



eDURMAT 18-22 novembre 2013, Nantes

Modélisation(s) micromécanique

Cours école thématique CNRS

Frédéric GRONDIN

Institut de Recherche en Génie Civil et Mécanique

(GeM) UMR-CNRS 6183

Ecole Centrale de Nantes



eDURMAT 18-22 novembre 2013, Nantes

Définition

Un modèle est la représentation d'un système qui permet de caractériser les propriétés d'un système et dans certains cas de prédire son comportement.

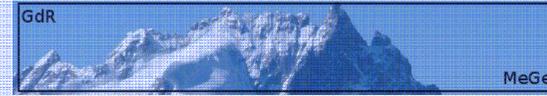
Le modèle peut être de nature graphique, mathématique, physique ou une version simplifiée d'un concept, d'un phénomène, d'un couplage, d'un système ou un aspect du monde réel.



eDURMAT 18-22 novembre 2013, Nantes

Plan du cours

1. Prendre en compte une microstructure aléatoire
2. Modélisation hiérarchique des déformations d'un matériau de l'échelle atomique à l'échelle macroscopique :
 - a. méthode des modules effectifs
 - b. dynamique moléculaire
3. Résistance d'un matériau à renforts :
 - a. cas des matériaux à inclusions particulières
 - b. cas des matériaux fibrés
4. Modélisation multi-échelles de l'endommagement :
 - a. endommagement du béton
 - b. quel type d'endommagement à quelle échelle ?
5. Dépendance au temps : Fluage



eDURMAT 18-22 novembre 2013, Nantes

2. Prendre en compte une microstructure aléatoire



eDURMAT 18-22 novembre 2013, Nantes

Introduction

- Microfissures interfaciales
- Position aléatoire des hétérogénéités ... distribution non-uniforme des contraintes et des déformations
- Introduction stochastique impossible dans les codes car trop lourd
- Intérêt des méthodes multi-échelles : séparation des échelles locales et globales
- Aide aux analyses expérimentales mêmes sophistiquées (Tomographie, X-ray, MEB, EA, Infrarouges, etc.)

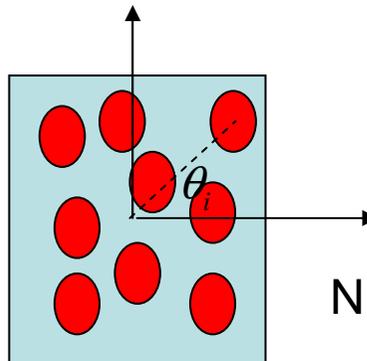
Paramètres de la microstructure

Paramètre de distribution de l'homogénéité $\xi = \frac{d_p}{\sqrt{A/N}}$

Décrit la promiscuité de N particules sur une surface A.
 d_p : max de ξ sur le diagramme de la densité de probabilité

$\xi \searrow$ Lorsque la clustérisation augmente

Paramètre d'anisotropie de 1^{er} ordre $\eta = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \cos 2\theta_i$



Ni périodique, ni totalement aléatoire

Paramètres de la microstructure

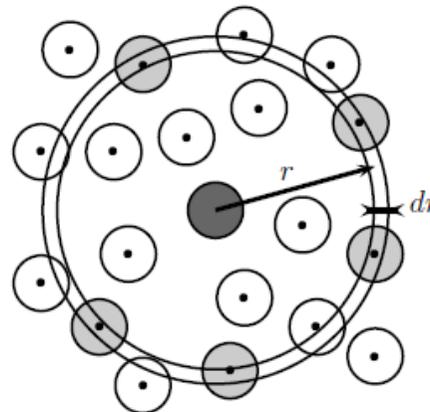
➤ Fonction d'intensité du second ordre

$$K(r) = \frac{A}{N^2} \sum_{k=1}^N \frac{I_k(r)}{w_k}$$

C'est le nombre attendu de centres d'hétérogénéités à une distance r d'un point choisi quelconque pondéré par leur intensité (i.e. le nombre de points N par surface A)

$I_k(r)$ est le nombre de points situés à une distance r d'un point k

w_k prend en compte les effets de bord : rapport entre la circonférence du cercle situé dans la surface par rapport à la surface A . Si le cercle entier est dans A $w_k = 1$ sinon il est < 1 .

