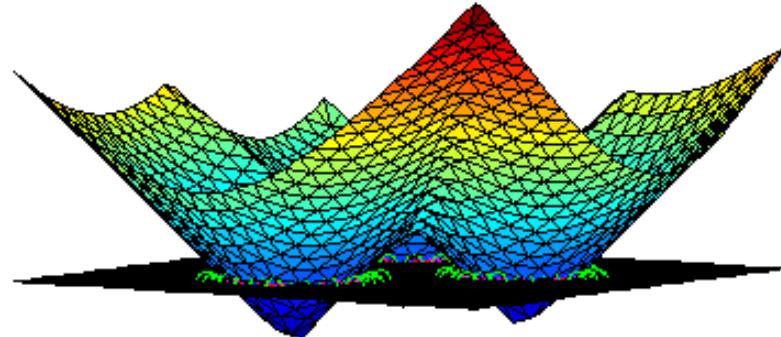
# Méthode level-set pour la modélisation des interfaces complexes

Description des interfaces de manière implicite par level-set

Exemple : inclusions circulaires



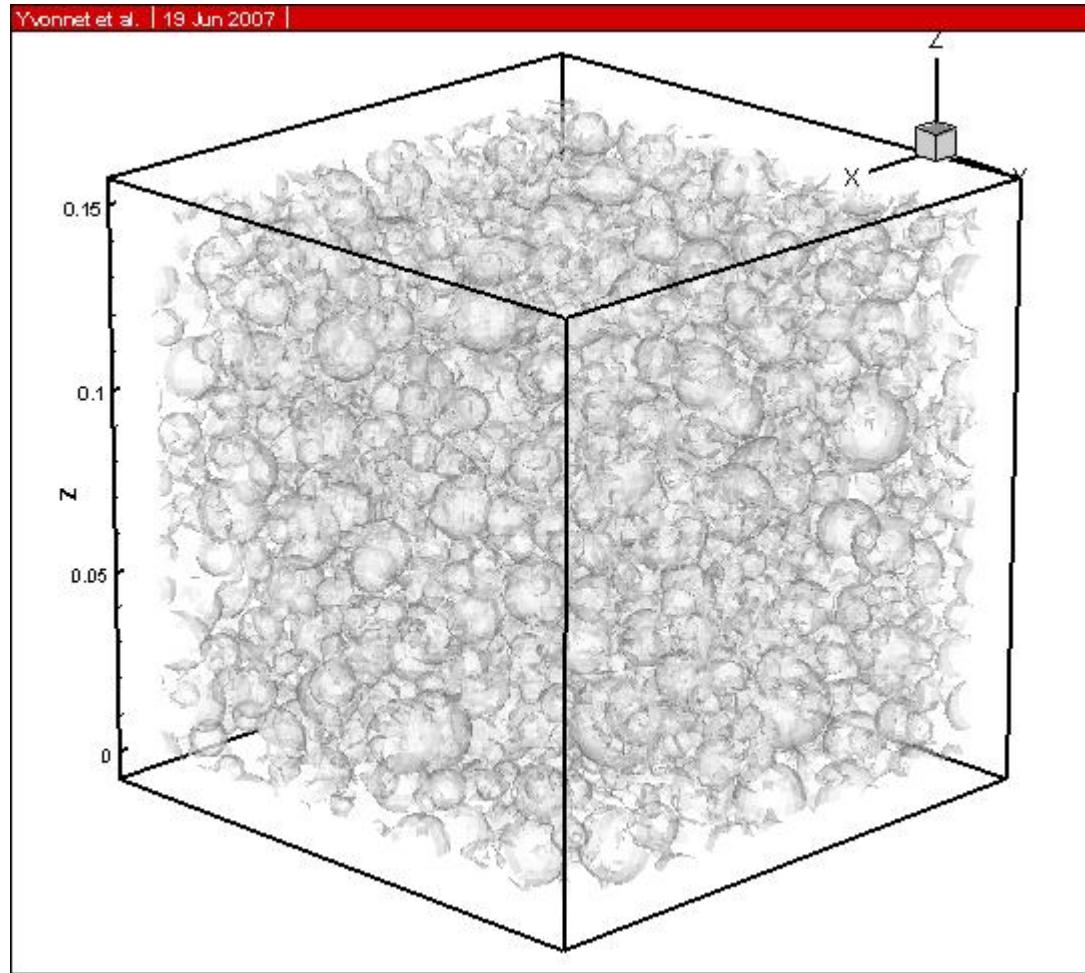
$$\phi(x) = \min_{\substack{x_c^i \in \Omega_c^i \\ i=1, 2, \dots, n_c}} \left\{ \|x - x_c^i\| - r_c^i \right\}$$



$$\Gamma_I = \left\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3 \mid \phi(\mathbf{x}) = 0 \right\}$$

**Interface définie comme le zéro de la fonction niveau**

# Méthode level-set pour la modélisation des interfaces complexes



Exemple d'interfaces données par le niveau zéro d'une fonction level-set : VER avec 2000 inclusions sphériques

# Interfaces imparfaites : calcul des opérateurs de projection par le biais de la fonction level-set

Vecteur normal à l'interface

$$\mathbf{n}(x) = \frac{\nabla \phi(x)}{\|\nabla \phi(x)\|} \quad \nabla_i \tilde{\phi}(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^n \frac{\partial N_j(\mathbf{x})}{\partial x_i} \phi_j$$

$$\mathbf{P}(\mathbf{x}) = \mathbf{1} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}$$

Opérateur de projection sur le plan tangent à  
 $\Gamma$  en  $x$

Gradient surfacique

$$\nabla_s f = \nabla f \mathbf{P}$$

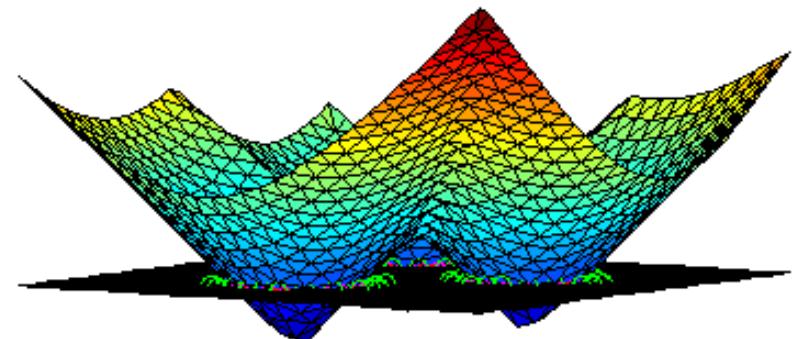
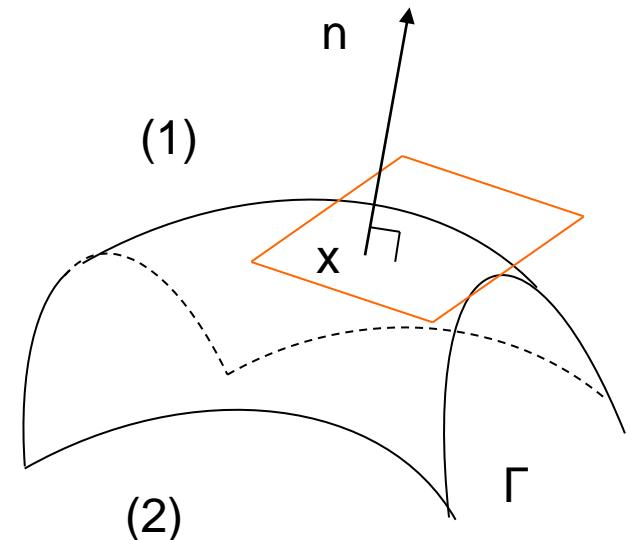
Divergence surfacique

$$div_s(f) = \nabla f : \mathbf{P}$$

$$div_s(\mathbf{T}) = \nabla \mathbf{T} : \mathbf{P}$$

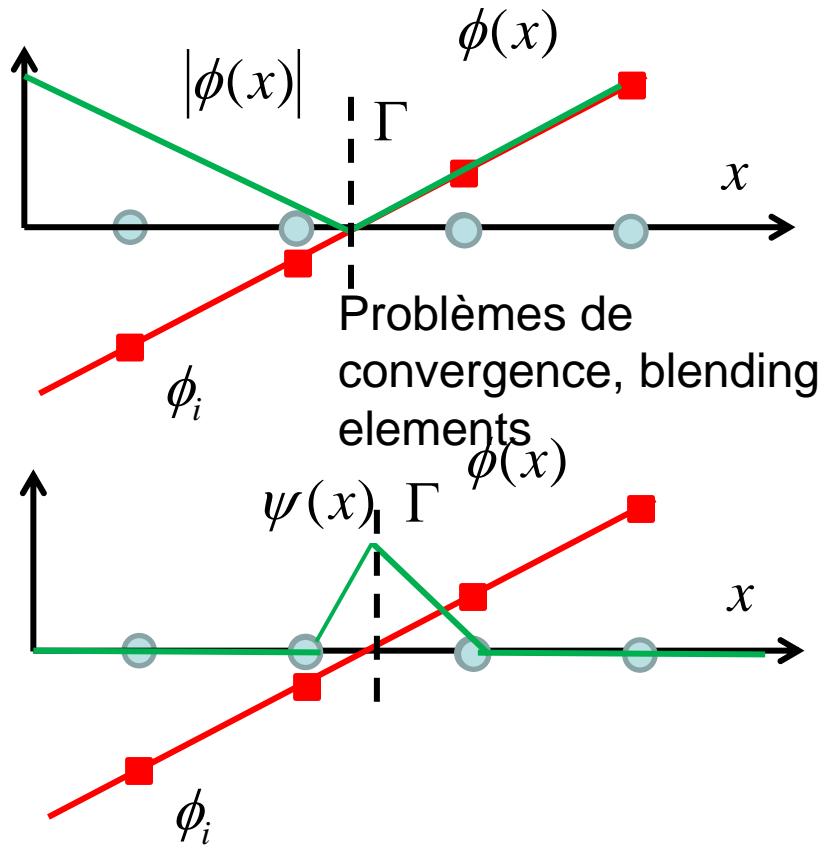
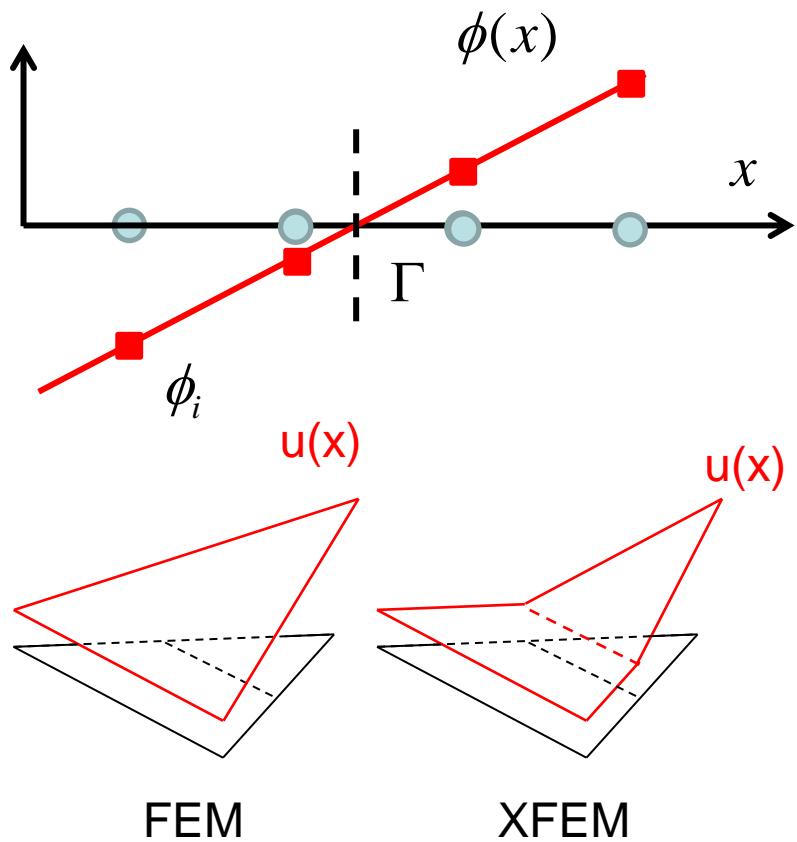
Tenseur surfacique

$$\mathbf{T}_s = \mathbf{P} \mathbf{T}_s \mathbf{P}$$



Fonction level-set  $\phi(\mathbf{x})$

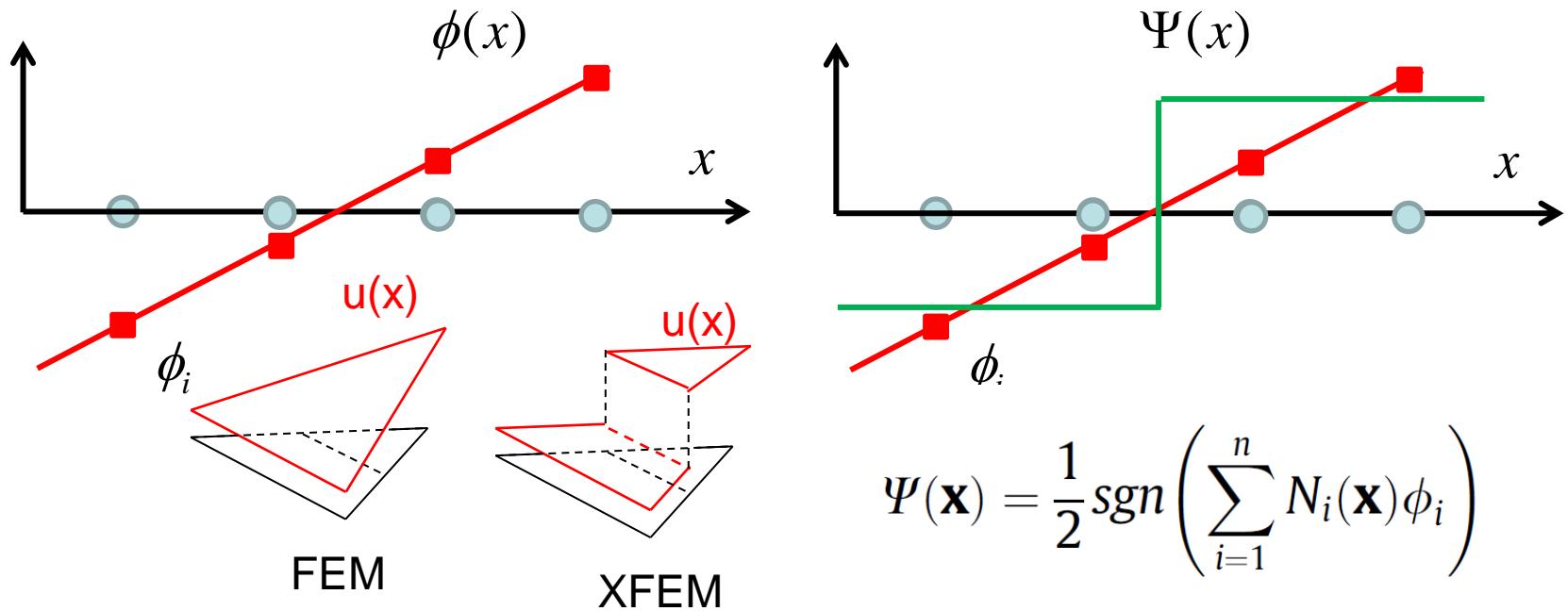
# Construction des fonctions discontinues à partir de la fonction level-set : discontinuités faibles



$$\psi(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n |\phi_i| N_i(\mathbf{x}) - \left| \sum_{i=1}^n \phi_i N_i(\mathbf{x}) \right|$$

[Moës et al  
CMAME 2003]

# Construction des fonctions discontinues à partir de la fonction level-set : discontinuités fortes

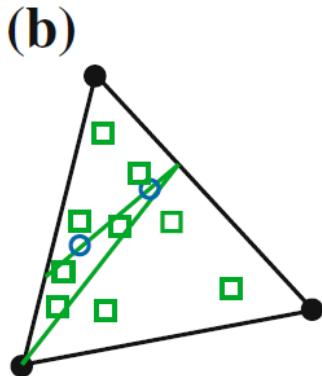
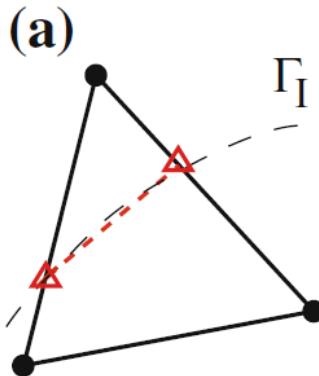


Autre schéma d'enrichissement [Zhu et al. 2011]

$$\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{n_e} N_i(\mathbf{x}) \mathbf{u}_i(\mathbf{x}) + \sum_{r=1}^{m_e} M_r(\mathbf{x}) \psi_r(\mathbf{x}) \mathbf{r}_r.$$

$$\psi_r(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathcal{S}(\tilde{\phi}_{\mathbf{x}}) \left[ 1 - \mathcal{S}(\tilde{\phi}_{\mathbf{x}}) \mathcal{S}(\phi_r) \right]$$

# Evaluation des intégrales surfaciques



- △ Intersection between zero level-set function and the mesh
- Interface integration points
- ◻ Bulk integration points

**Discontinuités faibles**

$$\int_{\Gamma_I} \boldsymbol{\sigma}_s(\mathbf{u}) : \boldsymbol{\epsilon}_s(\delta \mathbf{u}) d\Gamma$$

$$[\![\boldsymbol{\epsilon}_s]\!] = [\![\mathbf{P}\boldsymbol{\epsilon}\mathbf{P}]\!] = \mathbf{0}$$

Déformations tangentielles continues sur l'interface

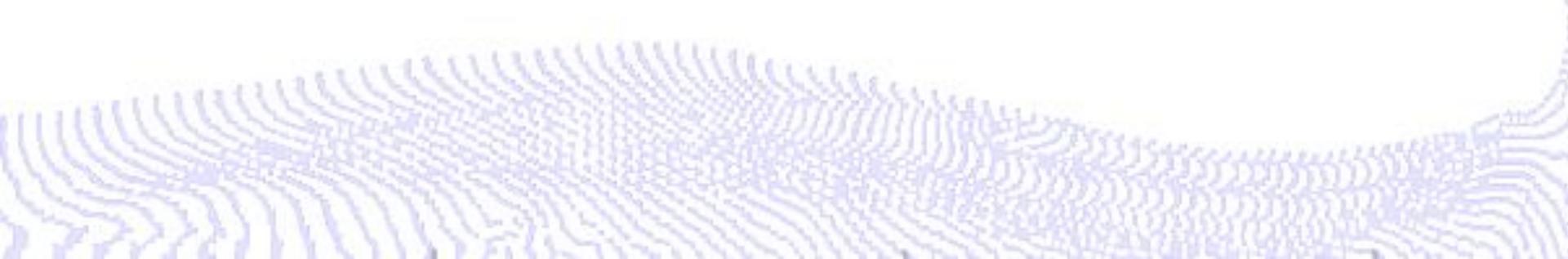
**Discontinuités fortes**

$$\int_{S_I} C_{ij}^s [\![u_j]\!][\![\delta u_i]\!] dS$$

$$[\![\tilde{\mathbf{u}}]\!](\mathbf{x}) = \sum_{r=1}^{n_e} N_r(\mathbf{x}) \mathbf{r}_r$$

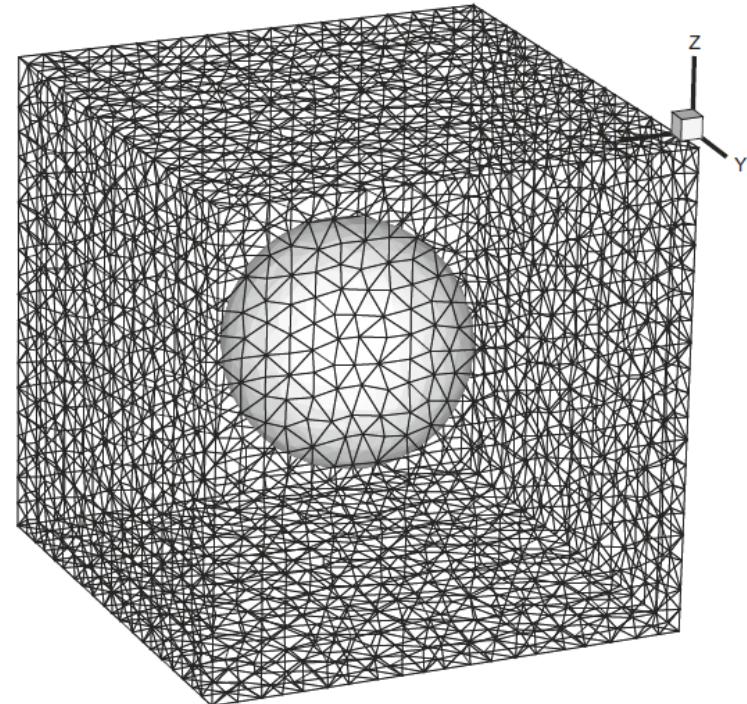
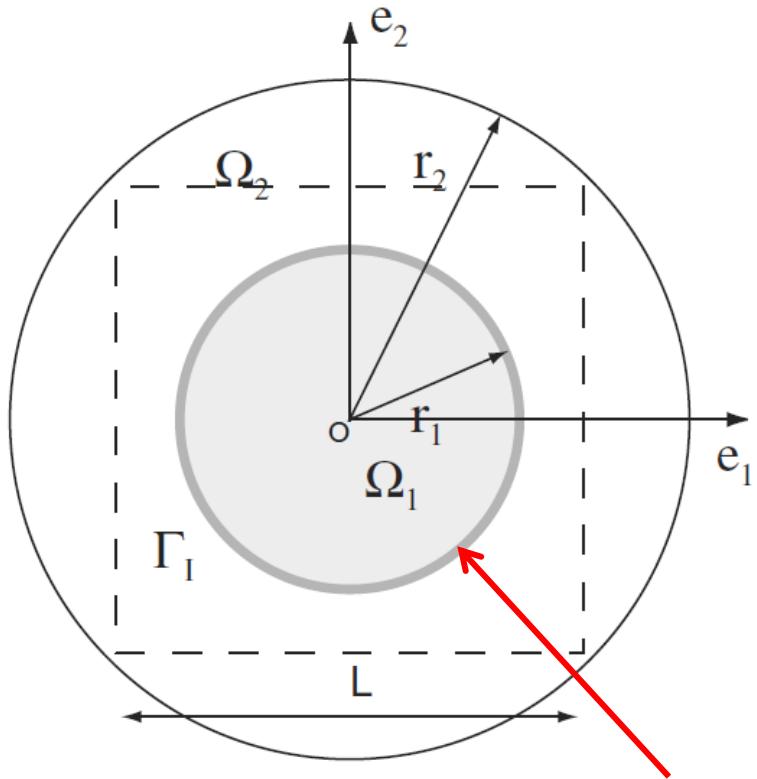
Saut de déplacement défini en fonction des degrés de liberté enrichis

# Exemples numériques



# Interface hautement conductrice

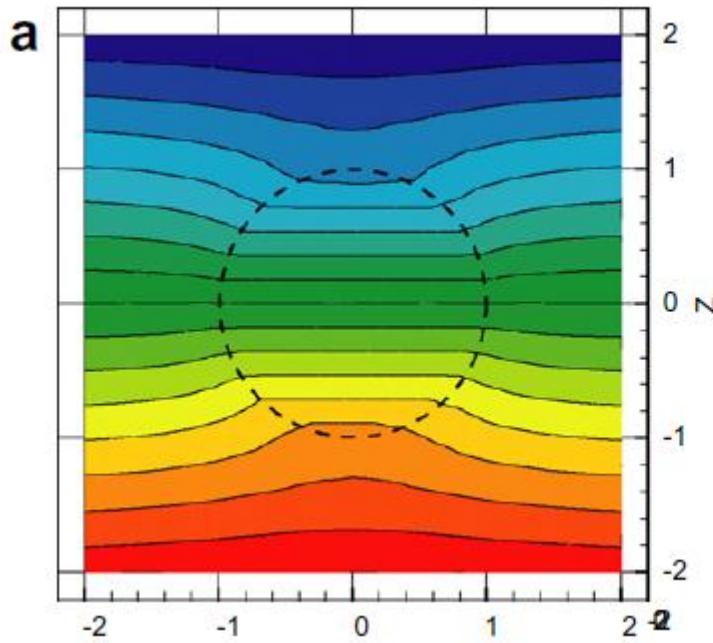
Flux imposé suivant  $e_2$



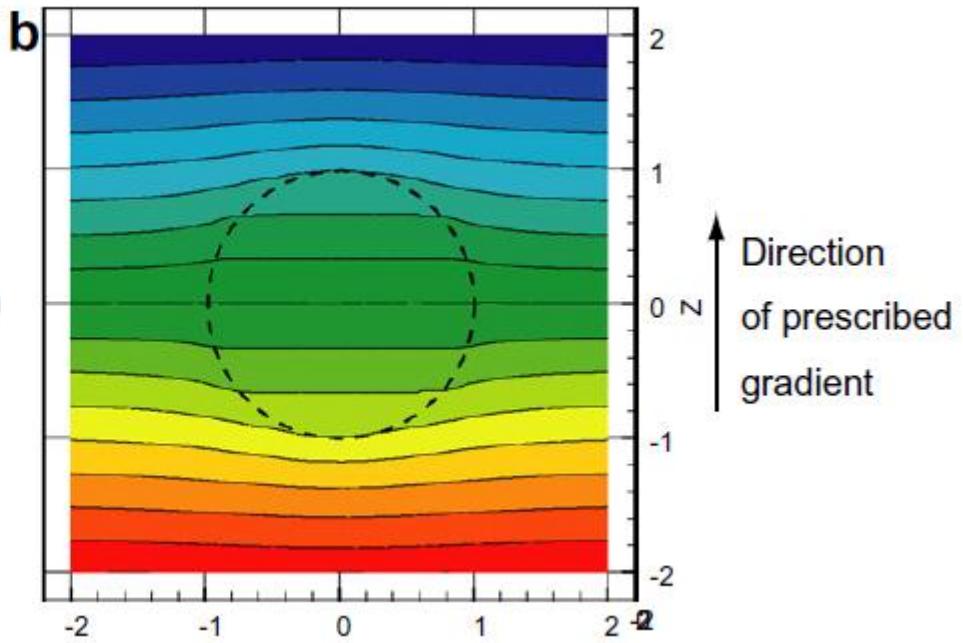
Interphase  
conductrice

[JY et al. Compos.  
Sc. Tech. 2008]

# Interface hautement conductrice



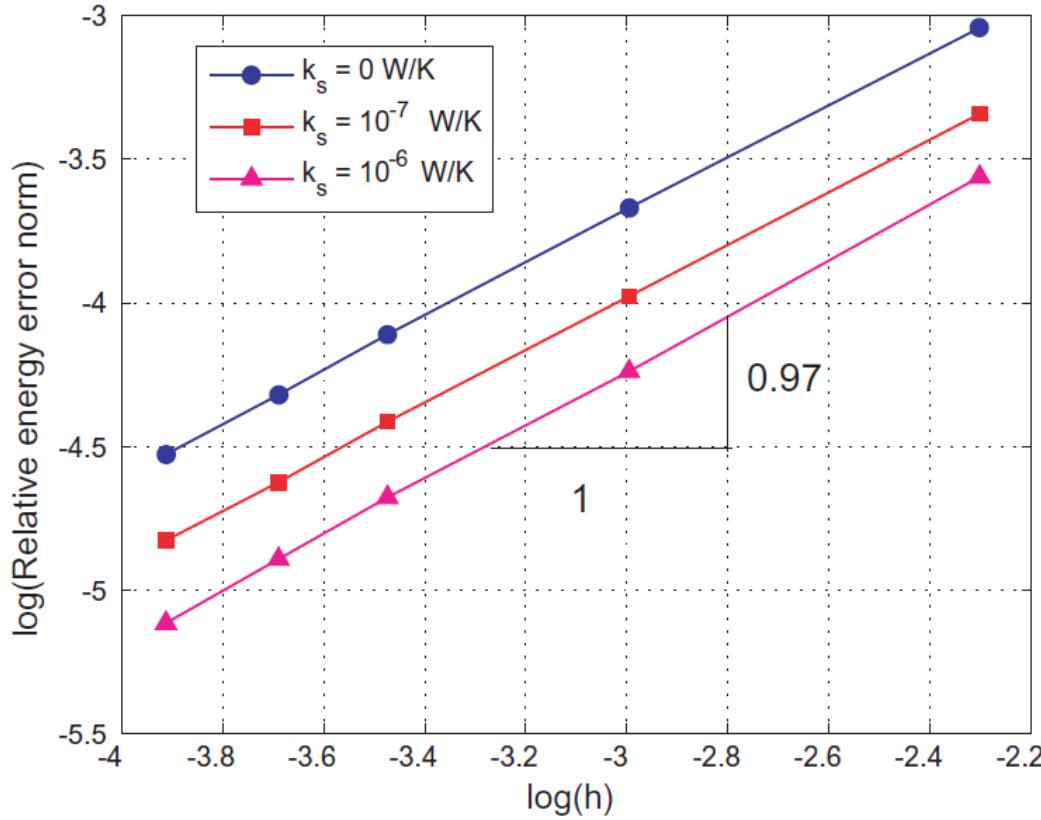
Interface parfaite  $ks = 0 \text{ W.K}^{-1}$



Direction  
of prescribed  
gradient

Interface Hautement  
Conductrice  $ks = 10^6$   
 $\text{W.K}^{-1}$

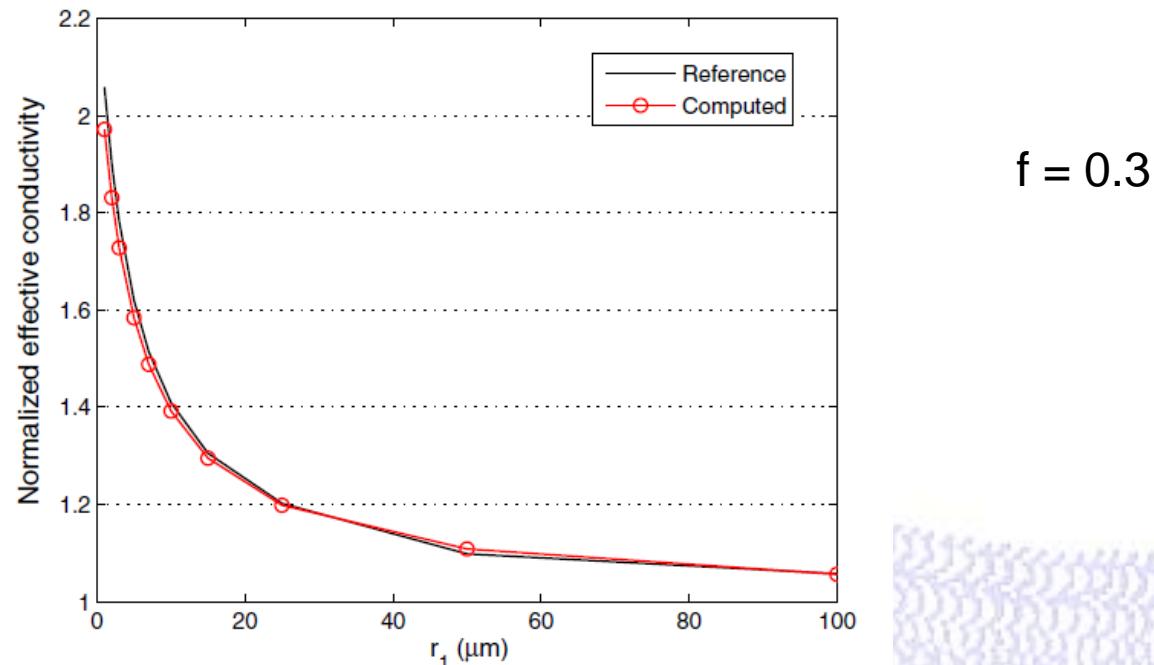
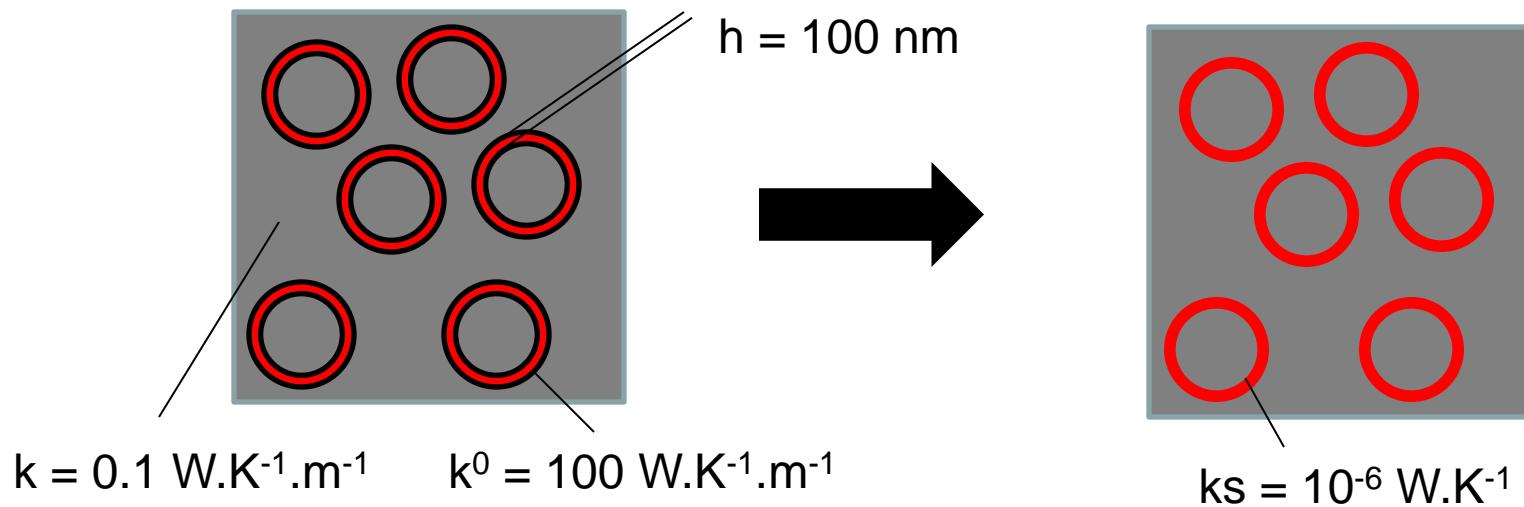
# Interface hautement conductrice



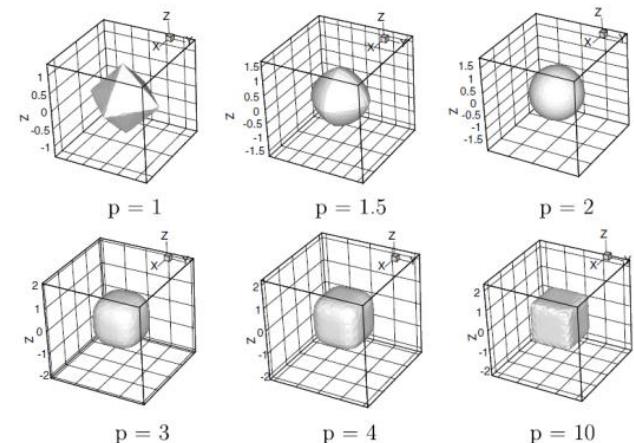
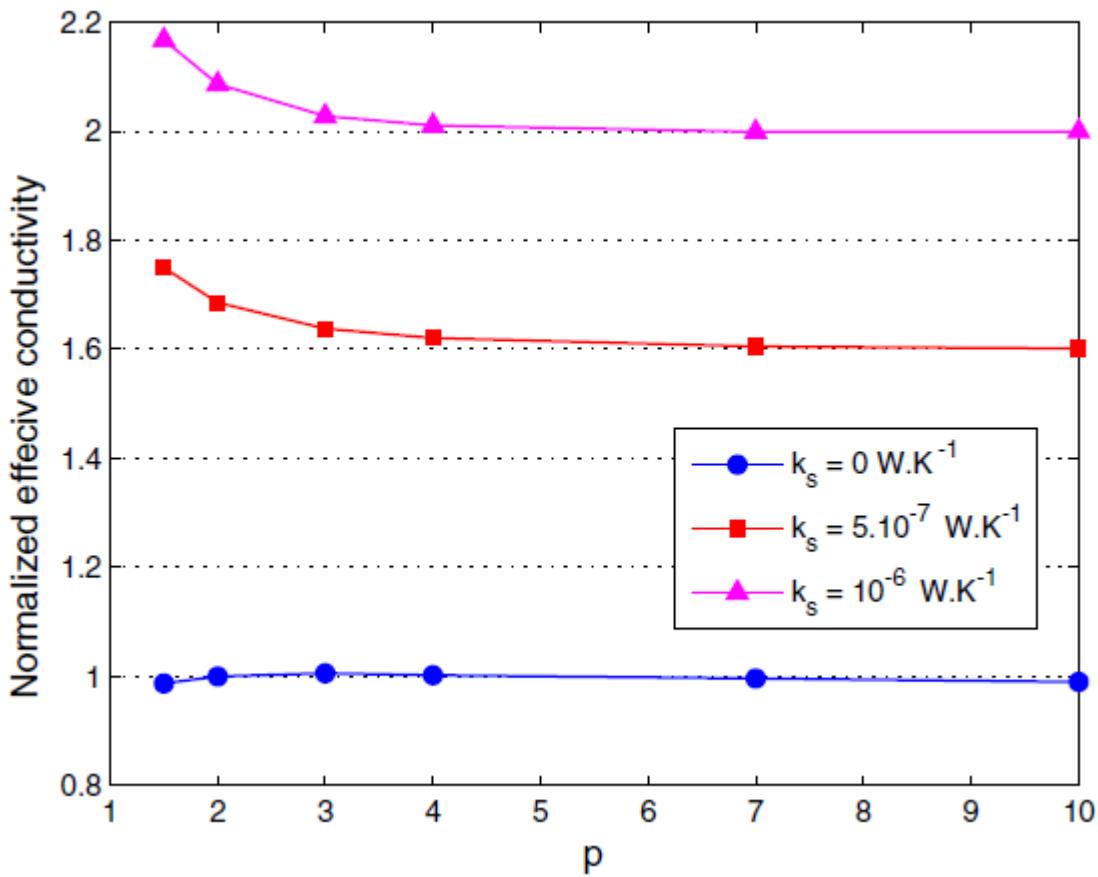
Convergence de l'erreur en norme énergie : **optimale par rapport au degré polynomial des éléments**

$$\frac{\|T^h(\mathbf{x}) - T(\mathbf{x})\|_{E(\Omega)}}{\|T(\mathbf{x})\|_{E(\Omega)}} = \frac{\left\{ \int_{\Omega} [\nabla T^h(\mathbf{x}) - \nabla T(\mathbf{x})]^T \mathbf{K}^{(i)}(\mathbf{x}) [\nabla T^h(\mathbf{x}) - \nabla T(\mathbf{x})] \right\}^{1/2}}{\left[ \int_{\Omega} \nabla T(\mathbf{x})^T \mathbf{K}^{(i)}(\mathbf{x}) \nabla T(\mathbf{x}) \right]^{1/2}},$$

# Interface hautement conductrice: effets de taille sur les propriétés homogénéisées



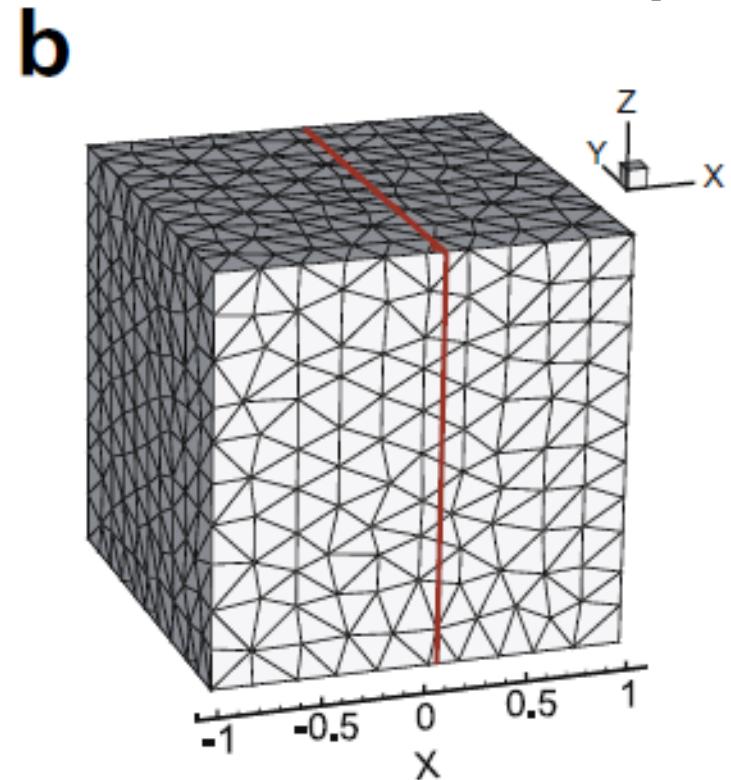
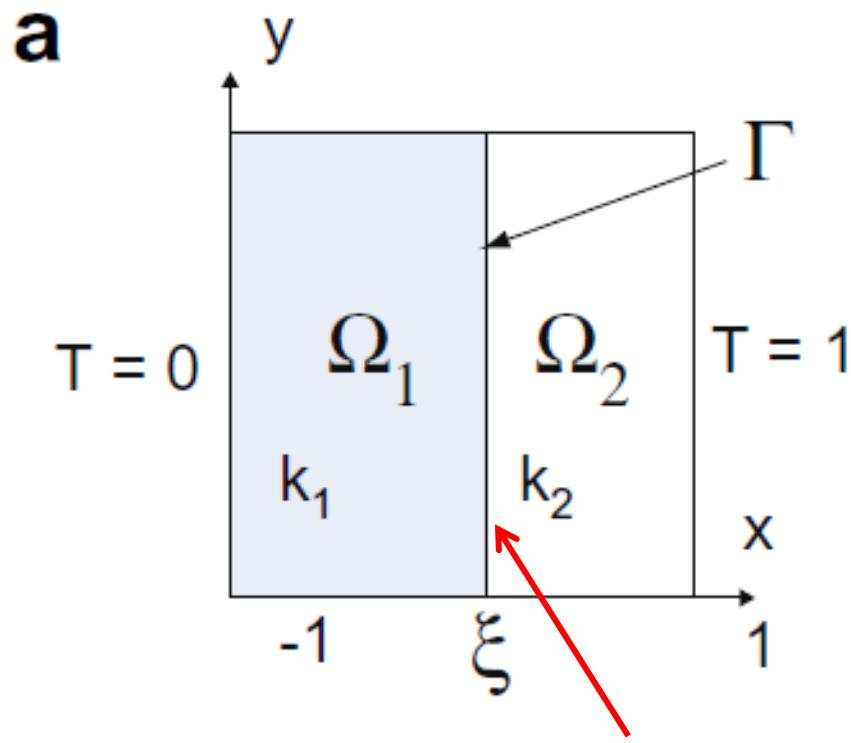
# Interface hautement conductrice: effets de taille et de forme sur les propriétés homogénéisées



# Effet de résistance d'interface (Résistance de Kapitza)

Benchmark

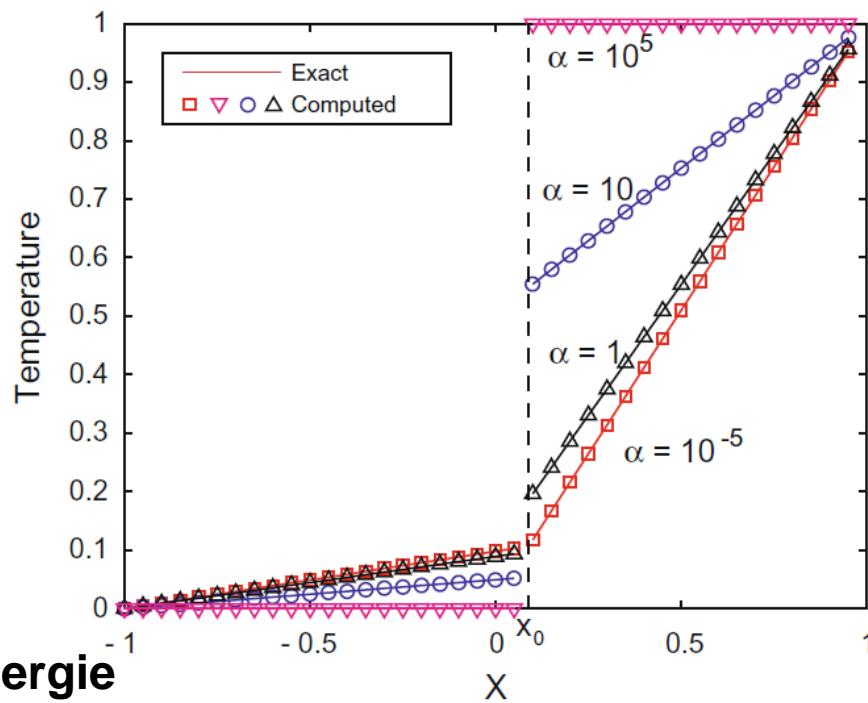
[JY et al. Comput.  
Mater. Sc 2011]



Interface avec résistance  
thermique variable

Maillage non conforme avec  
l'interface

# Effet de résistance d'interface (Résistance de Kapitza)

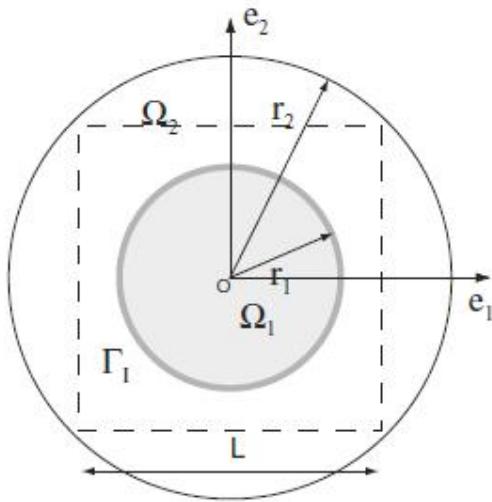


Erreurs en norme énergie

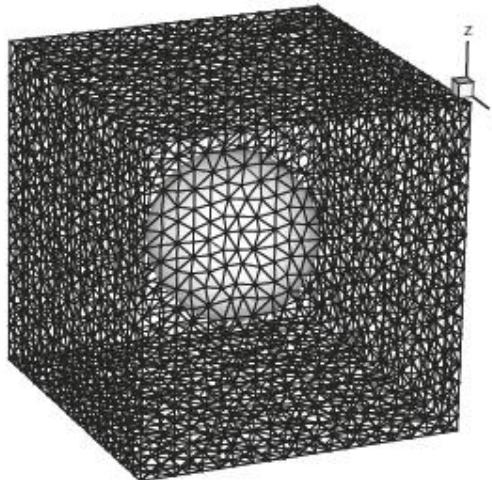
$\alpha \setminus k_1/k_2$	1	10	100
0	$1.7 \times 10^{-8}$	$2.2 \times 10^{-8}$	$2.2 \times 10^{-8}$
1	$1.9 \times 10^{-8}$	$2.2 \times 10^{-8}$	$2.2 \times 10^{-8}$
10	$1.9 \times 10^{-8}$	$2.2 \times 10^{-8}$	$2.2 \times 10^{-8}$
$10^3$	$1.9 \times 10^{-8}$	$2.2 \times 10^{-8}$	$2.2 \times 10^{-8}$