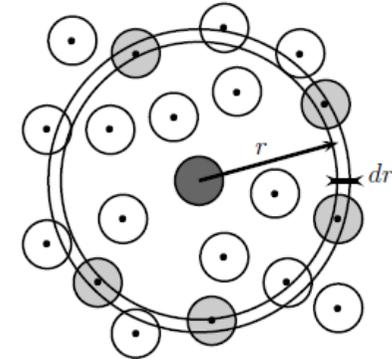


Paramètres de la microstructure

➤ Fonction d'intensité du second ordre

Le nombre moyen d'hétérogénéités situées dans un cercle de rayon r et d'épaisseur dr vaut :

$$dK(r) = K(r + dr) - K(r)$$



Rapporté à la surface du cercle $2\pi r dr$ on obtient la densité spatiale des hétérogénéités et rapporté ensuite à la densité spatiale moyenne N/A on obtient la fonction de distribution radiale :

$$g(r) = \frac{A}{2\pi r N} \frac{dK(r)}{dr}$$

$g(r)$ représente la densité volumique moyenne d'inclusions à la distance r d'une inclusion du milieu

$$\rho(r) = g(r)\rho$$

Paramètres de la microstructure

➤ Formalisme multifractal

Caractérise l'échelonnement spatial de distributions non-uniformes

Une probabilité locale (nbre d'hétérogénéités) P_i dans un $i^{\text{ème}}$ élément parmi un ensemble d'éléments compris dans un volume de dimension l vérifie la condition :

$$P_i(l) \propto l^{\alpha_i}$$

Où α_i représente la résistance singulière

Dans la théorie fractale le nbre d'éléments de probabilité caractérisée par la même résistance singulière est la taille du volume par la dimension fractale $f(\alpha)$

$$N(\alpha) \propto l^{-f(\alpha)}$$

Taille du VER

➤ Quelle est la taille maximale du VER ?

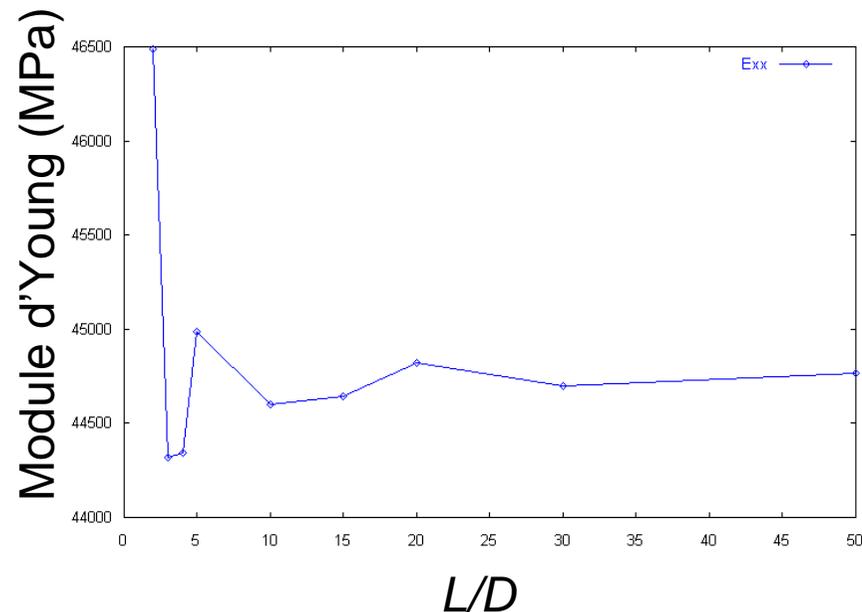
➤ Quelle est la taille minimale du VER ?