# Effet de résistance d'interface (Résistance de Kapitza)

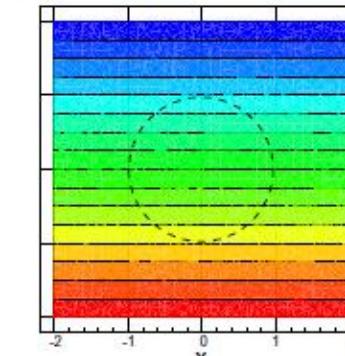
a



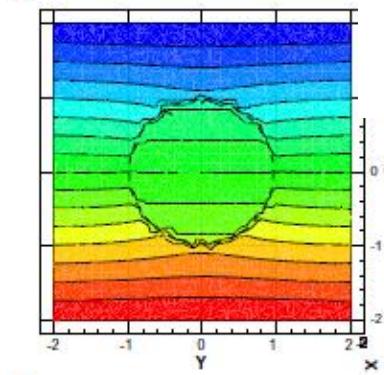
b



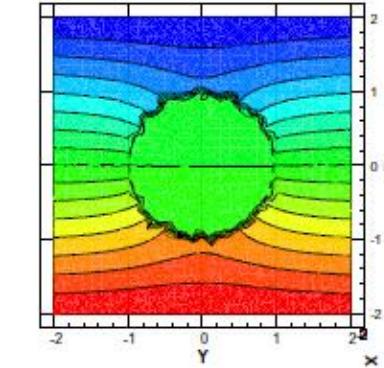
a



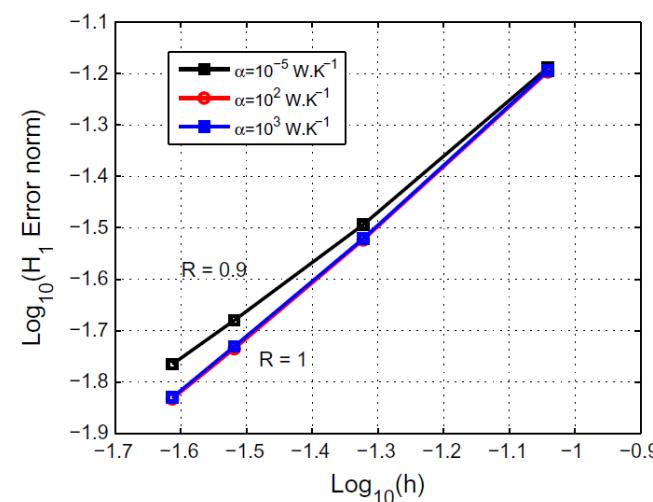
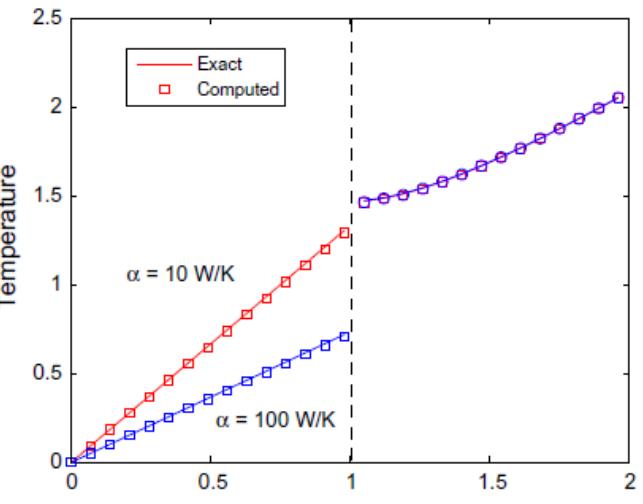
b



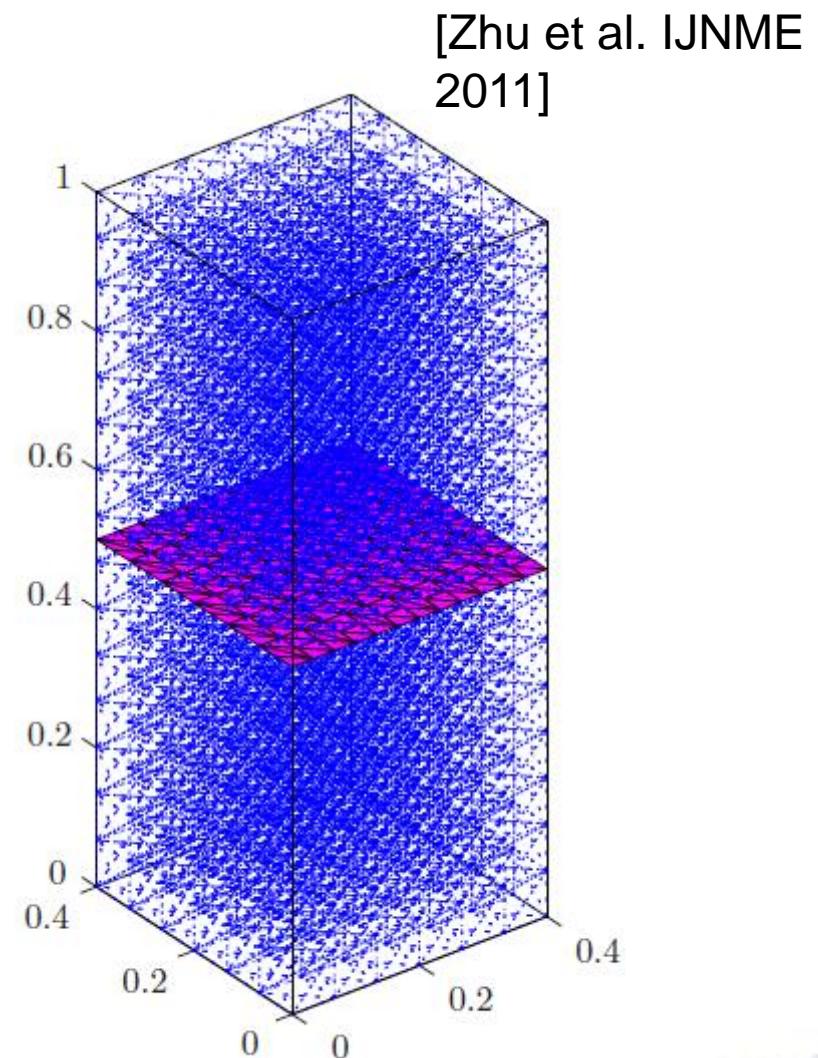
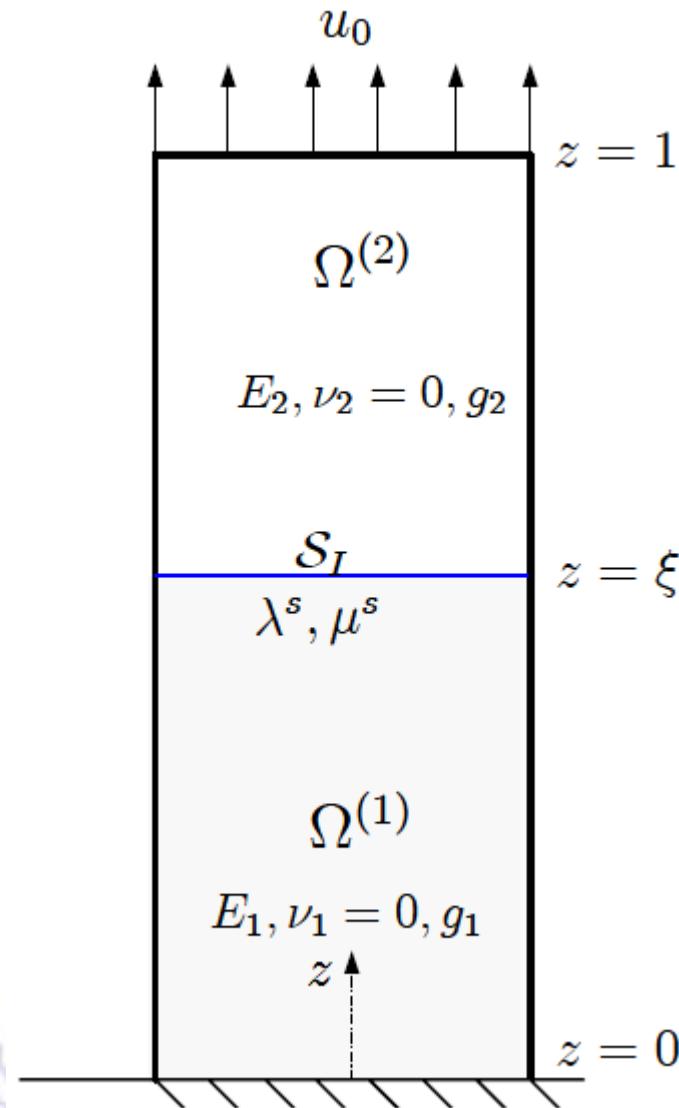
c



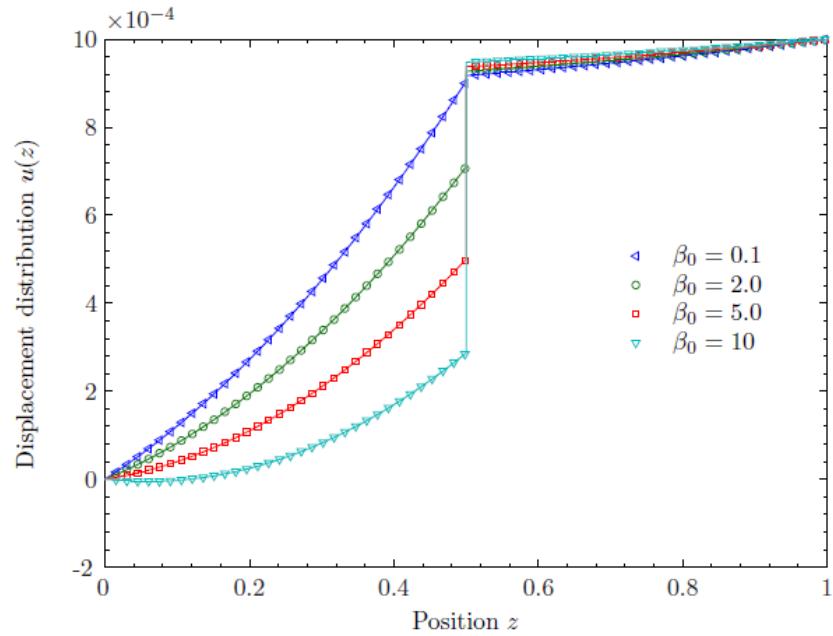
Temperature



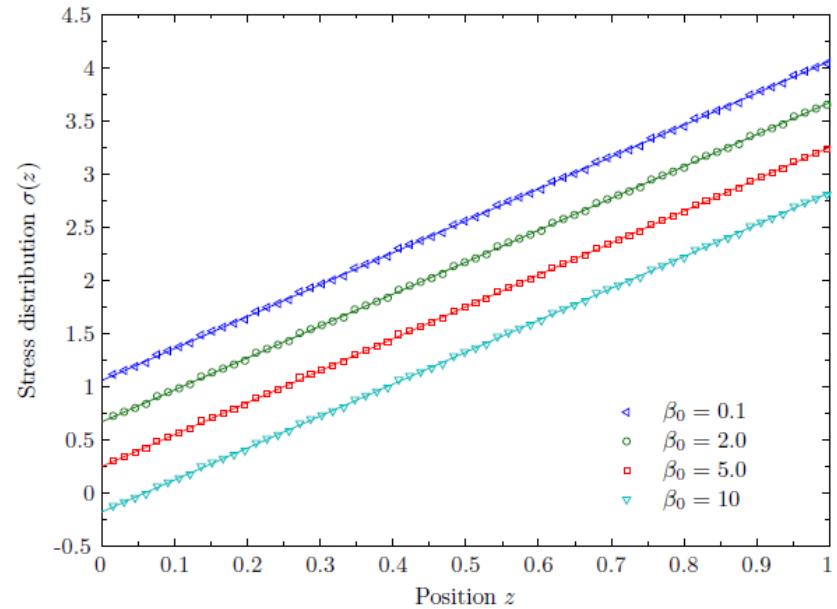
# Interface imparfaite mécanique de type ressort



# Interface imparfaite mécanique de type ressort

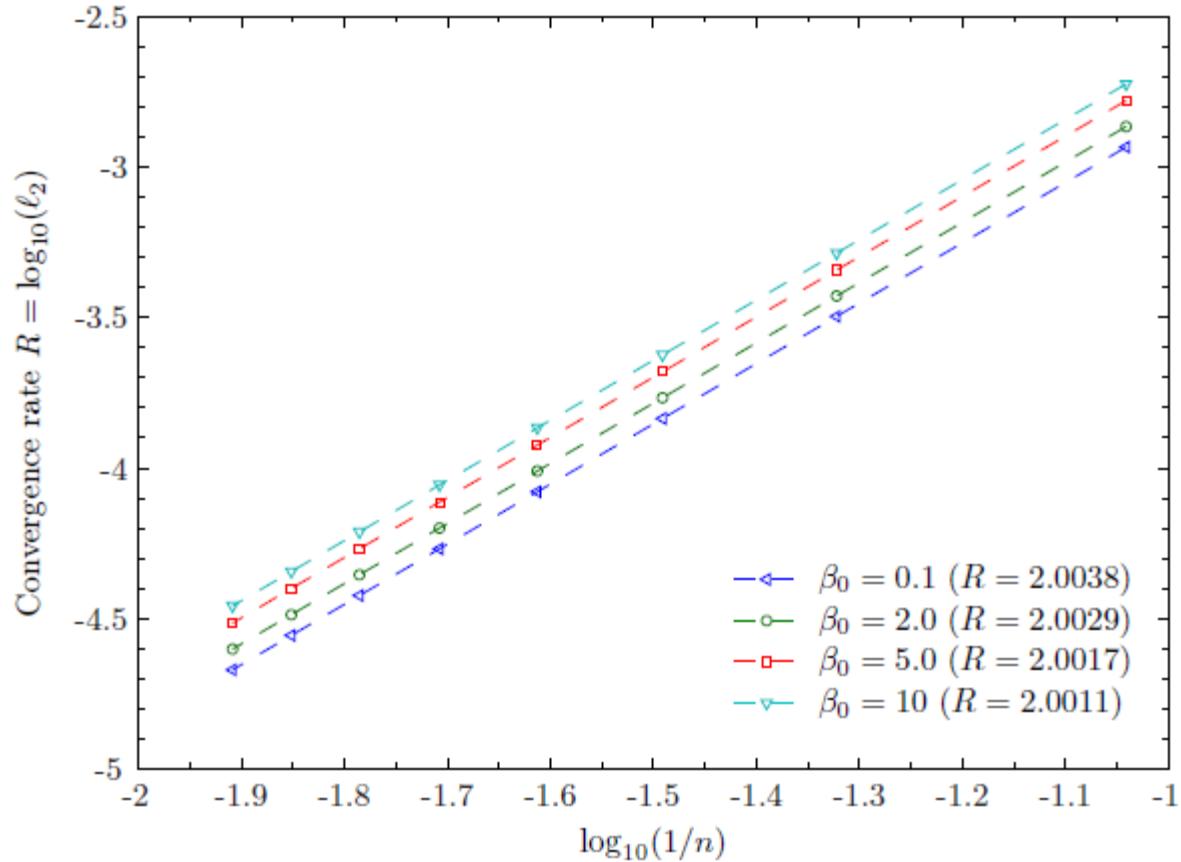


déplacements



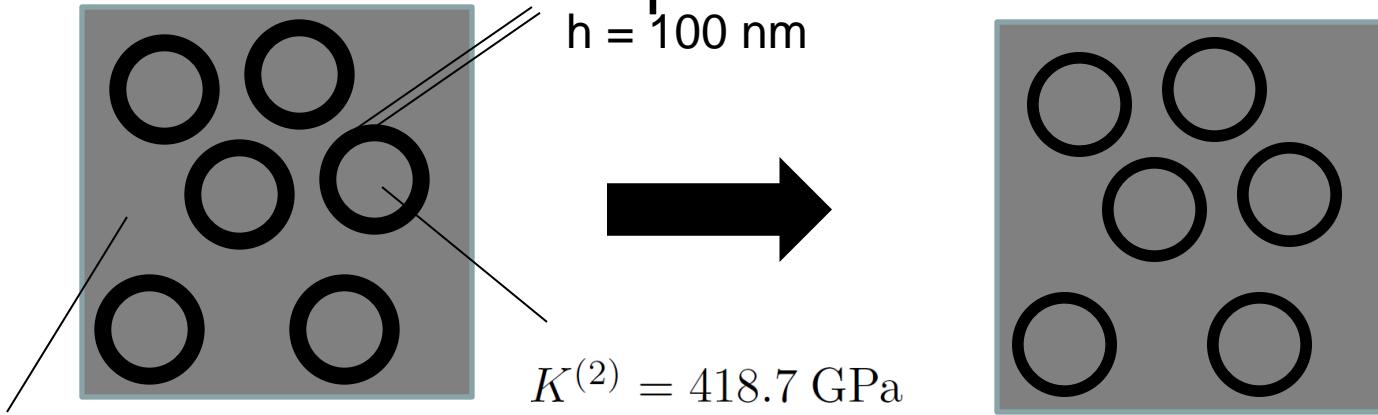
Contraintes

# Interface imparfaite mécanique de type ressort



**Convergence de la solution en norme L2 : optimale par rapport au degré polynomial des éléments**

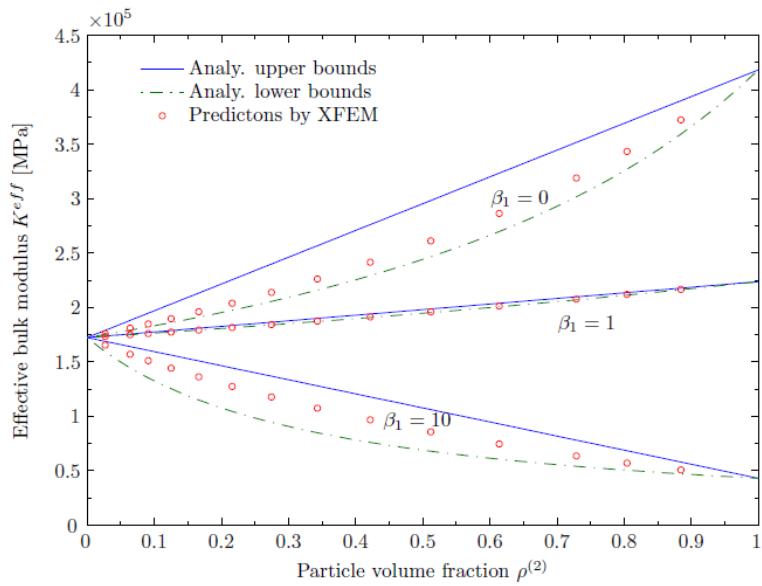
# Interface de type ressort équivalente à une interphase



$$K^{(2)} = 418.7 \text{ GPa}$$

$$K^{(1)} = 172.4 \text{ GPa}$$

$$k^0 = 5 \text{ GPa}$$



# Nanocomposites (interface imparfaite cohérente)

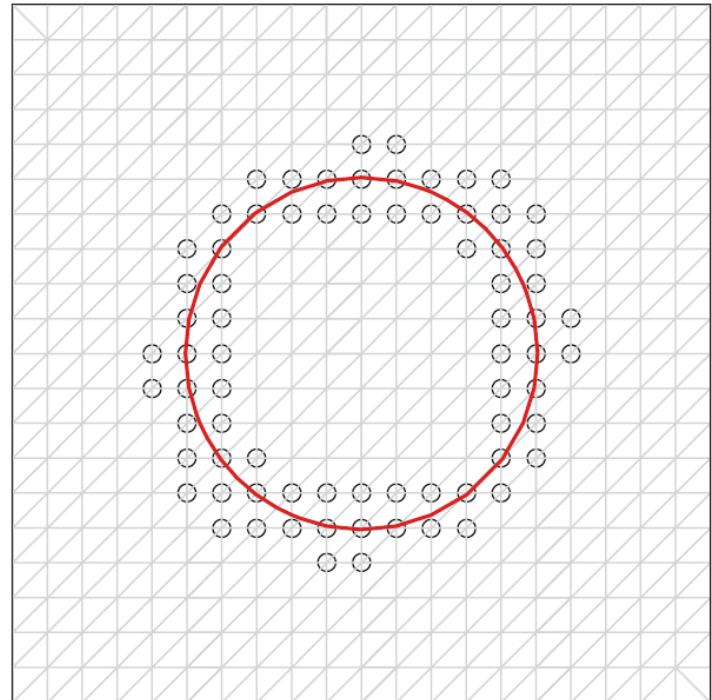
**Conditions de continuité à l'interface**

$$[\![\mathbf{u}]\!] = \mathbf{0} \quad \text{on } \Gamma_I$$

$$[\![\boldsymbol{\epsilon}]\!] = \mathbf{a} \otimes \mathbf{n} + \mathbf{n} \otimes \mathbf{a}$$

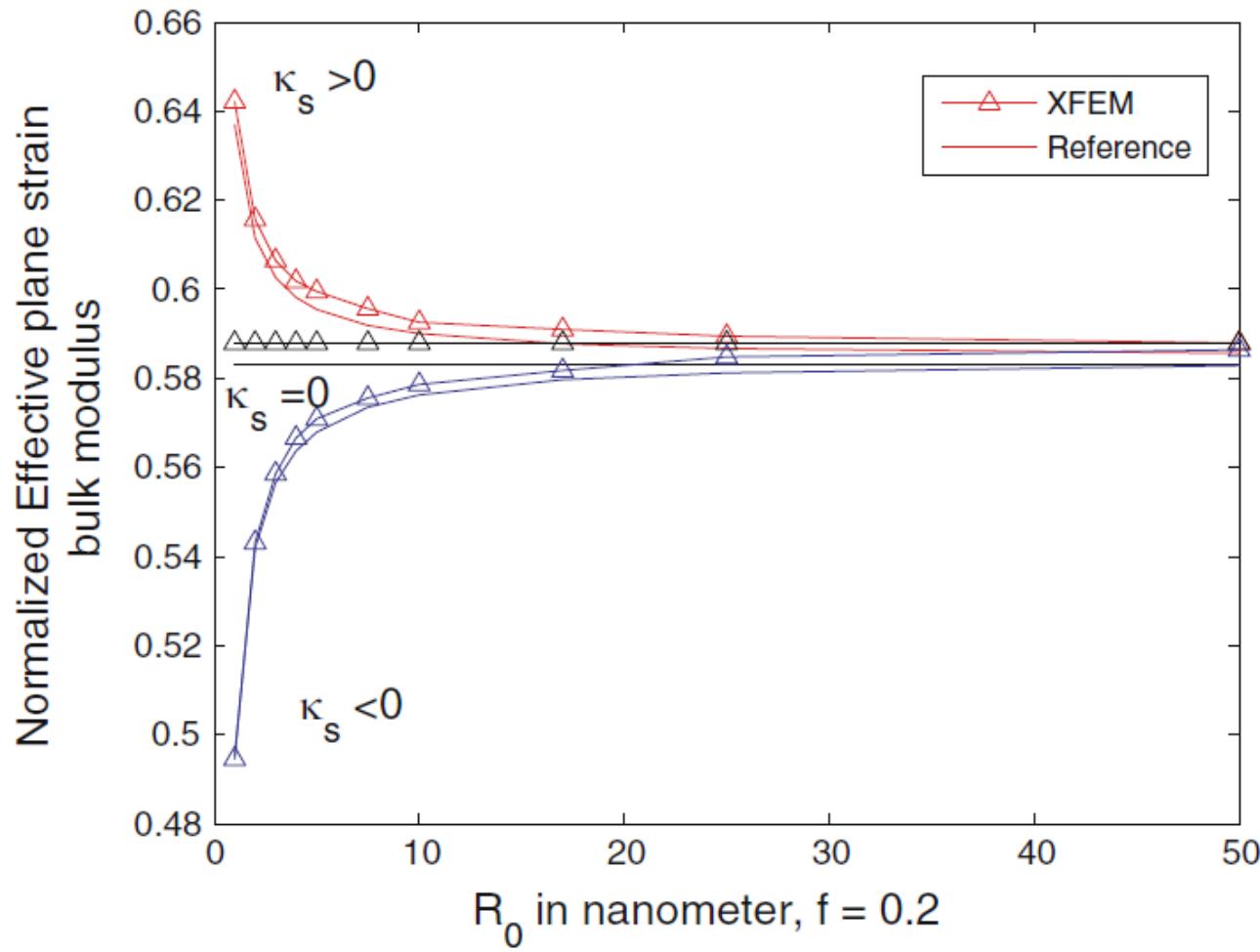
**Relation de comportement d'interface**

$$\boldsymbol{\sigma}_s = \boldsymbol{\sigma}_0 + \mathbb{C}^s : \boldsymbol{\epsilon}_s$$



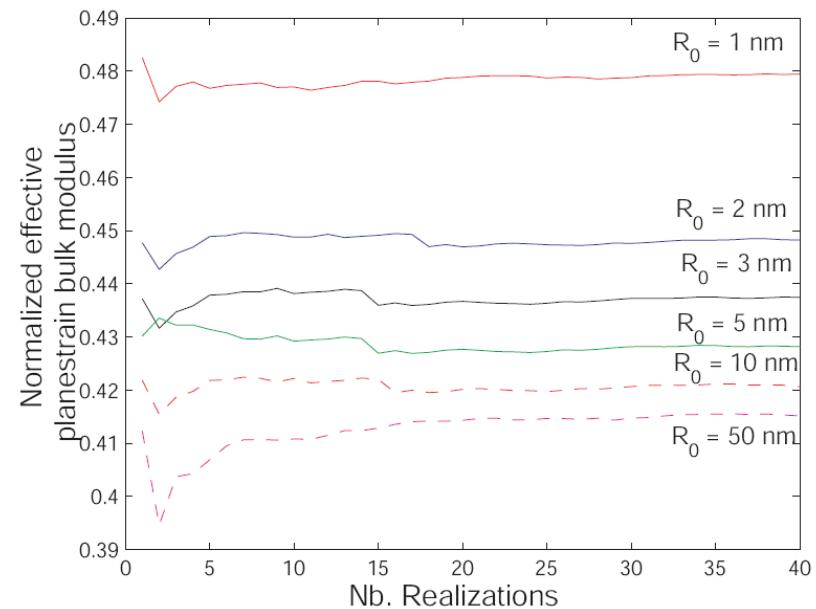
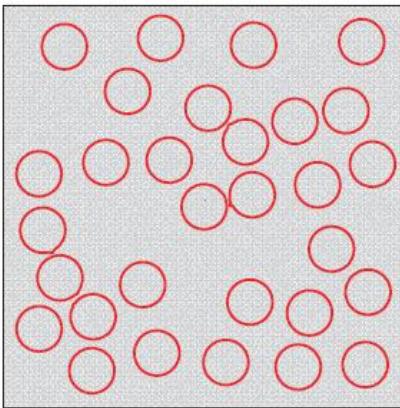
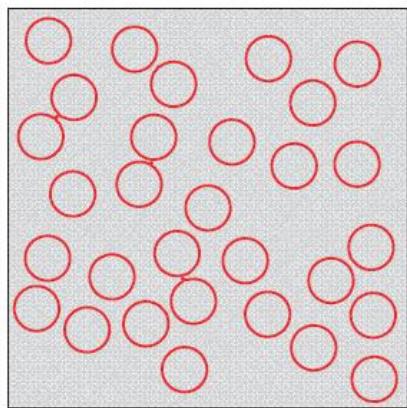
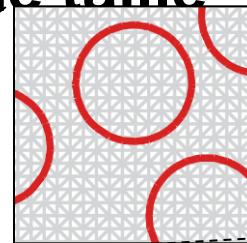
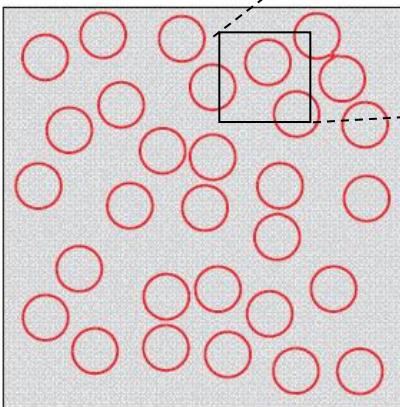
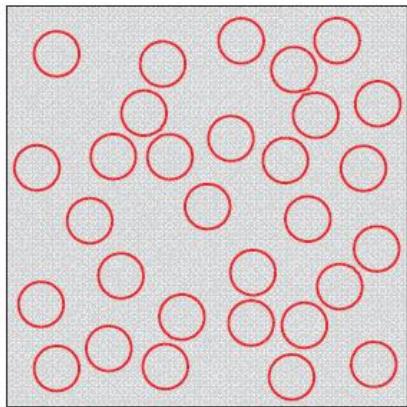
[JY et al. Comput.  
Mech 2008]

# Nanocomposites (interface imparfaite cohérente)



Capture des effets de taille des propriétés effectives

# Propriétés effectives de matériaux nanoporeux aléatoires : mise en évidence des effets de taille

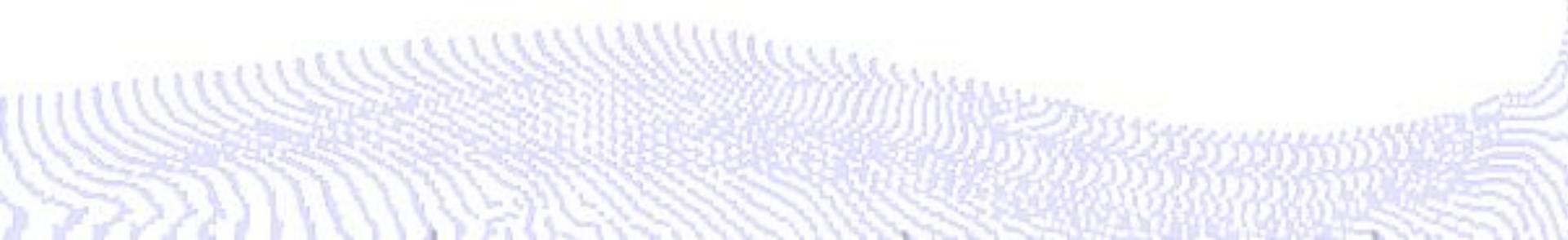


Propriétés effectives dépendantes de la taille,  
convergence statistique (moyenne)

Description des interfaces par fonction  
level-set dans un maillage régulier

# Conclusion

- La méthode **XFEM/Level-set** est bien appropriée pour la modélisation et la simulation des problèmes de microstructures avec **interfaces imparfaites/énergies de surfaces**
- Le cadre théorique des **interfaces imparfaites** permet de traiter une **large famille de problèmes physiques** (effets de surfaces dans les nanomatériaux, interphases, résistance de Kapitza...)
- La fonction **level-set** permet naturellement de **construire les fonctions discontinues** associées à l'approximation XFEM pour des interfaces courbes arbitraires, ainsi que les **opérateurs surfaciques** intervenant dans les formulations
- **Pas de maillage des interphases** : méthode efficace



# Les méthodes sans maillage et méthodes associées: historique

Particles methods, radial basis functions	Moving least squares	Partition of Unity, generalized finite elements	Natural neighbor Galerkin methods
Lucy 1977 ( <b>SPH</b> ) Monaghan 1982 Kansa 1990	Lancaster 1981 Liska Orkisz (1980) Nayrolles, Villon, Touzot 1992 ( <b>DEM</b> ) Belytschko et al. 1994 ( <b>EFG</b> ) Liu et al. 1995 ( <b>RKPM</b> )	Babuska & Melenk 1996 <b>(PUM)</b> Duarte Oden <b>(hp-clouds)</b> Moës, Belytschko, Dolbow, et al. 1999 <b>(X-FEM)</b>	Sibson 1980 <b>(natural neighbor interpolant)</b> Sambridge et al. 1994 ( <b>NEM</b> ) Sukumar et al. 1998

## Les différentes méthodes existantes (2008)

**Smoothed particle hydrodynamics (SPH) (1977)**

Diffuse element method (DEM) (1992)

**Element Free Galerkin method (EFG / EFGM) (1994)**

Reproducing kernel particle method (RKPM) (1995)

**Natural Element Method (NEM)**

Material Point Method (MPM)

**Meshless Local Petrov Galerkin (MLPG)**

Generalized Finite Differences (GFDM)

**Particle-in-cell (PIC)**

Local Maximum Entropy (LME)

**Moving Particle Finite Element Method (MPFEM)**

Finite clous method (FCM)

**Boundary nodes method (BNM)**

Bondary Cloud Mthod (BCM)

**Method of Finite Spheres (MFS)**

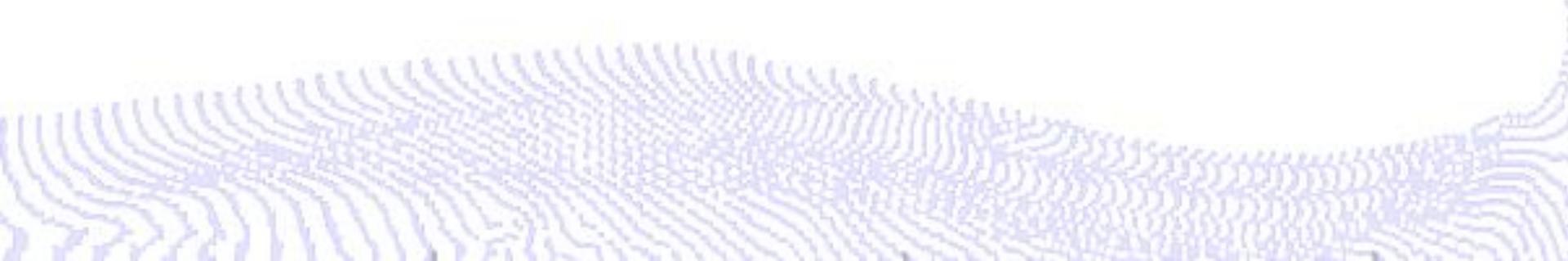
Méthodes associées

Moving least squares (MLS) – Moindres carrés mobiles

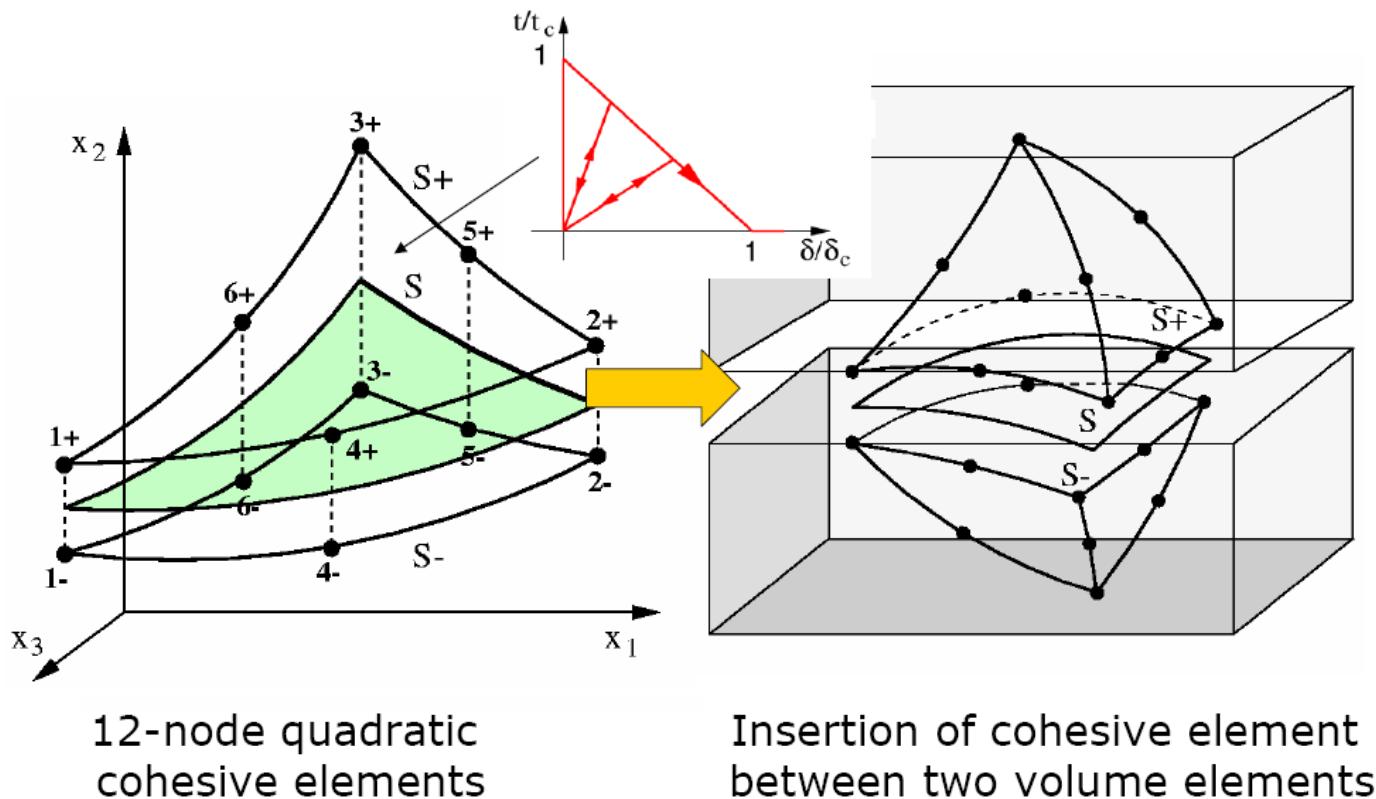
**Partition of unity methods (PUM)**

(XFEM, GFEM) - variants of FEM

# Eléments finis cohésifs

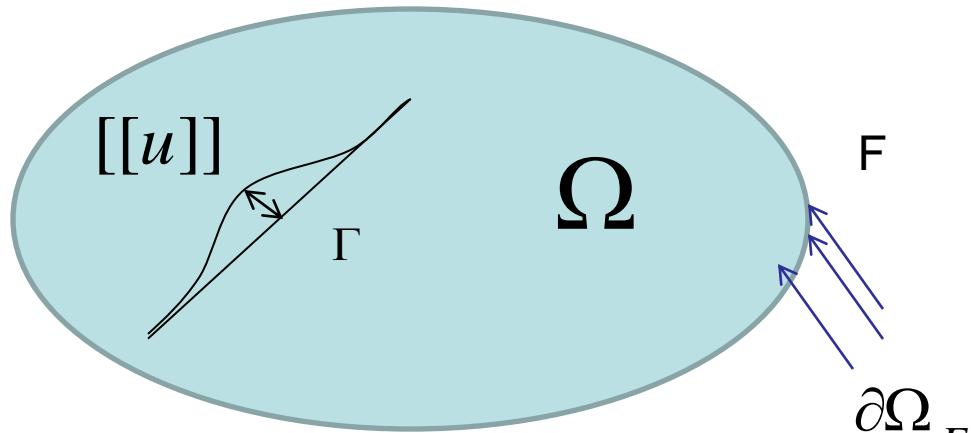


# Elements finis cohésifs



[Ortiz and Padolfi 99]

## Forme faible en élasticité HPP



Effort normal à l'interface

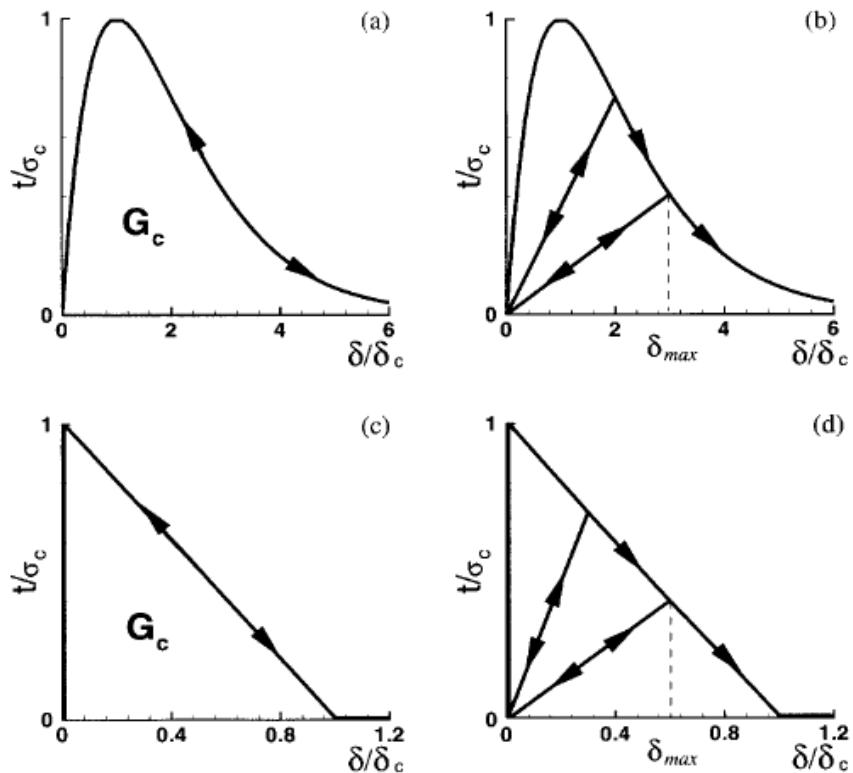
$$\int_{\Omega} \sigma : \varepsilon(\delta u) d\Omega + \int_{\Gamma} t \cdot [[\delta u]] d\Gamma = \int_{\partial\Omega_F} \delta u \cdot F d\Gamma + \int_{\Omega} \delta u \cdot b d\Omega$$

$$t = f([[u]])$$

$$\int_{\Omega} \sigma : \varepsilon(\delta u) d\Omega + \int_{\Gamma} f([[u]]) [[\delta u]] d\Gamma = \int_{\partial\Omega_F} \delta u \cdot F d\Gamma + \int_{\Omega} \delta u \cdot b d\Omega$$

Saut de déplacements à l'interface

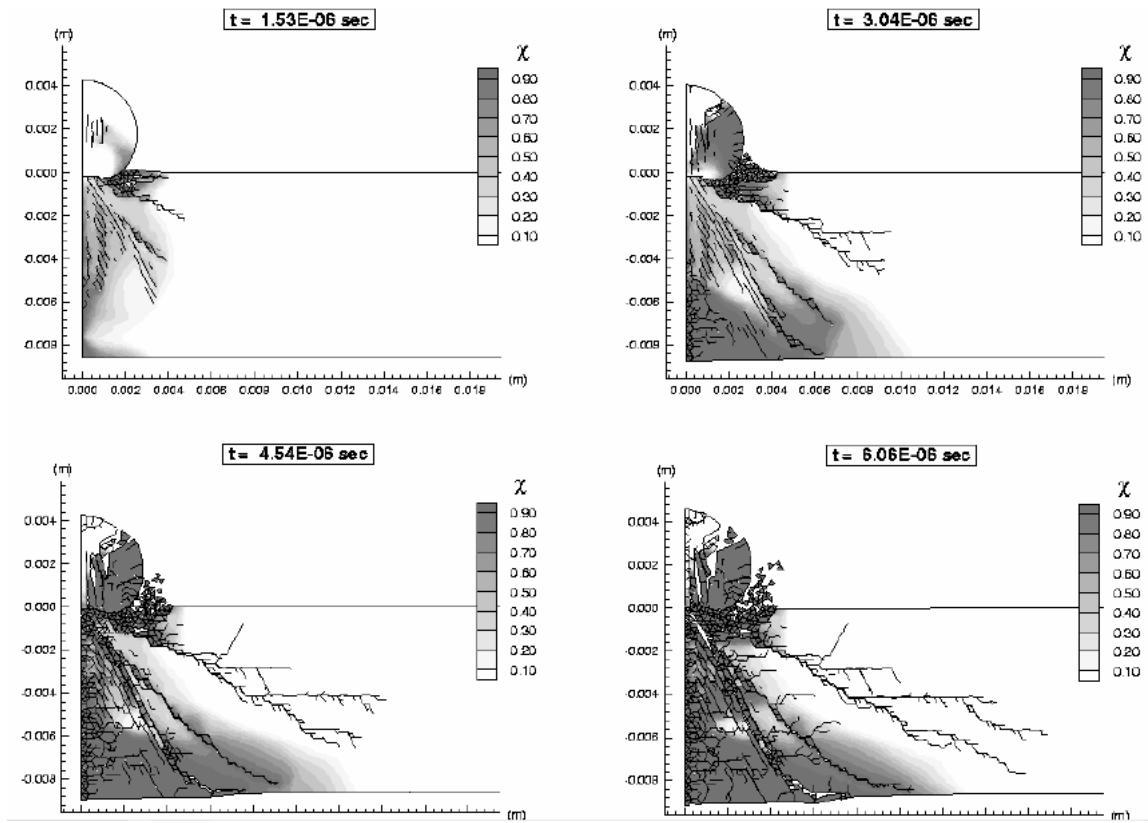
## 2.2. Cohesive elements



$G_c$  : énergie critique de fissuration

Relations saut de déplacement/effort normal à l'interface pour quelques lois de décohésions]

## 2.2. Cohesive elements

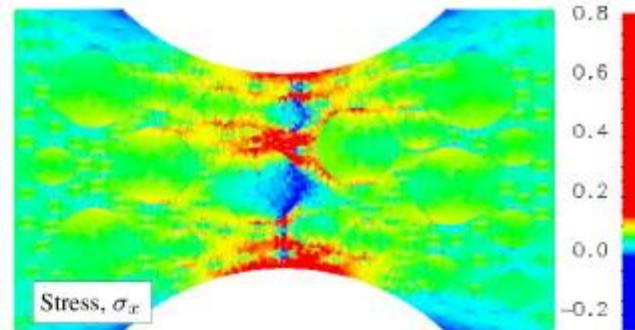
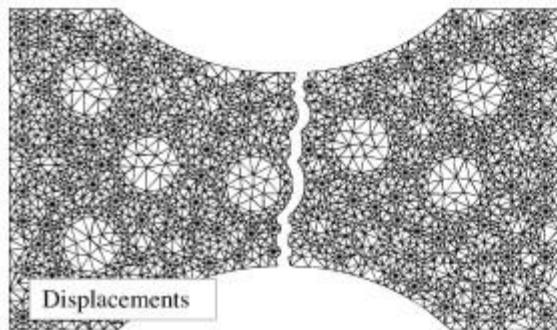


**Impact entre palet en acier contre plaque céramique**

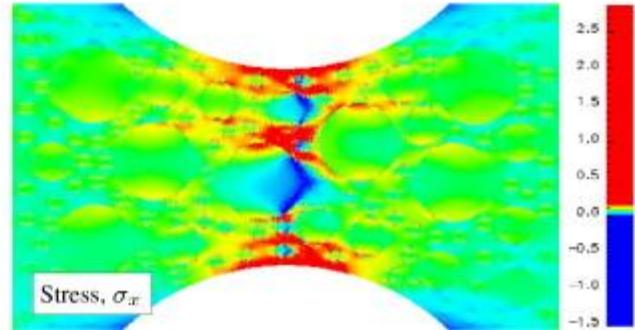
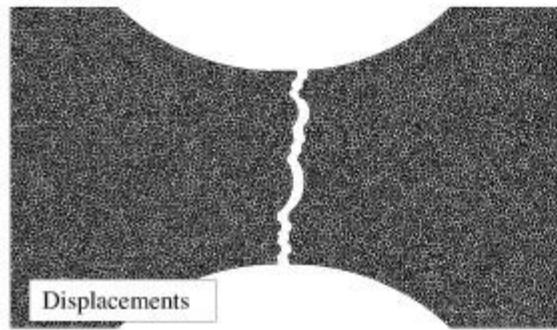
[Camacho and Ortiz 1996]

# Modélisation de la fissuration dans les matériaux hétérogènes

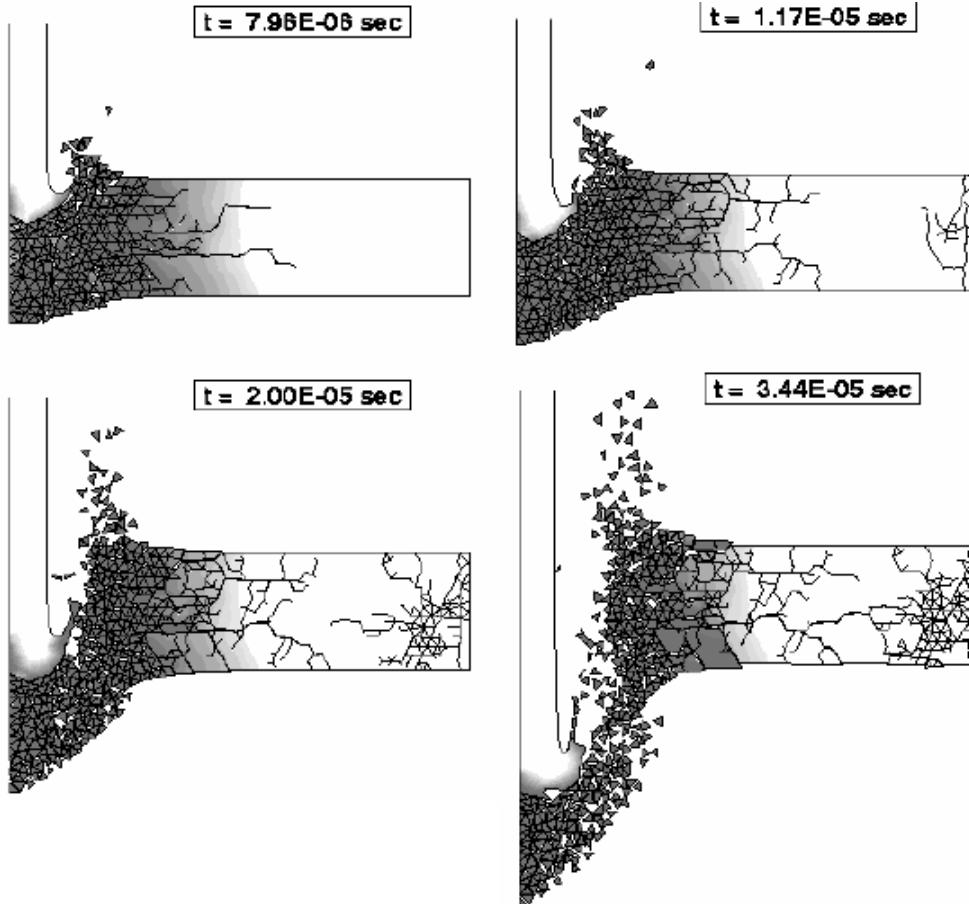
Coarse mesh



Fine mesh



## 2.2. Cohesive elements



[Camacho and Ortiz 1996]

d.35

# Conclusion

- Possibilité de modéliser les problèmes en grandes déformations
- Possibilité de modéliser simplement les fissures, la séparation de la matière
- Aujourd'hui un grand nombre de difficultés ont été levées (conditions aux limites, intégration numérique...)
- Ces méthodes commencent à être dans les codes de calcul commerciaux (Abaqus...)