Elle n'est pas universelle

Elle dépend des propriétés à analyser et des phénomènes

Elle est définie par le type de propriétés des phases et de leur fraction volumique

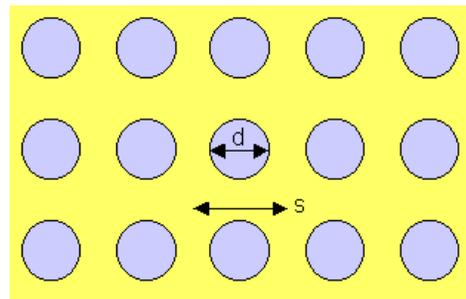
En effet, la variation spatiale de la fraction volumique des hétérogénéités entraîne des variations des valeurs locales de la résistance.



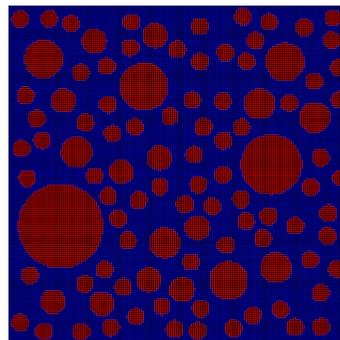
Périodique ou aléatoire ?

La détermination de la taille du VER est liée aussi au type d'arrangement des hétérogénéités.

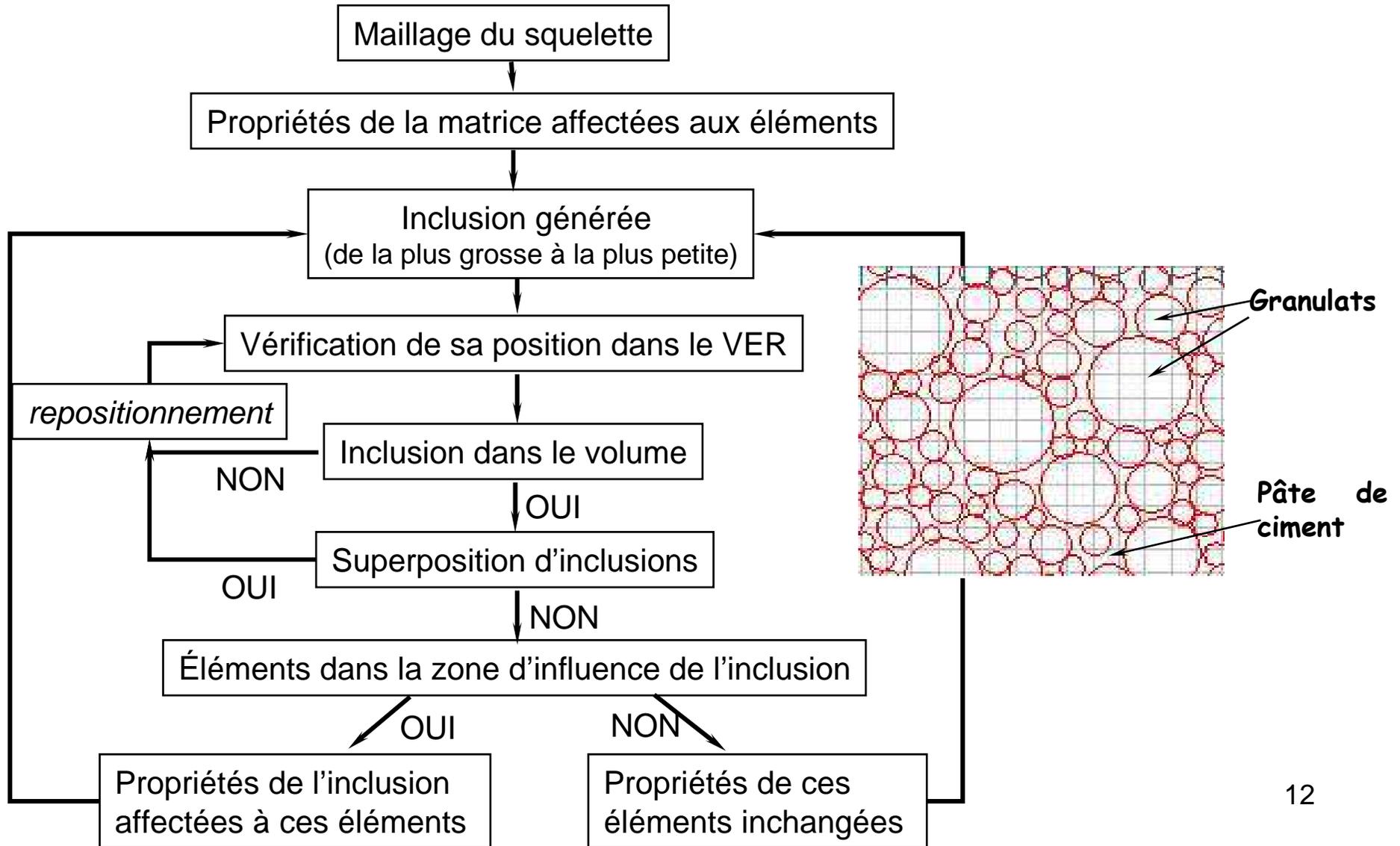
Microstructure périodique : adaptée aux matériaux composites aux premières étapes de leur histoire micromécanique