# Quelques références

## Méthodes sans maillage

### Meshless methods: An overview and recent developments

Author(s): Belytschko T, Krongauz Y, Organ D, et al.

Source: COMPUTER METHODS IN APPLIED MECHANICS AND ENGINEERING Volume: 139 Issue: 1-4 Pages: 3-47 Published: DEC 15 1996

## Méthode XFEM

### A finite element method for crack growth without remeshing

Author(s): Moes N, Dolbow J, Belytschko T

Source: INTERNATIONAL JOURNAL FOR NUMERICAL METHODS IN ENGINEERING Volume: 46 Issue: 1 Pages: 131-150 Published: SEP 10 1999

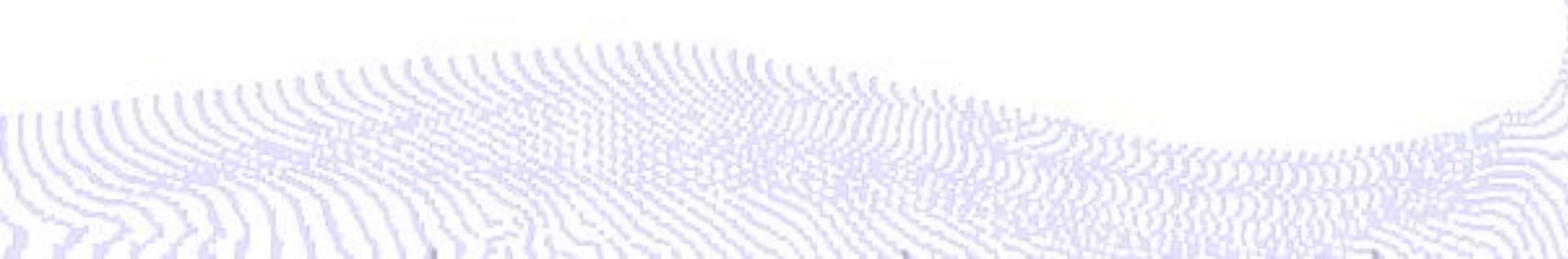
## Eléments cohésifs

### Computational modelling of impact damage in brittle materials

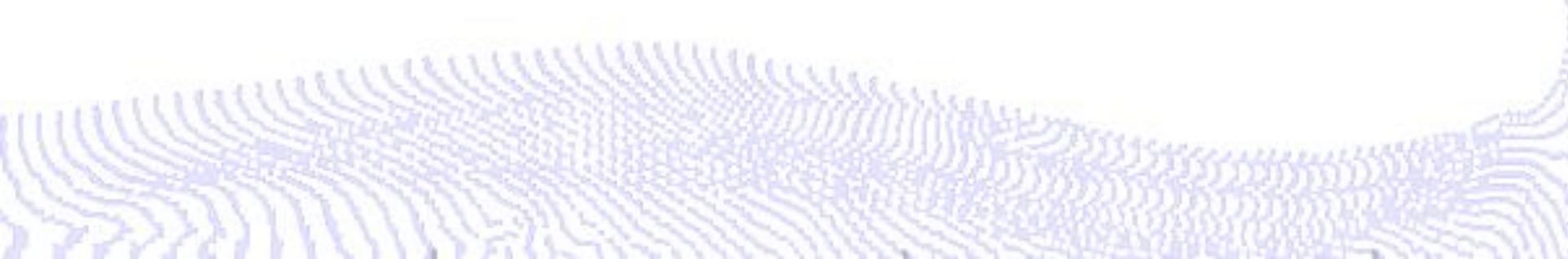
Author(s): Camacho GT, Ortiz M

Source: INTERNATIONAL JOURNAL OF SOLIDS AND STRUCTURES Volume: 33 Issue: 20-22 Pages: 2899-2938 Published: AUG 1996

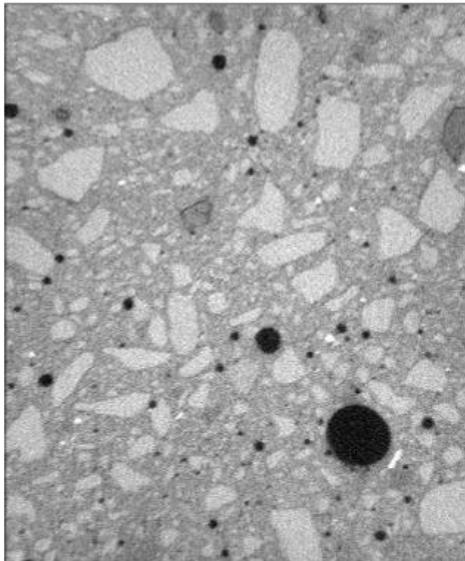
# Microstructures complexes dans des grilles fixes



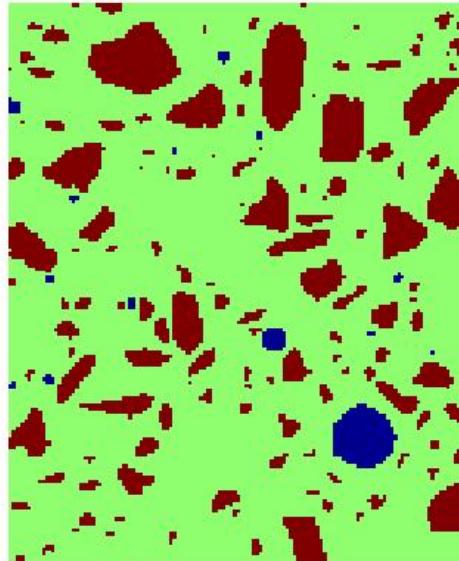
# Space Lippmann-Schwinger method (SLS)



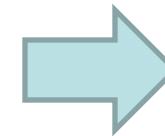
# Motivations: computing local and effective thermomechanical fields on voxel-based models



Microtomography images  
(cement paste)



Voxel-based model



Local and effective  
thermomechanical  
fields

Finite element method, FD, FV... limitations:

- Constructing a mesh from pixels/voxel: delicate task for complex (3D) microstructures
- Mesh of elements matching the voxels: huge systems of equations to store and solve

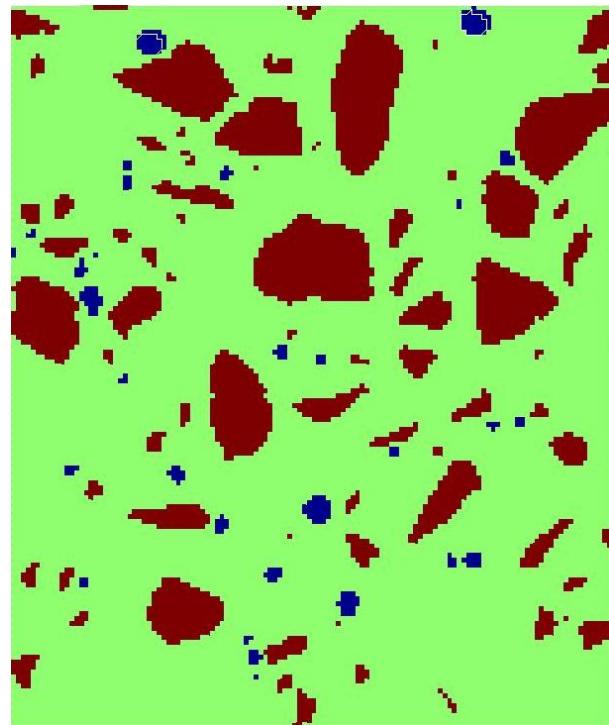
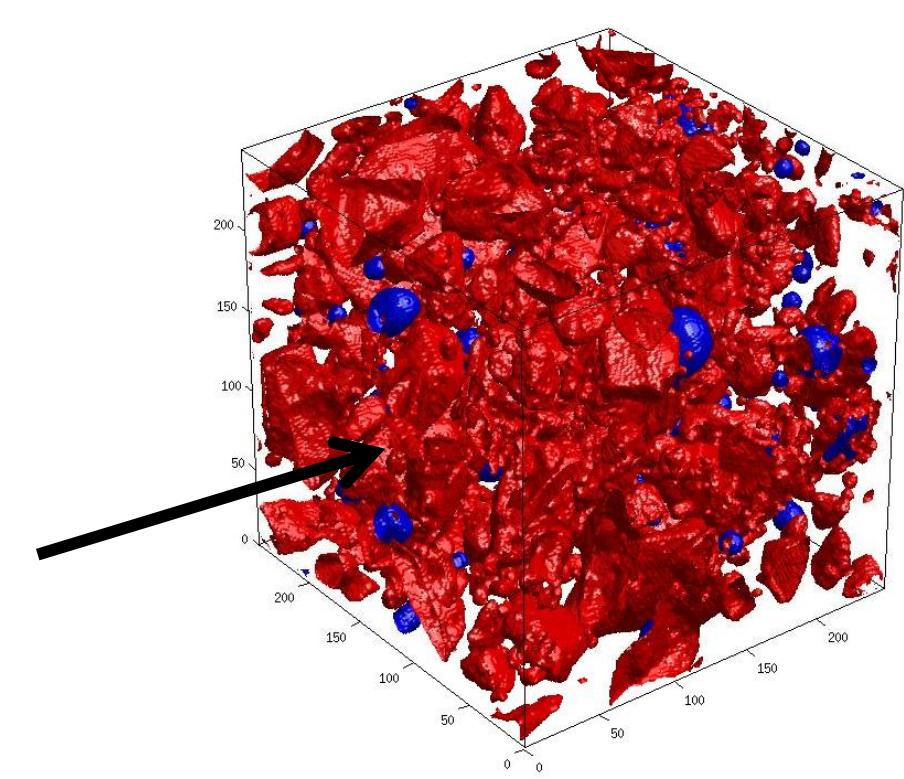


Image segmentée de pâte de ciment

# Lippmann-Schwinger matrix-free iterative schemes for periodic fields

Balance of linear momentum

$$\nabla \cdot (\mathbb{C}(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x})) = 0 \quad \text{in } \Omega$$

Averaging condition

$$\langle \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) \rangle_{\Omega} = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$$

Split of strains into fluctuating and average parts

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

Split of elastic properties into constant (reference medium) and fluctuating parts

$$\mathbb{C}(\mathbf{x}) = \mathbb{C}^0 + \delta\mathbb{C}(\mathbf{x}) \quad \delta\mathbb{C}(\mathbf{x}) = \mathbb{C}(\mathbf{x}) - \mathbb{C}^0$$

# Lippmann-Schwinger matrix-free iterative schemes

Auxiliary problem

$$\nabla \cdot (\mathbb{C}^0 : \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{x})) = -\nabla \cdot (\delta \mathbb{C} : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}))$$

Lippmann-Schwinger form of balance equation

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} - \int_{\Omega} \Gamma^0(\mathbf{x} - \mathbf{y}) : \hat{\boldsymbol{\tau}}(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x})) d\Omega$$

Polarization stress field

$$\hat{\boldsymbol{\tau}}(\mathbf{x}) = \delta \mathbb{C}(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x})$$

# Matrix-free iterative solver: Neumann series expansion

$$\varepsilon(\mathbf{x}) = \bar{\varepsilon} + \mathcal{L}(\varepsilon(\mathbf{x})) \quad (1) \quad \text{If } \|\mathcal{L}\| < 1 \quad (1) \text{ admits a unique solution given by}$$

$$\varepsilon(\mathbf{x}) = (\mathbb{I} - \mathcal{L})^{-1} \bar{\varepsilon}$$

Neumann series approximation:

$$(\mathbb{I} - \mathcal{L})^{-1}(\cdot) = \mathbb{I} + \mathcal{L}(\cdot) + \mathcal{L}(\mathcal{L}(\cdot)) + \dots + \mathcal{L}^n(\cdot)$$

**Matrix-free Iterative scheme:**

$$\varepsilon^{k+1}(\mathbf{x}) = \bar{\varepsilon} + \mathcal{L}(\varepsilon^k(\mathbf{x}))$$

Similar approaches: FFT method [Moulinec, Suquet 1994, Michel, Moulinec, Suquet 1999, 2000, 2001]

- Computation of the convolution product and expression of the Green operator in the Fourier space
- Requires to apply Fourier/Inverse Fourier transforms at each iteration

# A space Lippmann-Schwinger approximation without Fourier transform [Yvonnet 2011, under review]

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x})^{k+1} = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} + \mathcal{L}(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x})^k)$$

$$L_{ijkl} = \sum_p \Psi_{ijmn}^p(\mathbf{x}) : \delta C_{mnkl}(\mathbf{x})$$

Local basis functions with compact support computed by FEM on a small grid

$$\psi_{ijkl}^p(\mathbf{x}) = \varepsilon_{ij} \left( \phi^{p,kl}(\mathbf{x}) \right) \equiv \varepsilon_{ij}^{p,kl}(\mathbf{x})$$

Problem to be solved on a small grid (3 in 2D, 6 in 3D)

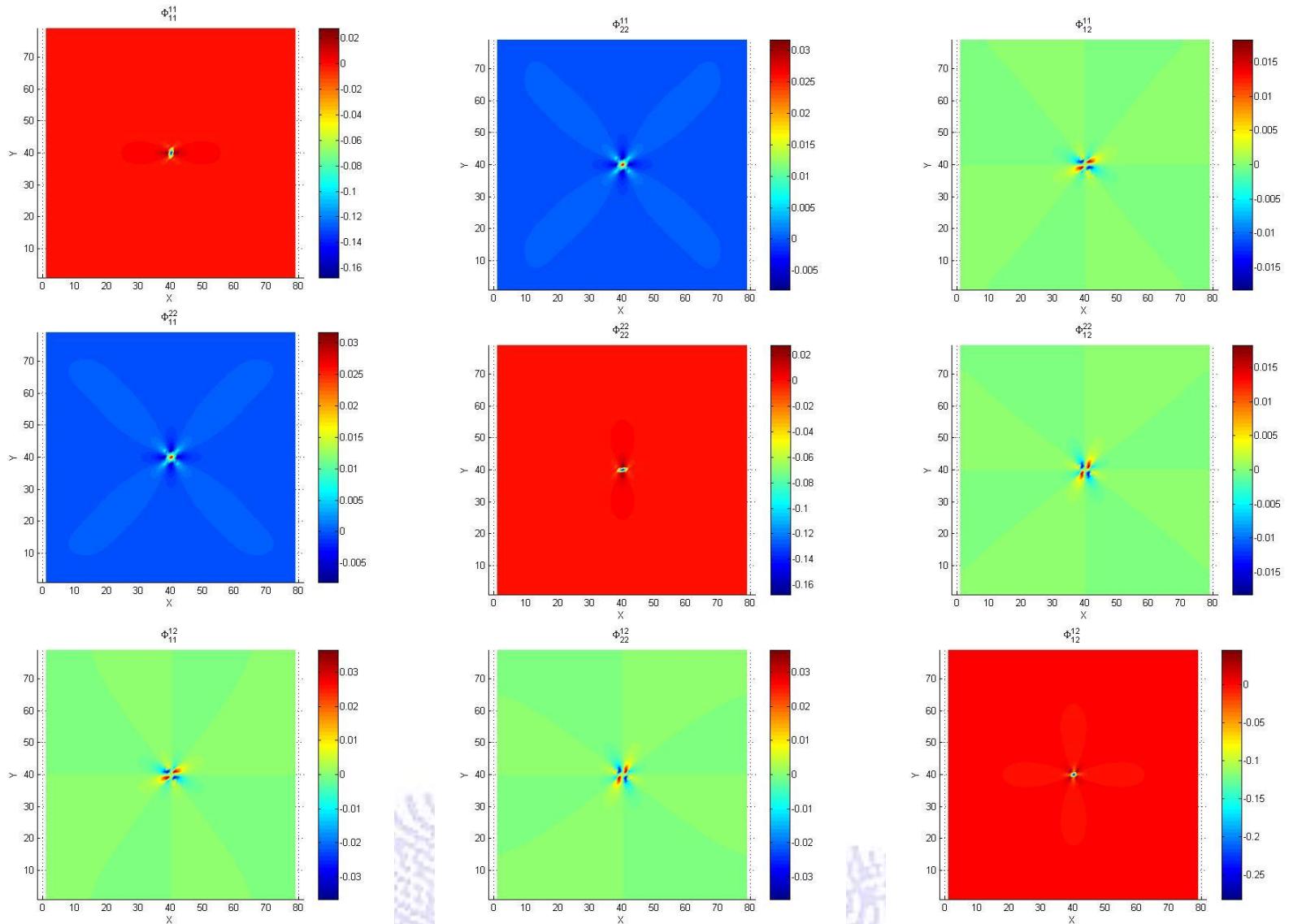
$$\nabla \cdot (\mathbb{C}^0 : \boldsymbol{\varepsilon}^{p,kl}(\mathbf{x})) = -\nabla \cdot (\mathcal{S}^{p,kl}(\mathbf{x}))$$



$$\phi^{p,kl}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \quad \text{on } \partial\mathcal{D}^p$$

Unitary eigenstress in the voxel p

# Basis functions of linear operator (2D elastostatics problem)



# The iterative scheme

1. Initialize  $\boldsymbol{\varepsilon}^0(\mathbf{x}) = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$ ,  $\boldsymbol{\sigma}^0(\mathbf{x}) = \mathbb{C}(\mathbf{x}) : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$ .

WHILE  $C(\boldsymbol{\varepsilon}^{n+1}) > \delta$

2. Compute

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{ij}^{n+1}(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\varepsilon}_{ij}^n(\mathbf{x}) + \sum_p \psi_{ijkl}^p(\mathbf{x}) \boldsymbol{\sigma}_{kl}^n(\mathbf{x}^p).$$

Computed by preliminary FEM computations and stored

3. Compute the stress  $\boldsymbol{\sigma}^{n+1}(\mathbf{x}) = \mathbb{C}(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\varepsilon}^{n+1}(\mathbf{x})$ .

4. Compute  $C(\boldsymbol{\varepsilon}^{n+1})$ .

5. Go to (2).

Only involves sums (independent) at each iteration

- **No system of equation (matrix) to construct neither to solve**
- **Avoids alternate Fourier transforms**
- All sums can be carried out on different processors  
(straightforward parallel computations)

Convergence criteria: possible choices

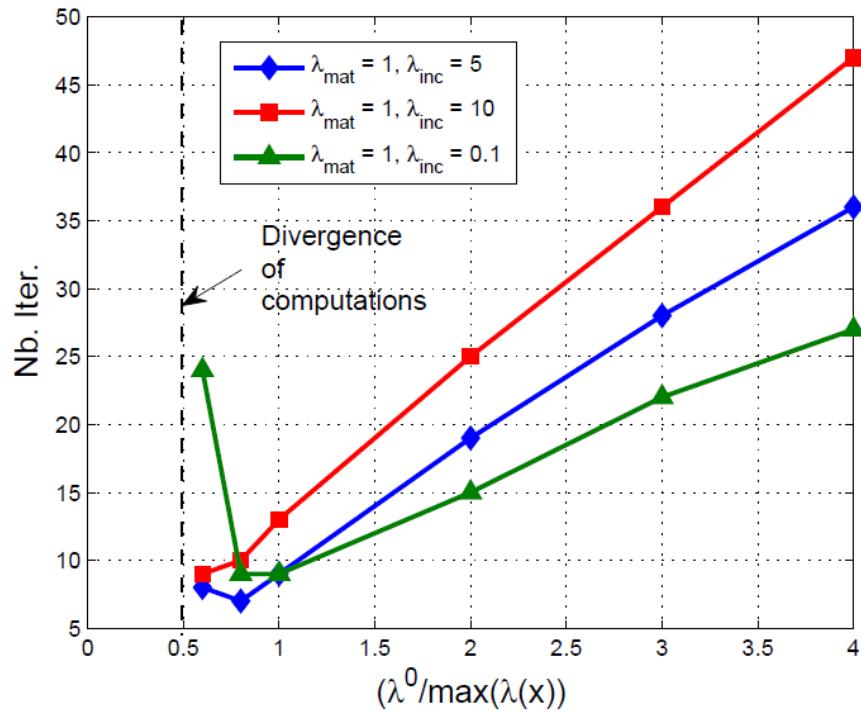
$$C_1 = \frac{\|\boldsymbol{\sigma}^{n+1}(\mathbf{x}) - \boldsymbol{\sigma}^n(\mathbf{x})\|}{\|\boldsymbol{\sigma}^{n+1}(\mathbf{x})\|}$$

$$C_3 = \frac{\|\langle \boldsymbol{\sigma}^{n+1}(\mathbf{x}) \rangle - \langle \boldsymbol{\sigma}^n(\mathbf{x}) \rangle\|}{\|\langle \boldsymbol{\sigma}^{n+1}(\mathbf{x}) \rangle\|}$$

# Choice of the reference medium

Convergence condition: spectral radius of L  $|r(L)| < 1$

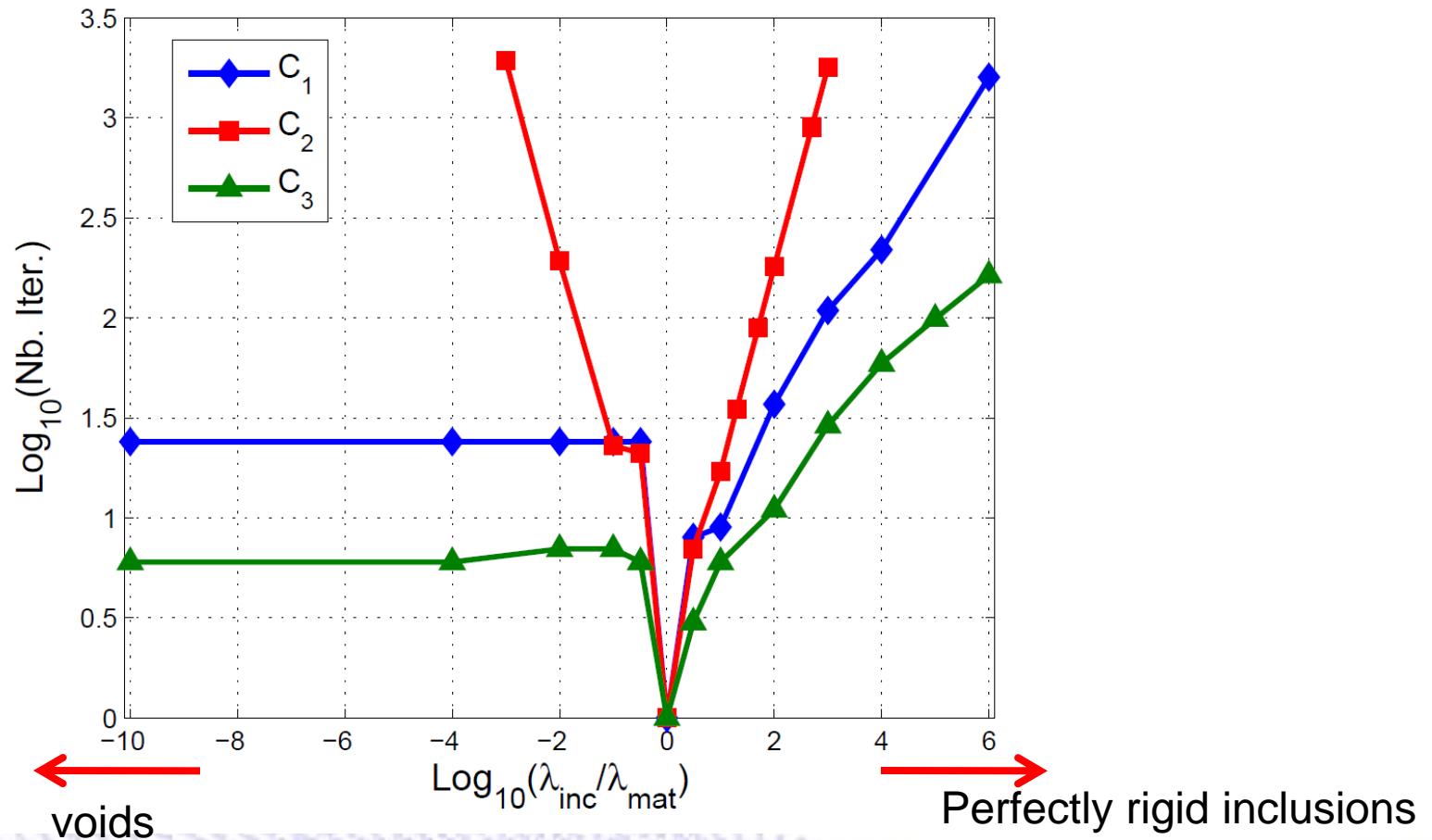
→  $\kappa^0 > \max \{ \kappa(x) \} / 2 , \mu^0 > \max \{ \mu(x) \} / 2$



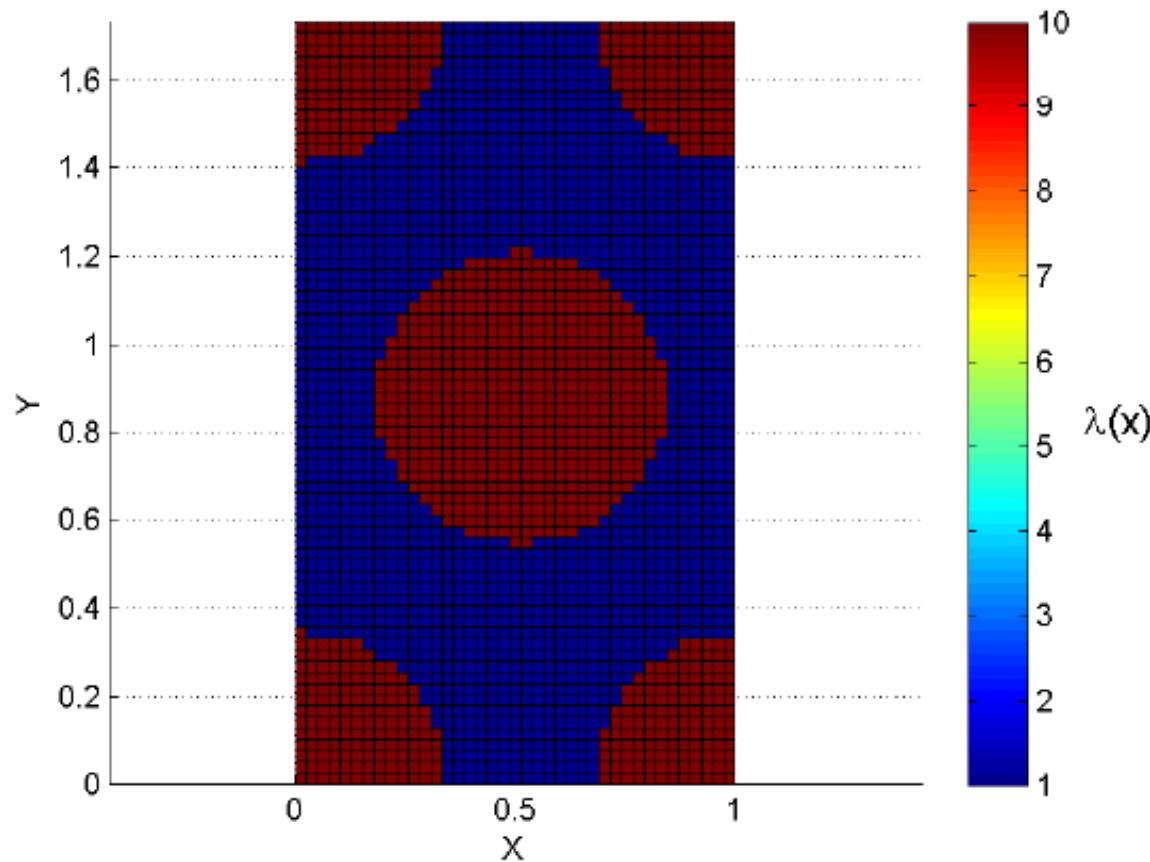
Optimal choice for reference medium

$$\lambda^0 = 0.6 \max(\lambda(x))$$

# Convergence versus contrast of phase properties



# Numerical examples

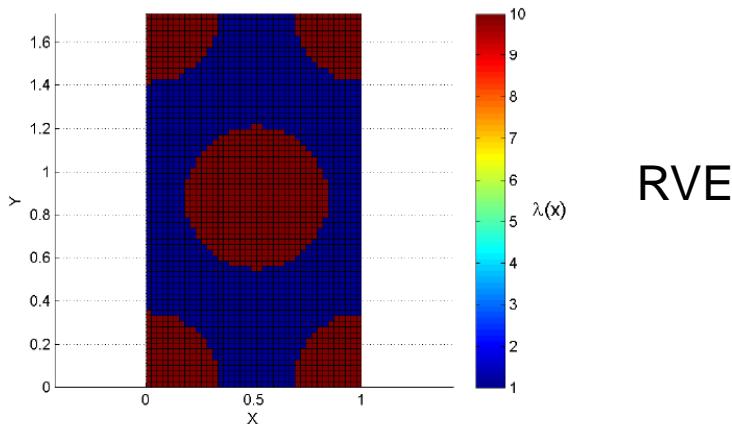


Periodic microstructure

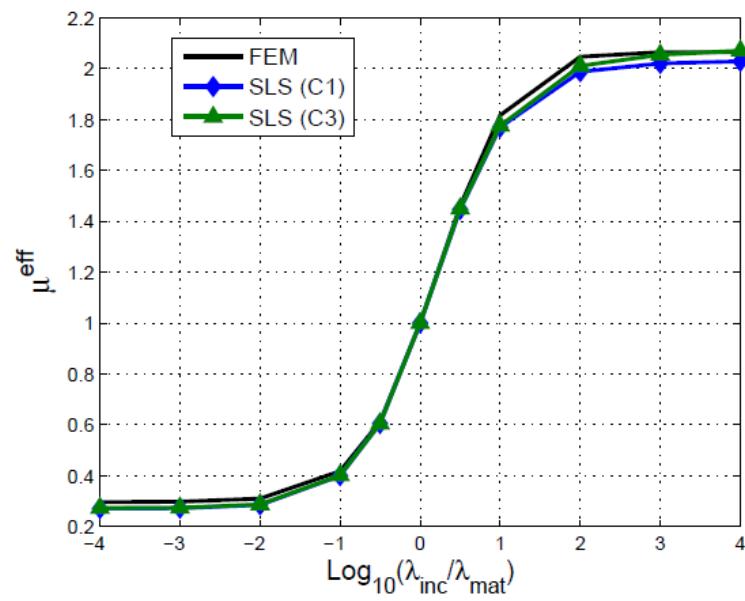
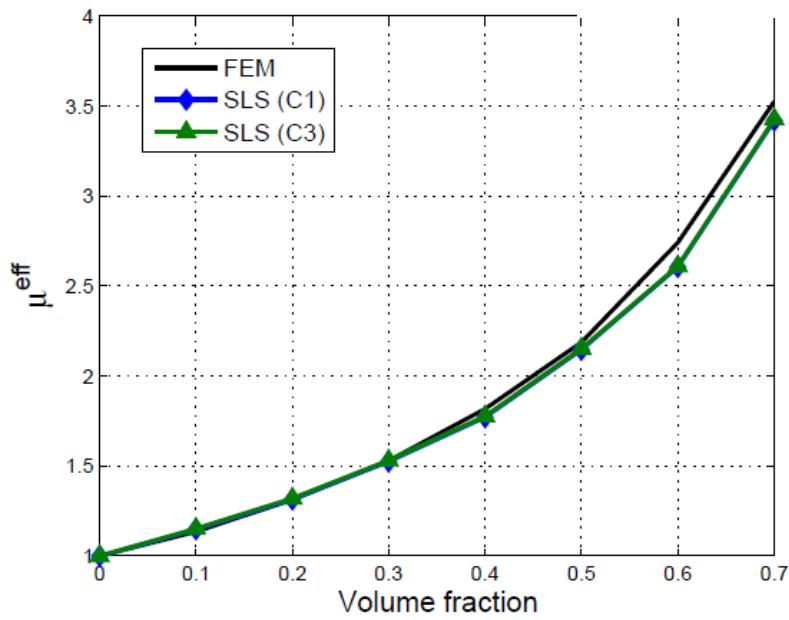
RVE : pixel-based model

# Computation of effective properties

Effective shear modulus



RVE

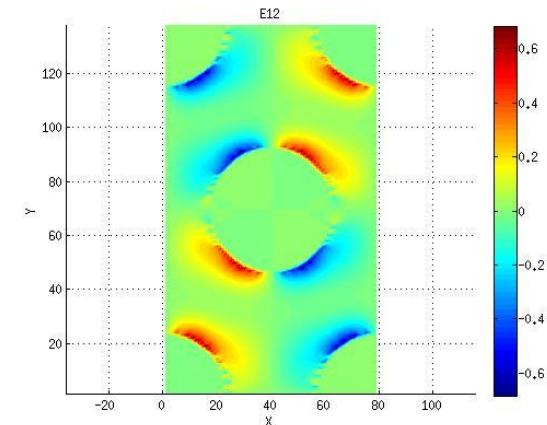
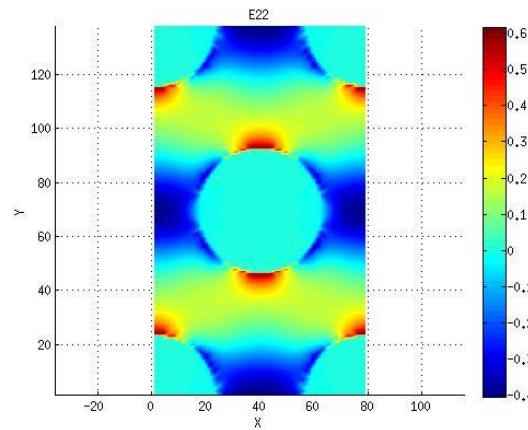
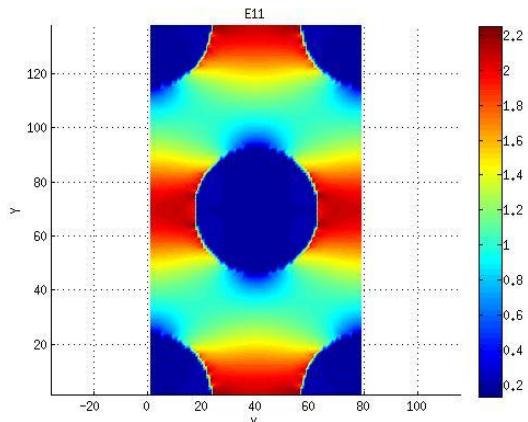


Local fields: RVE 80 x 138 pixels

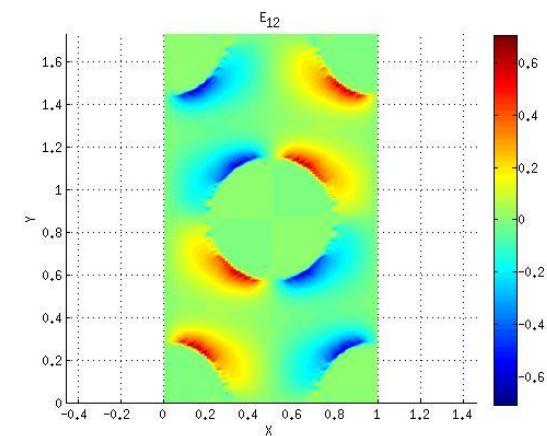
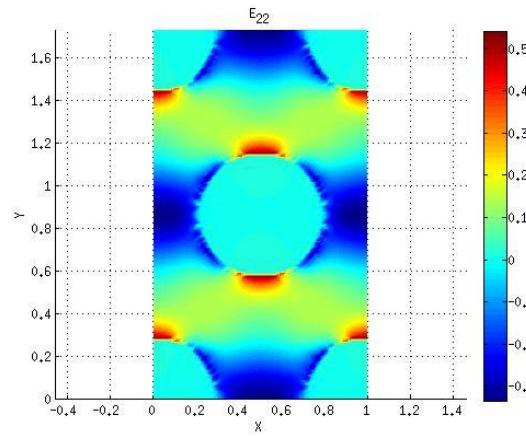
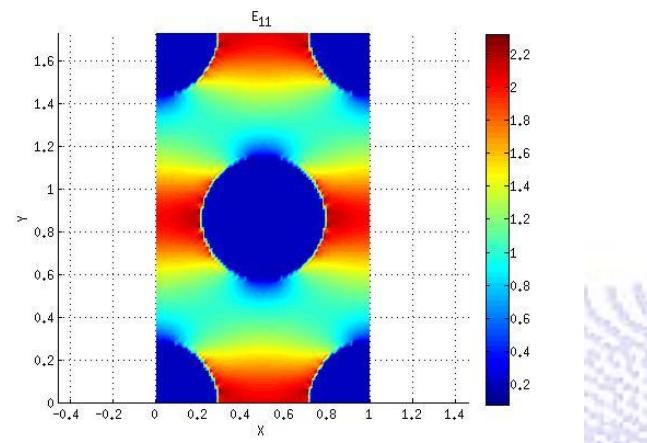
Contratst = 10

Macroscopic strain  $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$

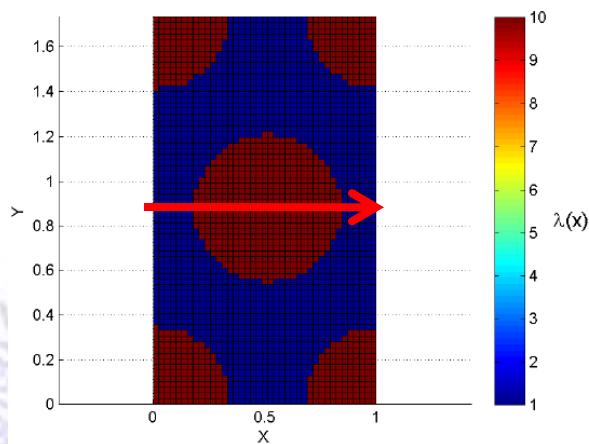
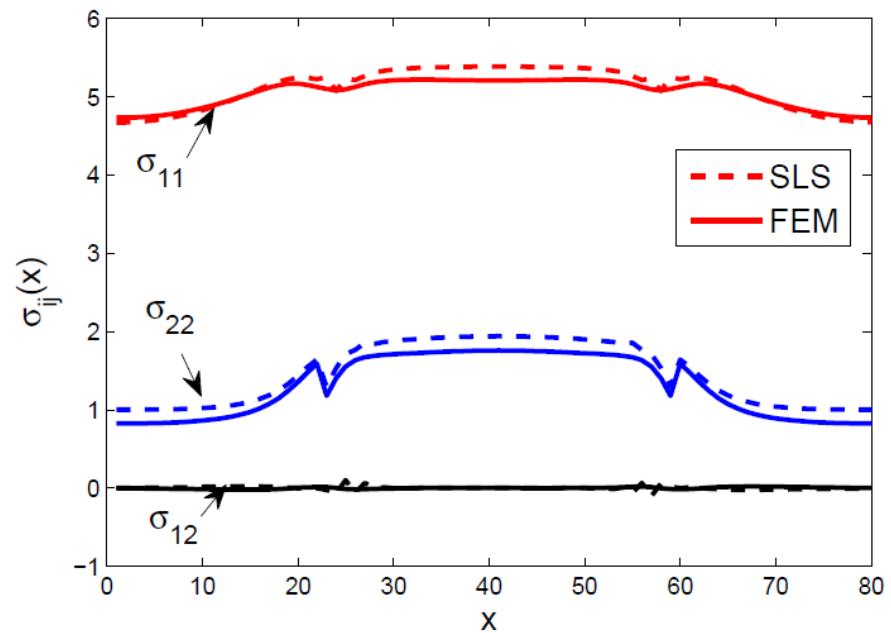
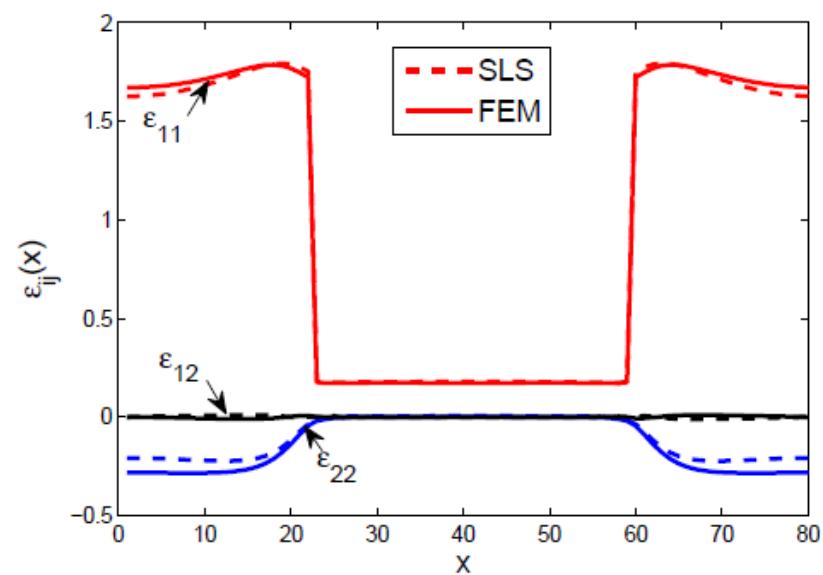
SLS



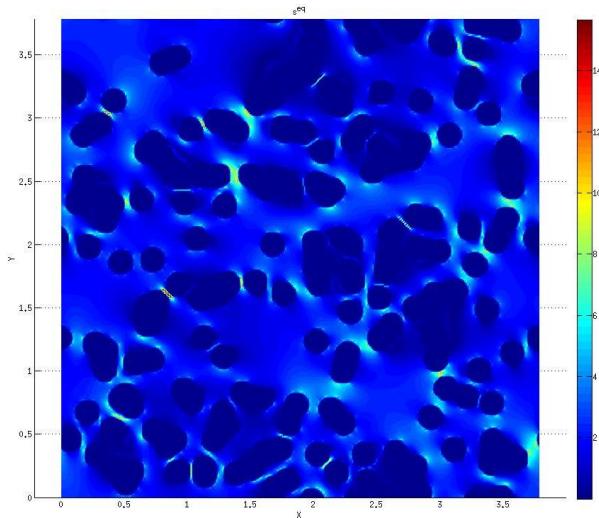
FEM



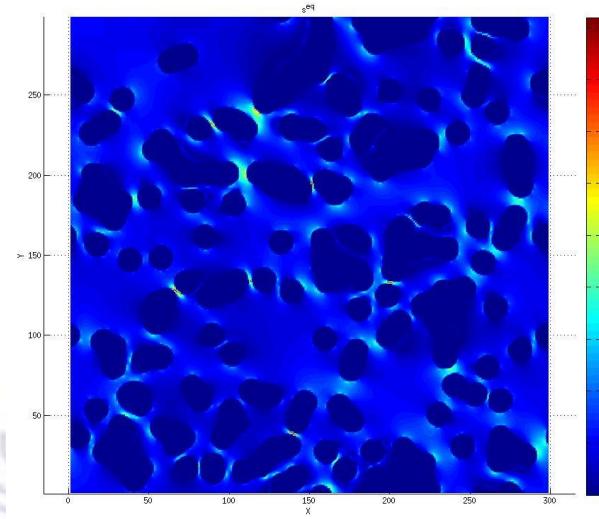
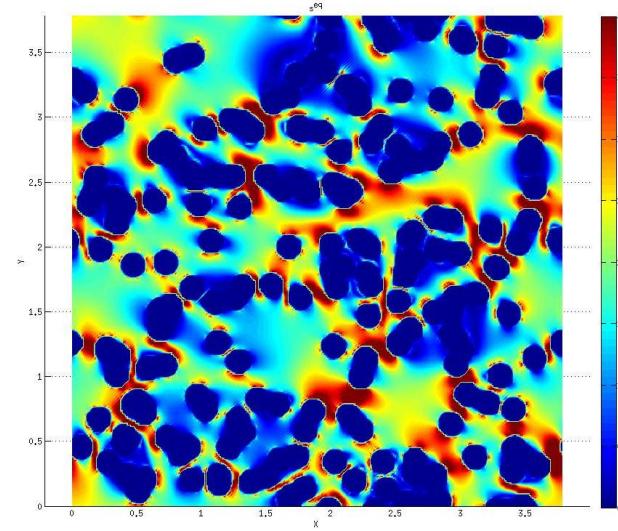
# Local strain and stress fields



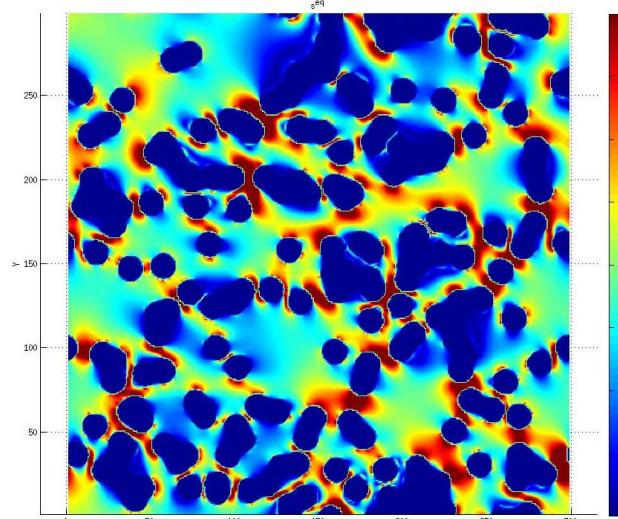
Local fields: voids randomly distributed 300x300 pixels, 200 circular voids volume fraction  $f = 0.4$



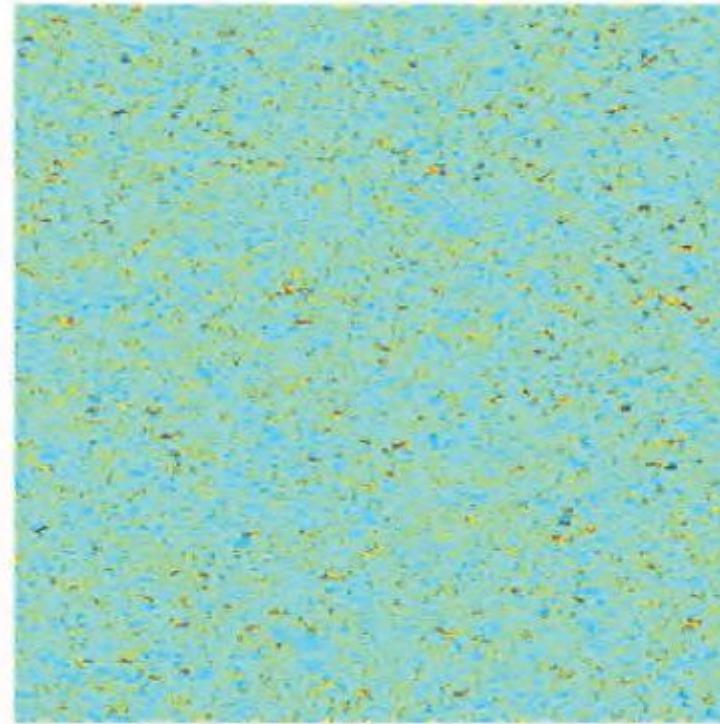
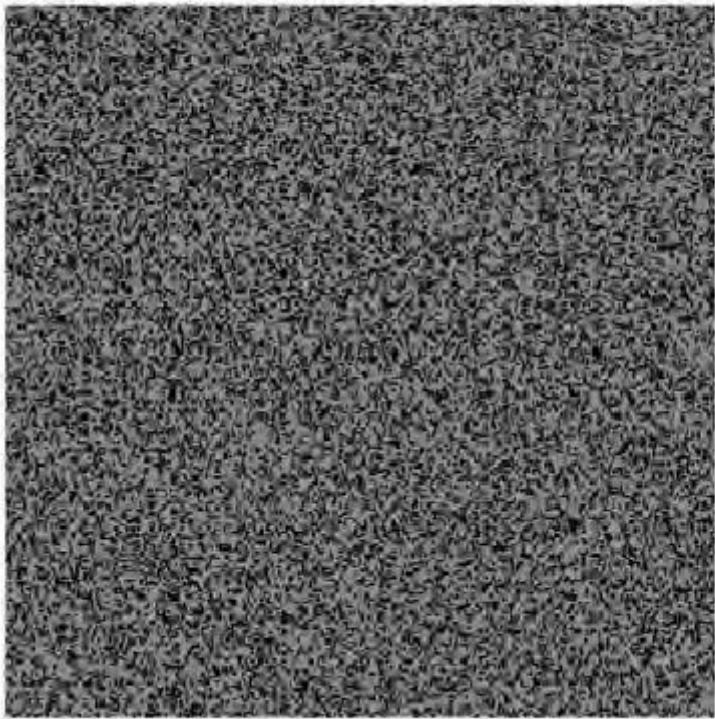
SLS



FEM

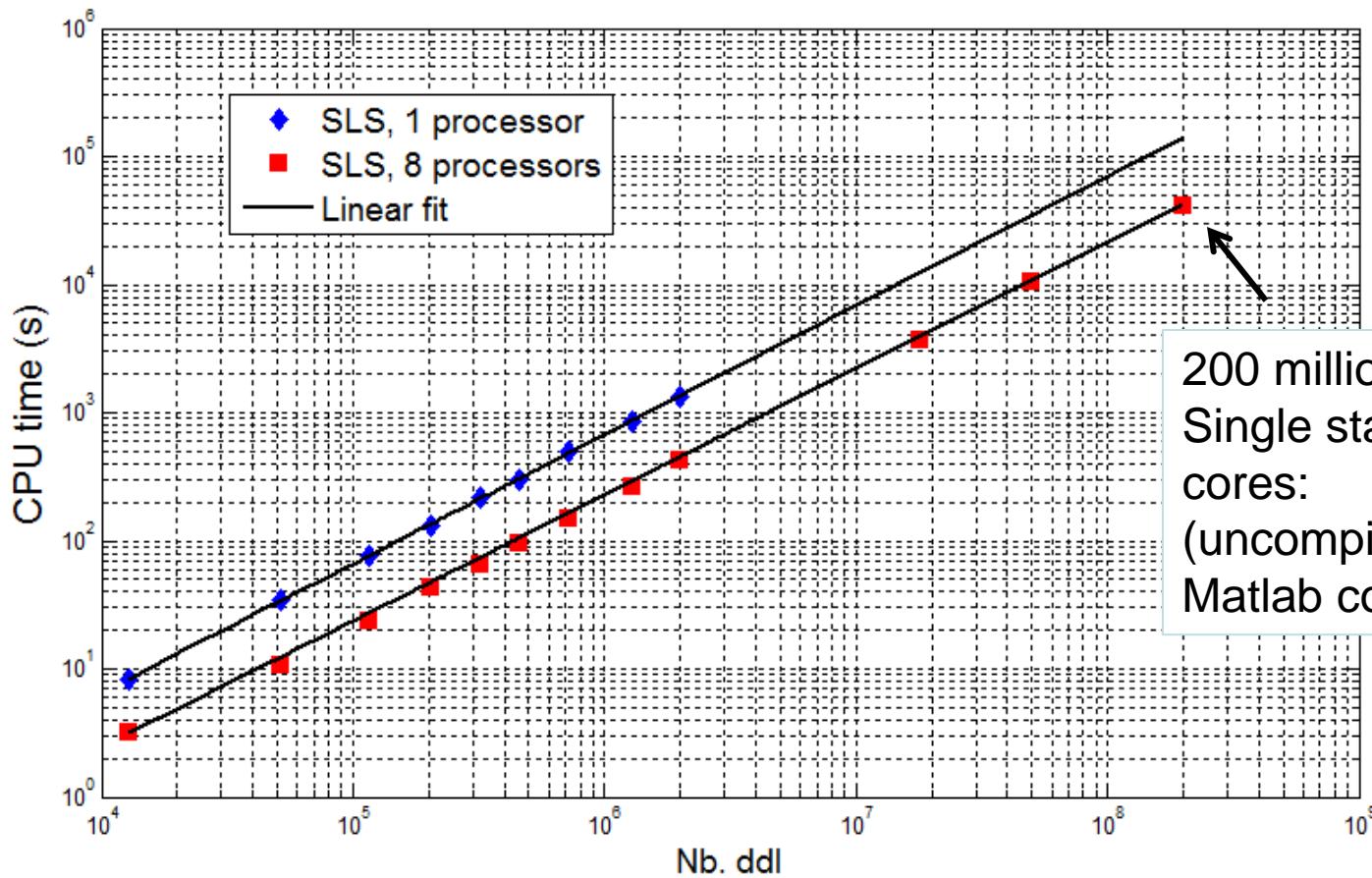


# Computation times: benchmark



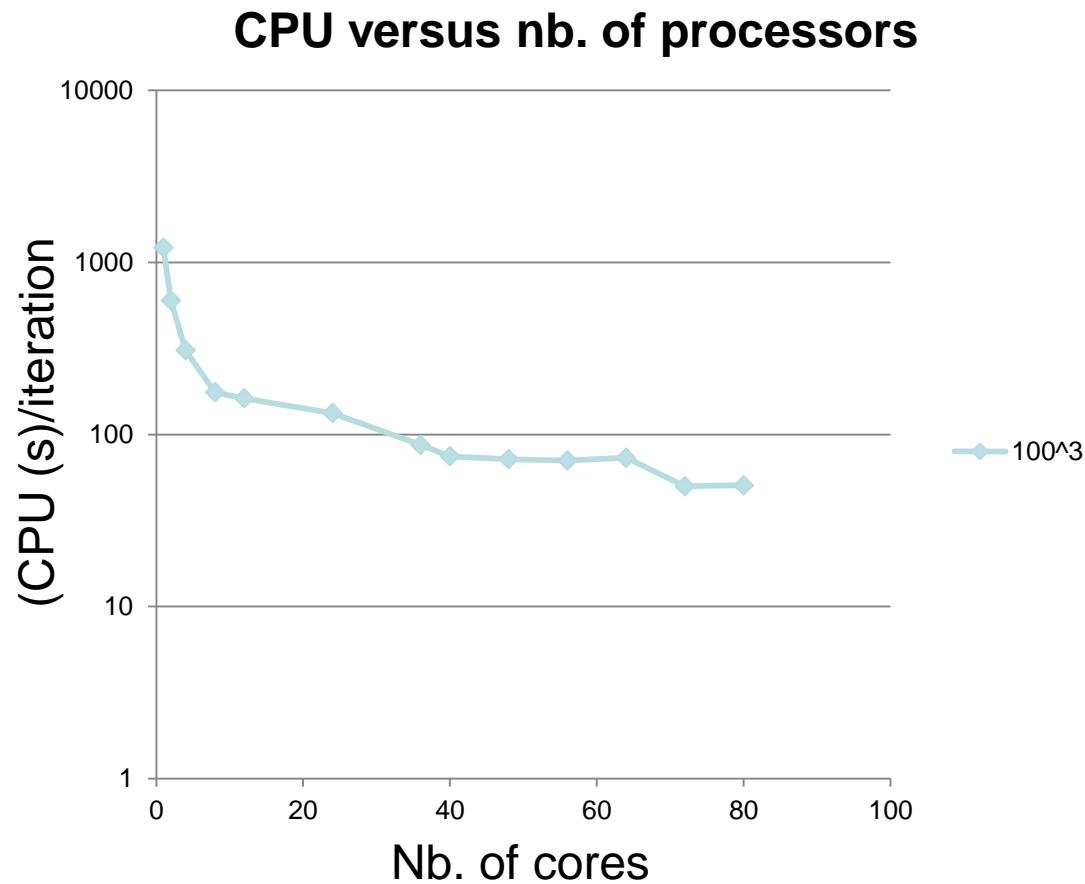
Grille  $20000^2$  voxels grid,  
containing 400000  
circular inclusions

# Linear increase of computational times with respect to number of voxels (degrees of freedom)



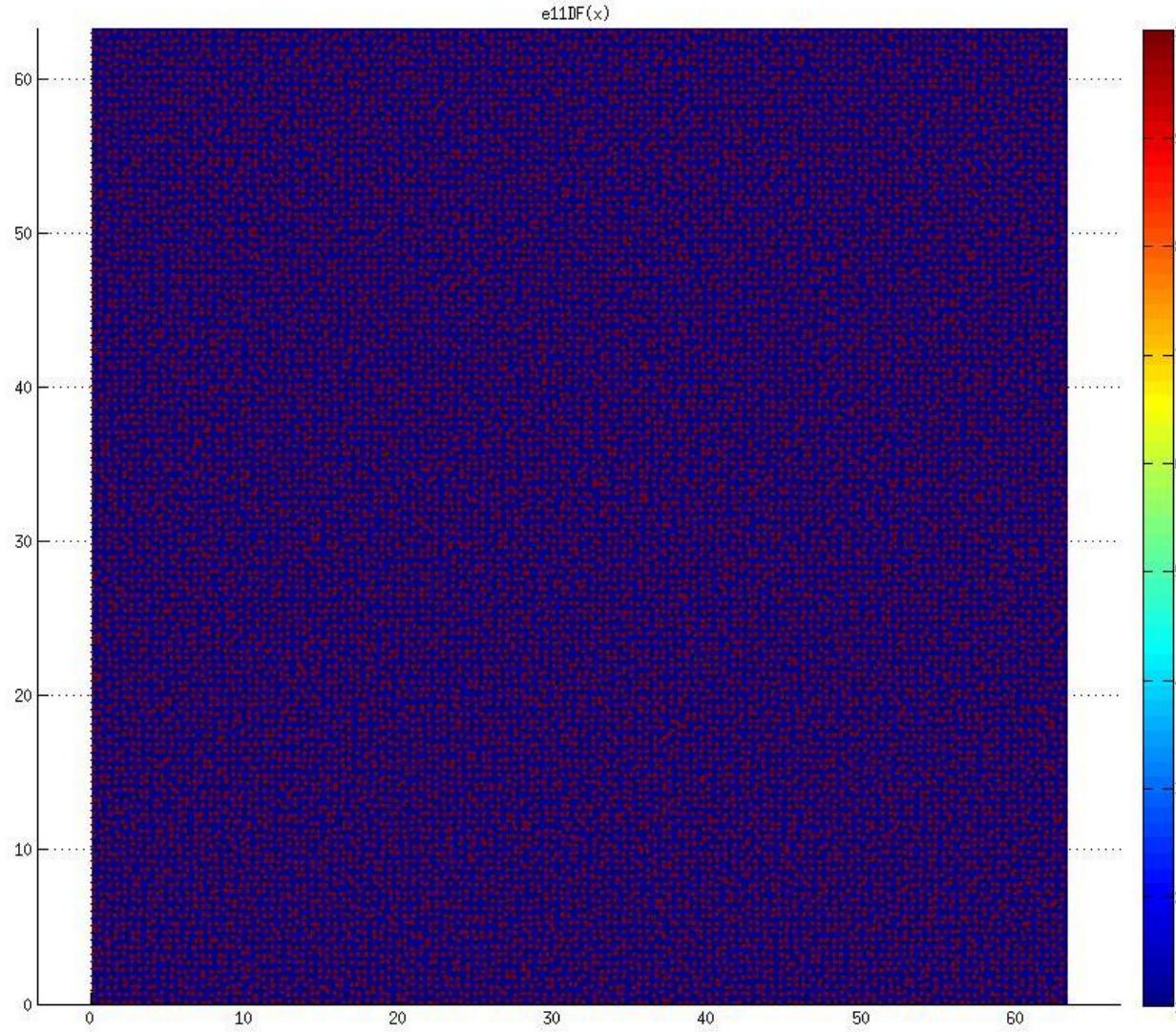
200 millions dof  
Single station, 8 cores:  
(uncompiled Matlab code)

# Parallel computations: 3D case



$100^3$  grid, reduction of Computational times with respect to  
nb. of processors (cores)

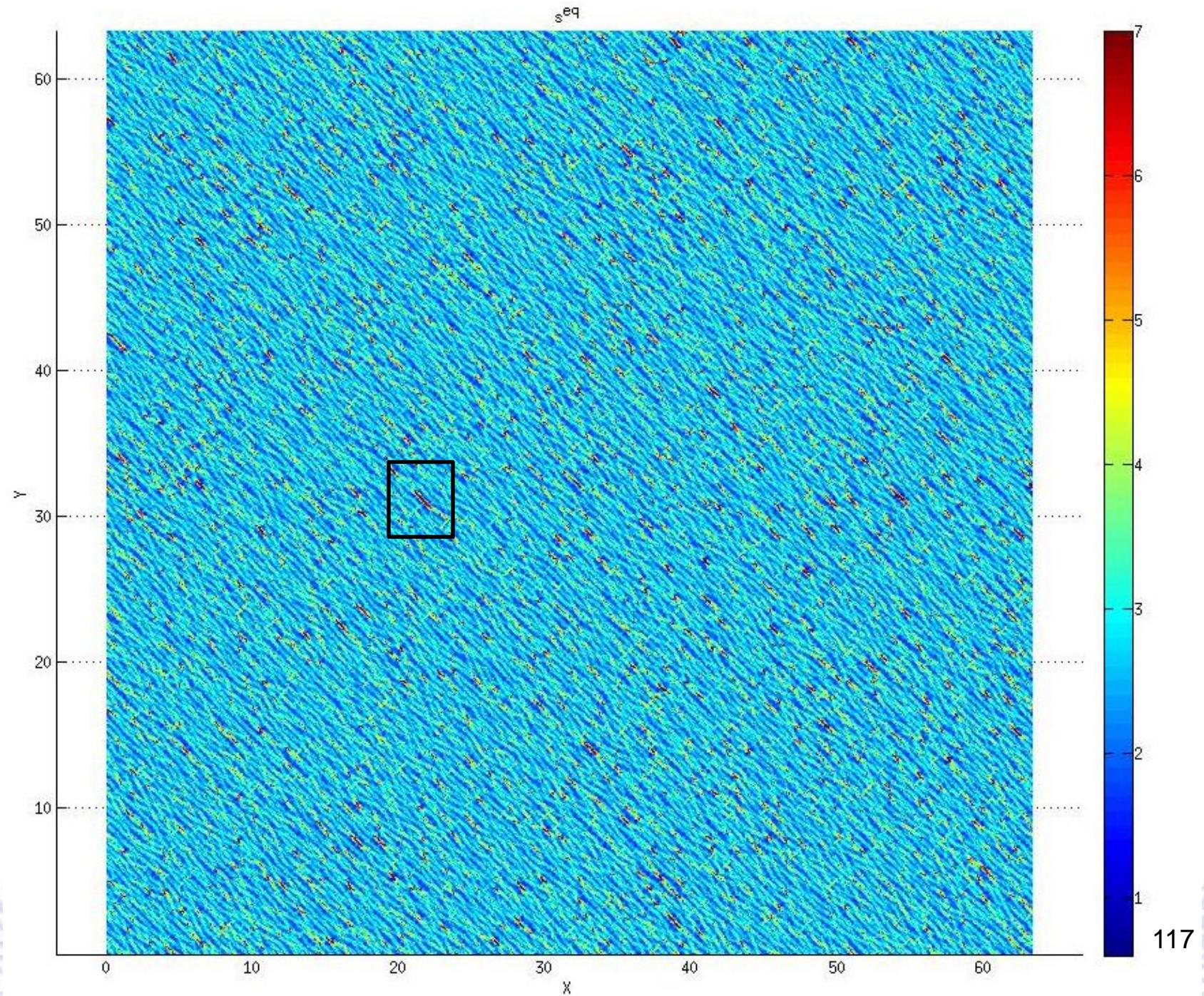
# High resolution microstructural model

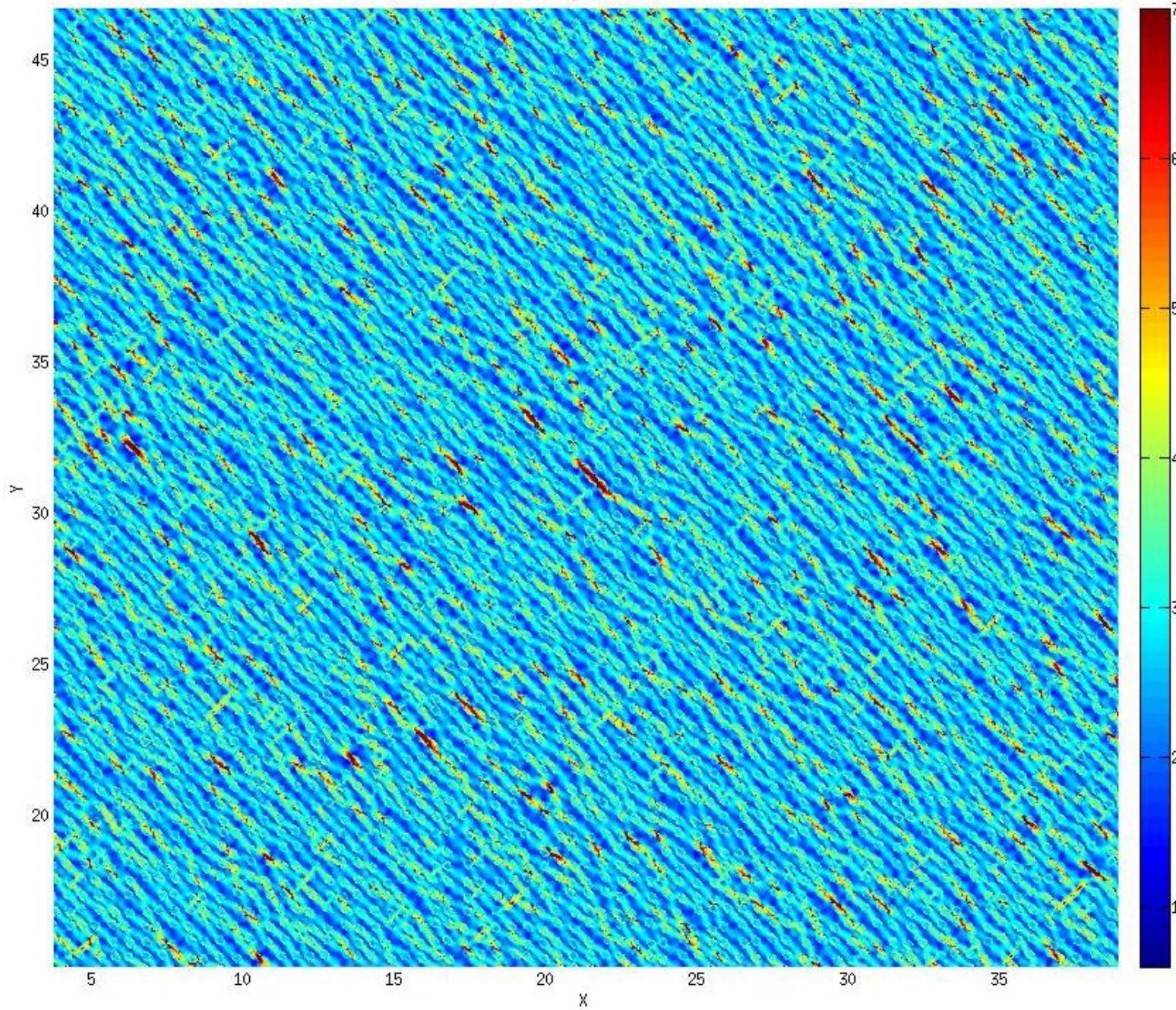


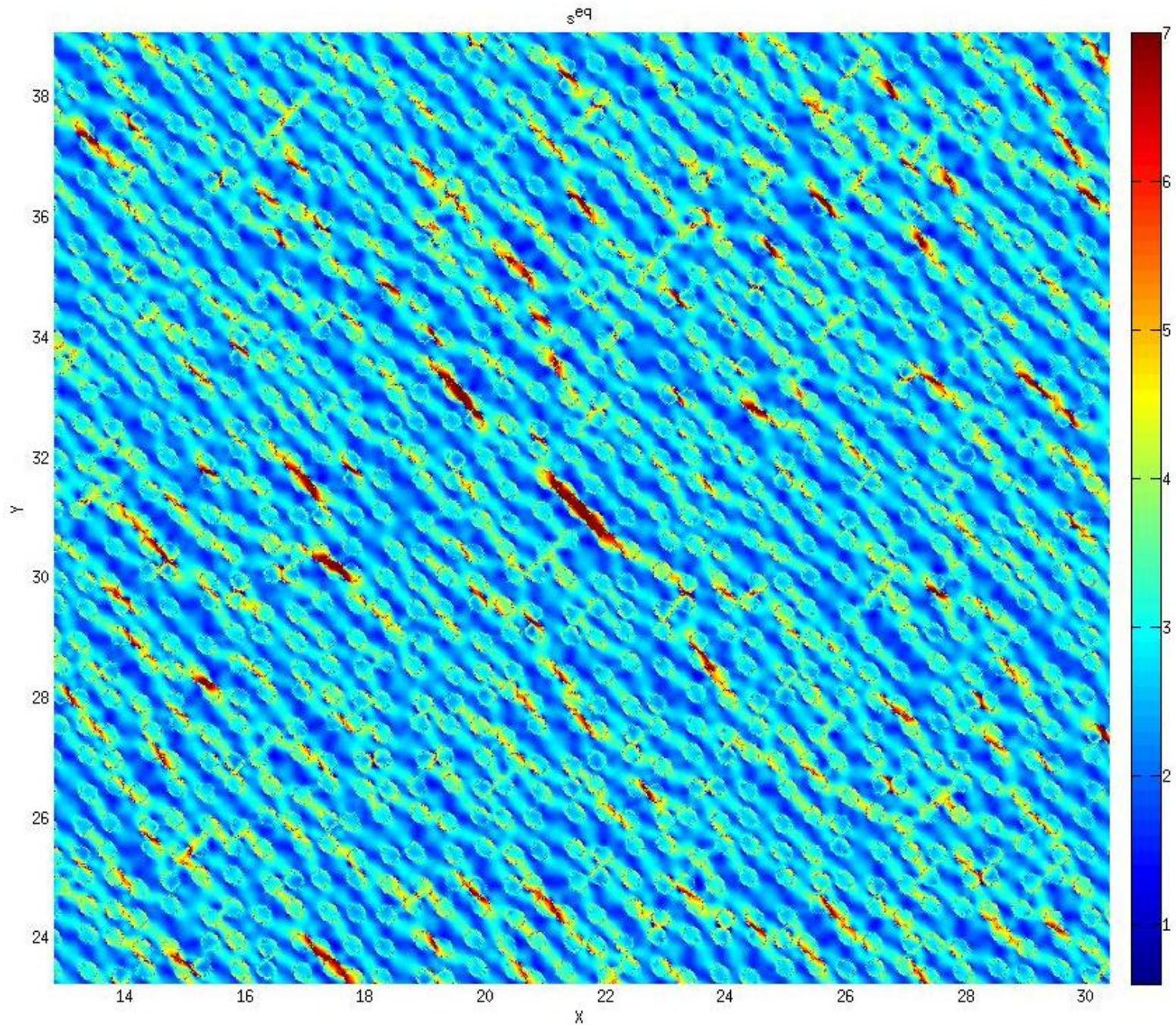
$5000^2$  grid, 15625 inclusions ( $50.10^6$  ddl)

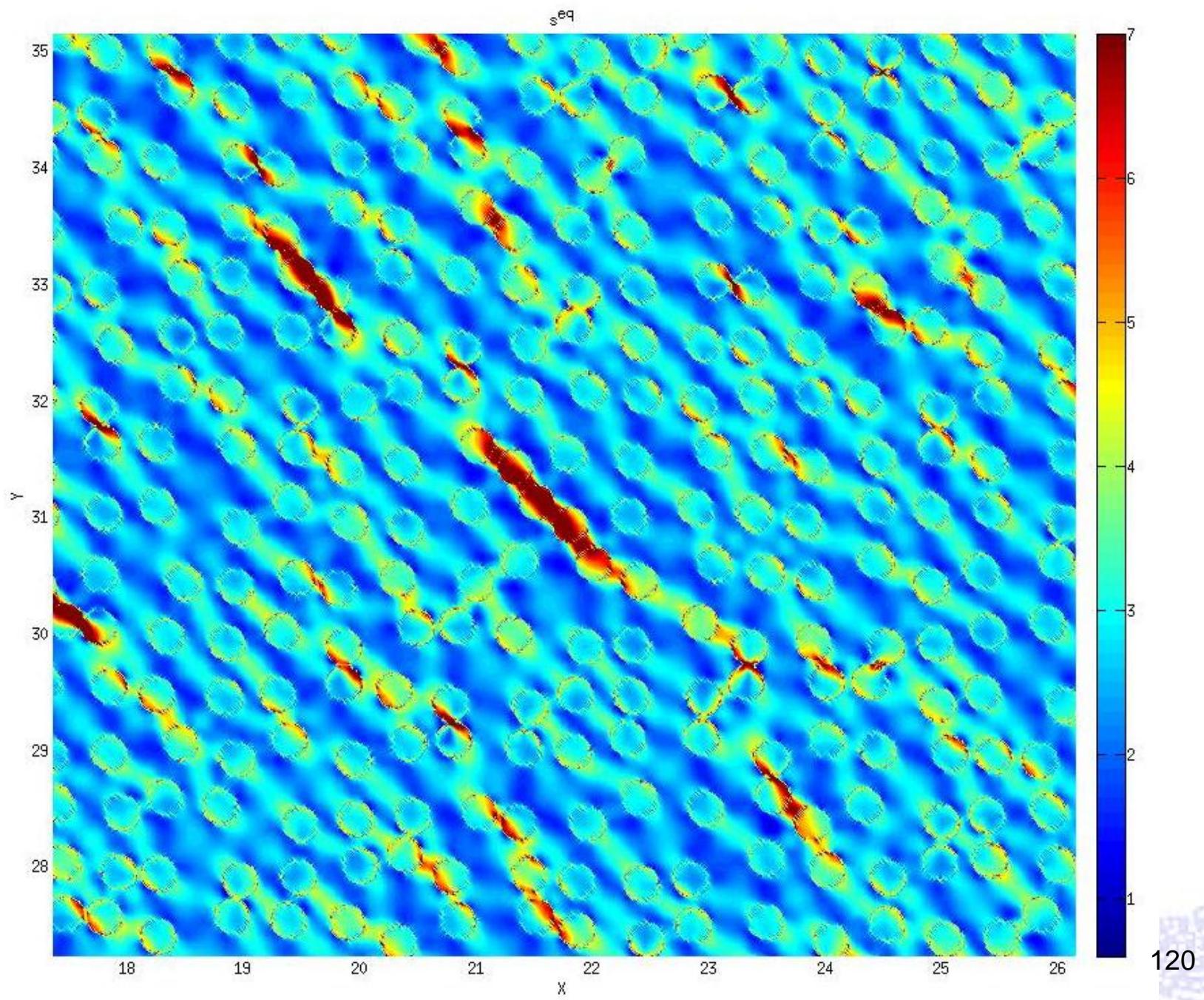
Contrast 10, 6 iter to convergence

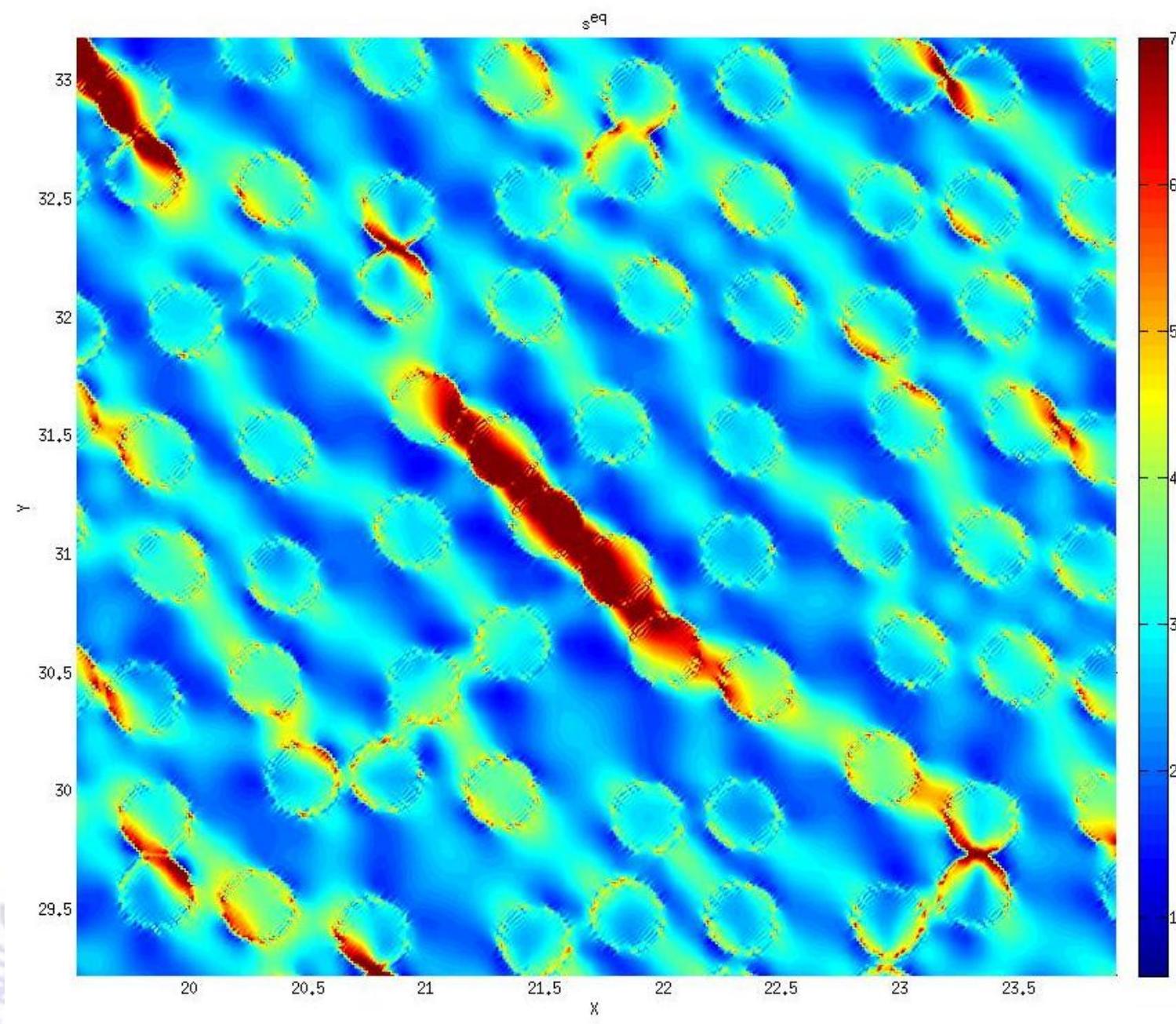
Matlab code Total CPU (72 procs) = 1115 s (18 min)

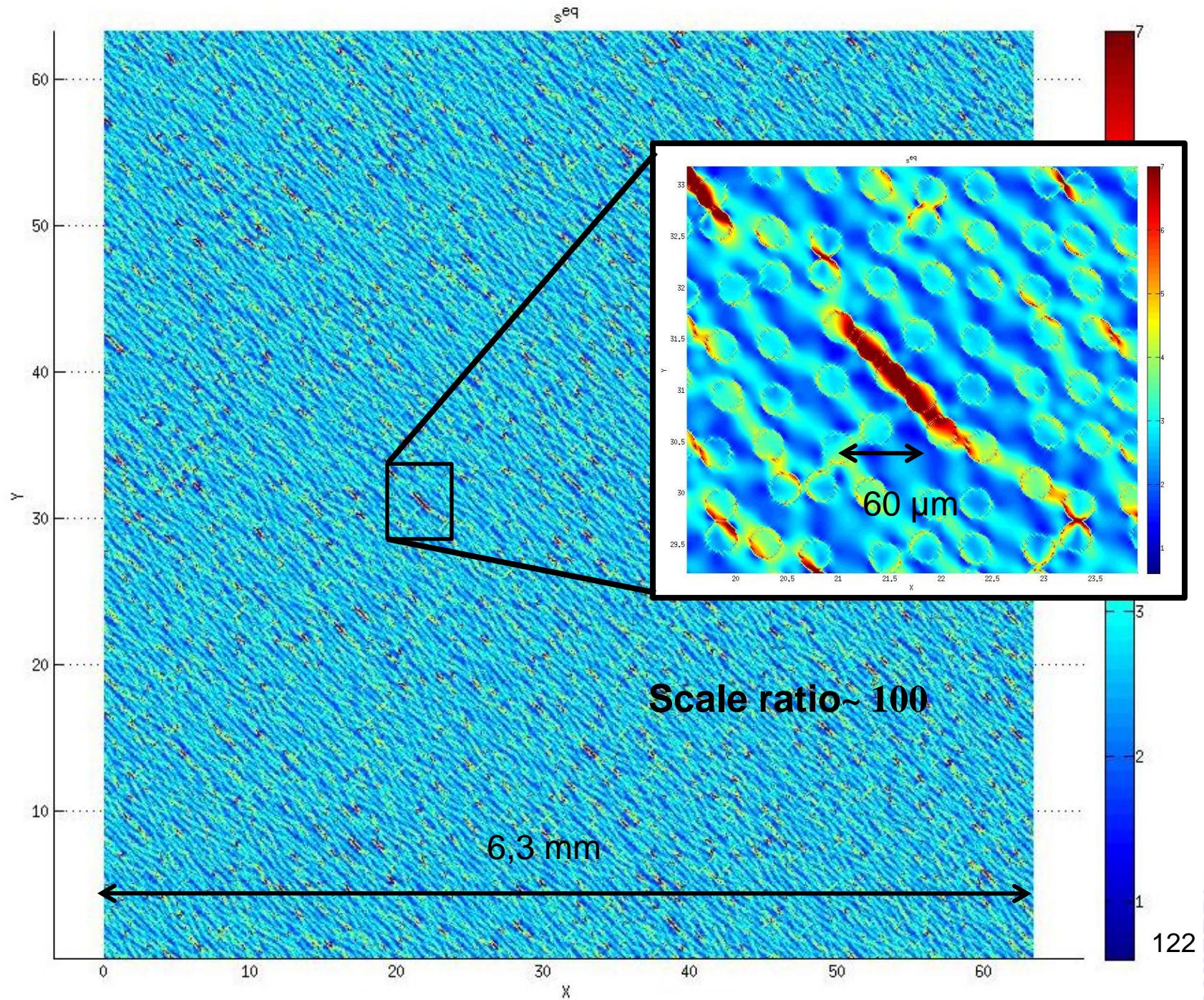


$s^{eq}$ 

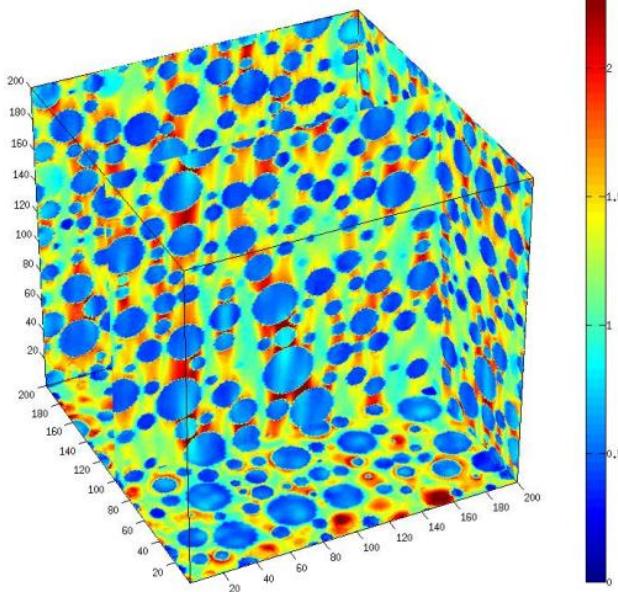
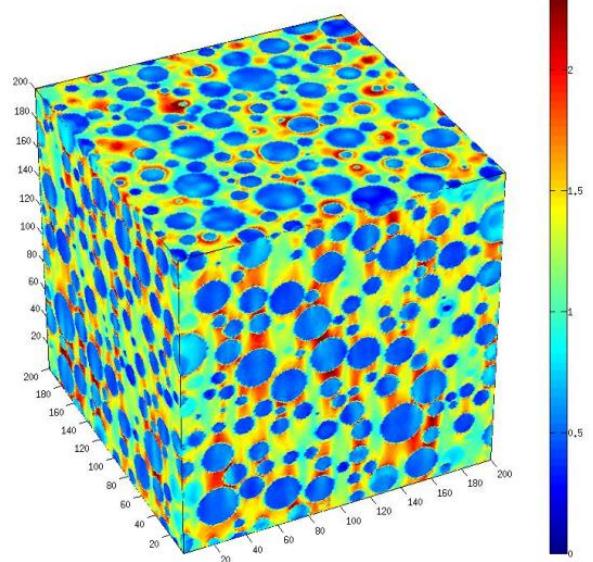
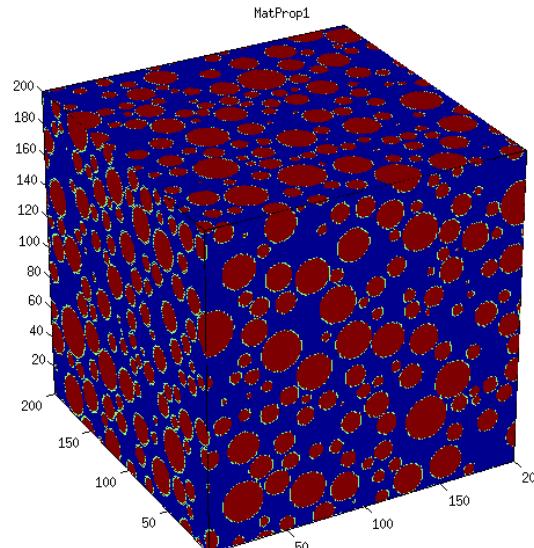
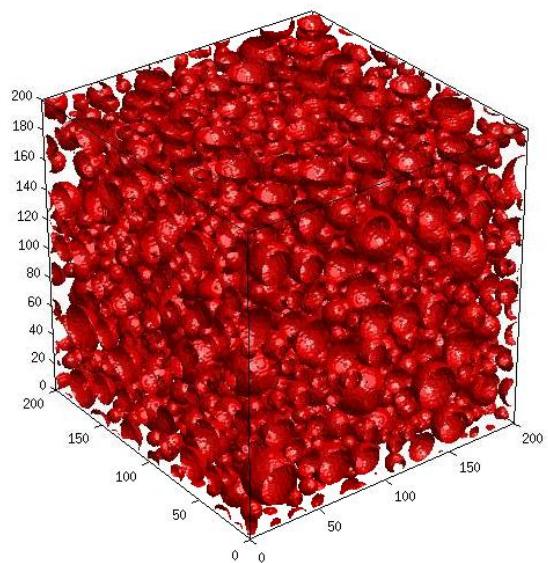






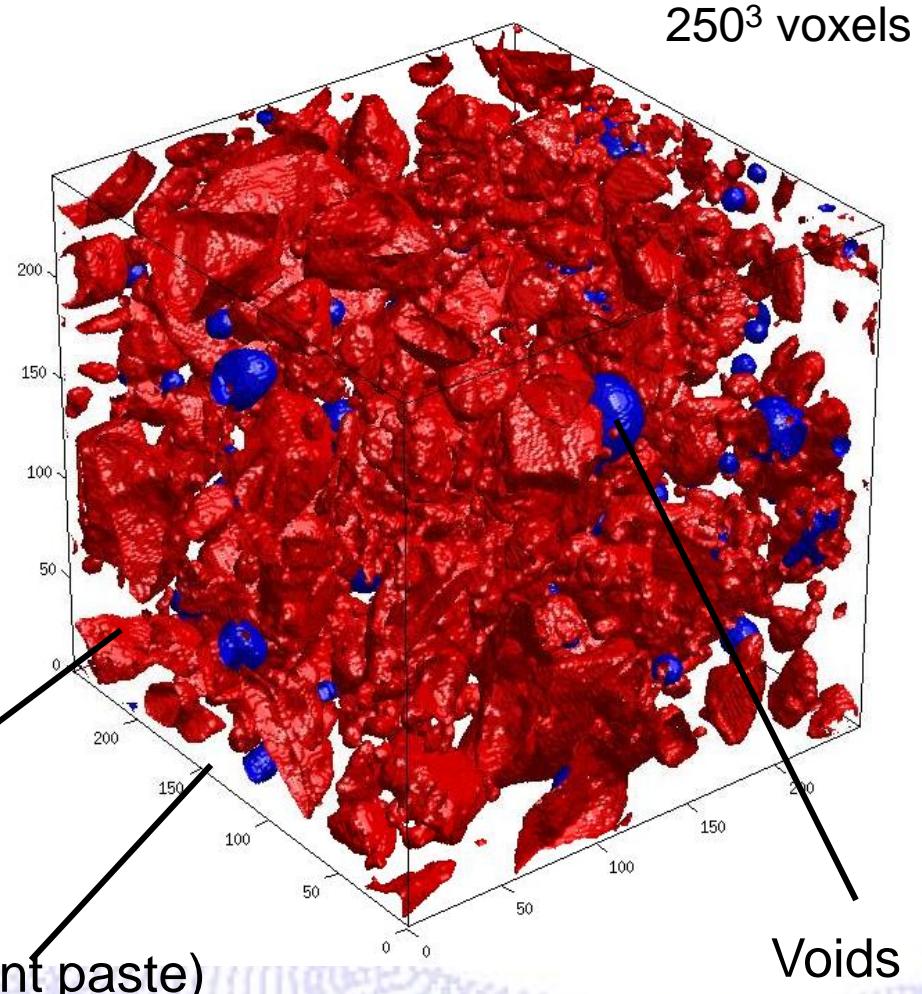
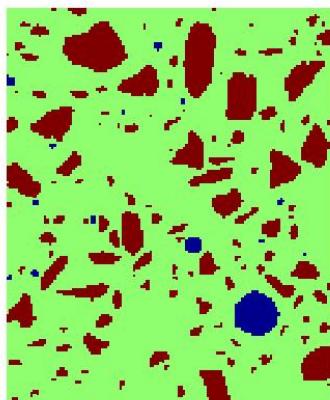
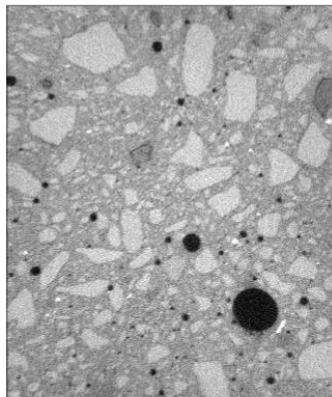


# 3D computations: elasticity, 2024 inclusions model: local strain field for prescribed macroscopic load



# 3D computations: voxel model from microtomography images

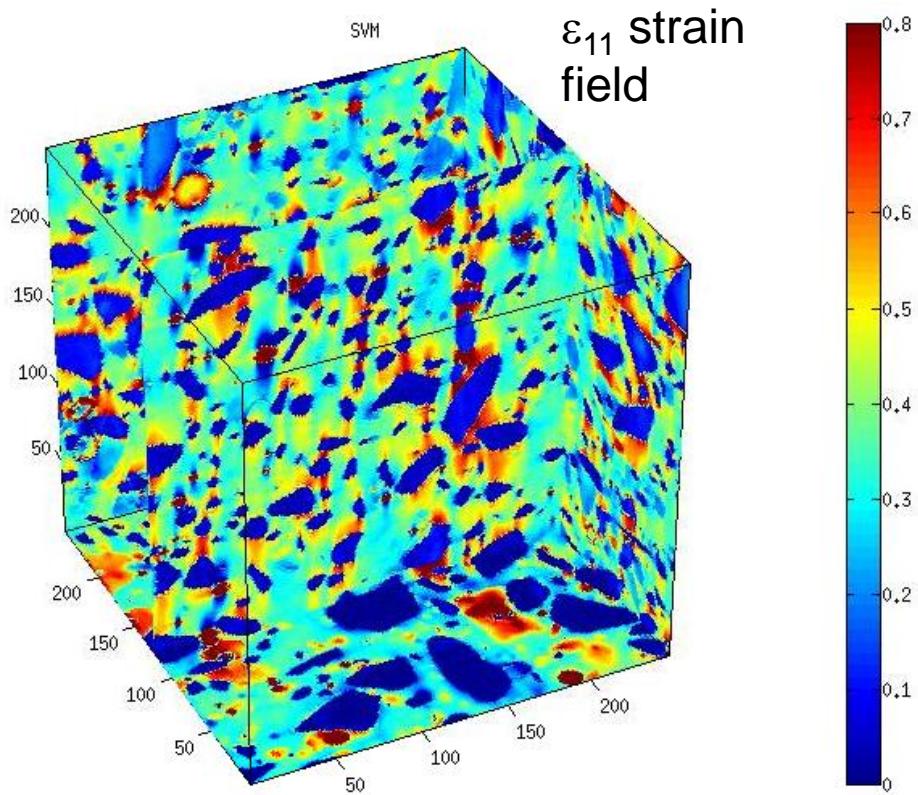
Material: mortar



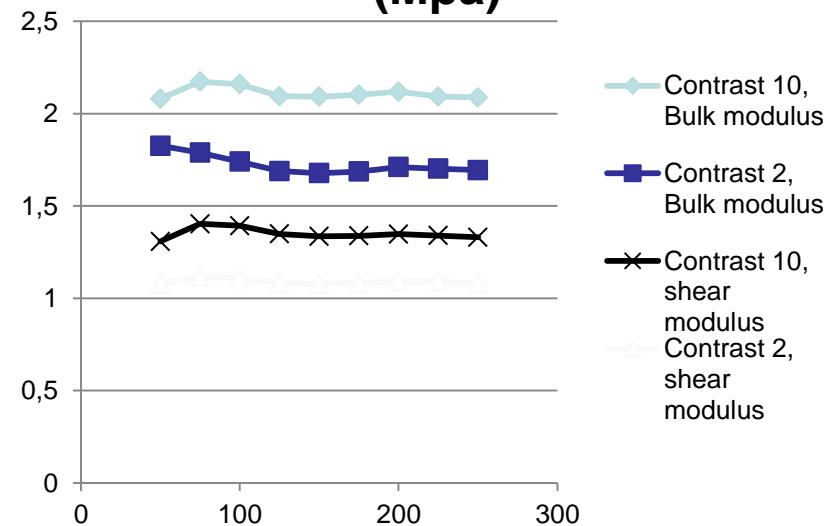
# 3D computations: voxel model from microtomography images

$$\bar{\varepsilon} = \begin{bmatrix} 1/3 & 0 & 0 \\ 0 & 1/3 & 0 \\ 0 & 0 & 1/3 \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned} E_i &= 10, \nu_i = 0.25 \\ E_m &= 1, \nu_m = 0.25 \\ E_v &= 0, \nu_v = 0 \end{aligned}$$



**Effective elastic coefficients (Mpa)**



Nb. of voxel in each spatial direction

# Conclusions: SLS method

- No mesh required: direct use of properties assigned to each voxel
- Matrix-free approach: low memory requirements, no system of equations to solve
- Linear complexity with respect to the number of degrees of freedom/voxels
- No Fourier transform – inverse Fourier transform required
- Dependence to contrast of phase properties: can be avoided by means of available algorithms for FFT methods
- Ongoing works : nonlinear problems