Microstructure aléatoire : lorsque les écarts entre une représentation périodique et la microstructure réelle deviennent trop importants



Génération d'une microstructure aléatoire (méthode séquentielle)



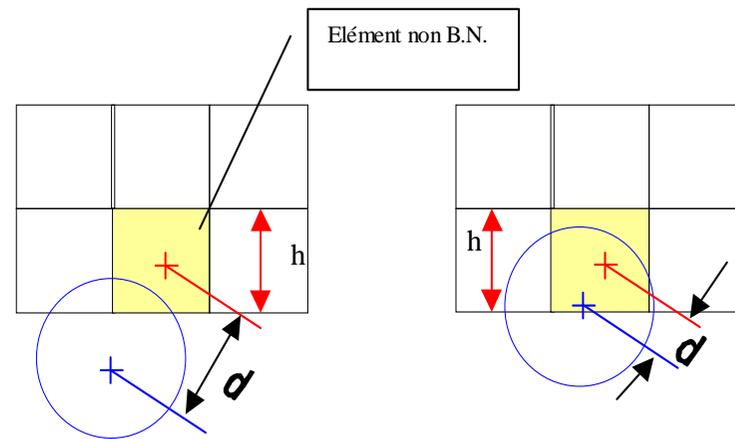
Génération d'une microstructure aléatoire (méthode séquentielle)

Volume unitaire d'une inclusion de type i :

$$\text{en 3D} \quad VU_i = \frac{4}{3}\pi \left(\frac{D_i}{2}\right)^3$$

$$\text{en 2D} \quad VU_i = \pi \left(\frac{D_i}{2}\right)^2$$

Nombre d'inclusions de type i dans le VER : $N_i = \frac{VTE}{VU_i}$



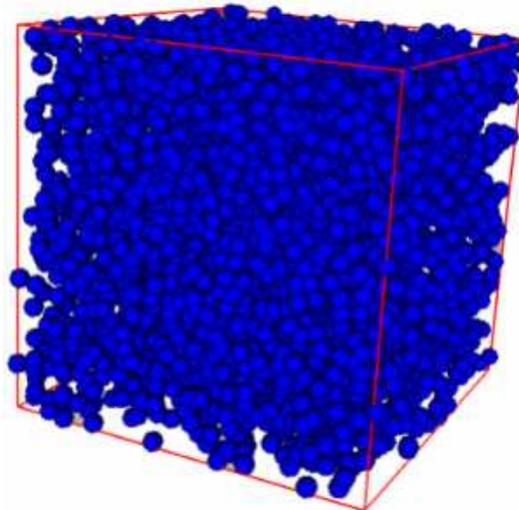
position acceptée $d > h/2$

position non valide $d < h/2$

Modèle de Lubachevsky et Stillinger

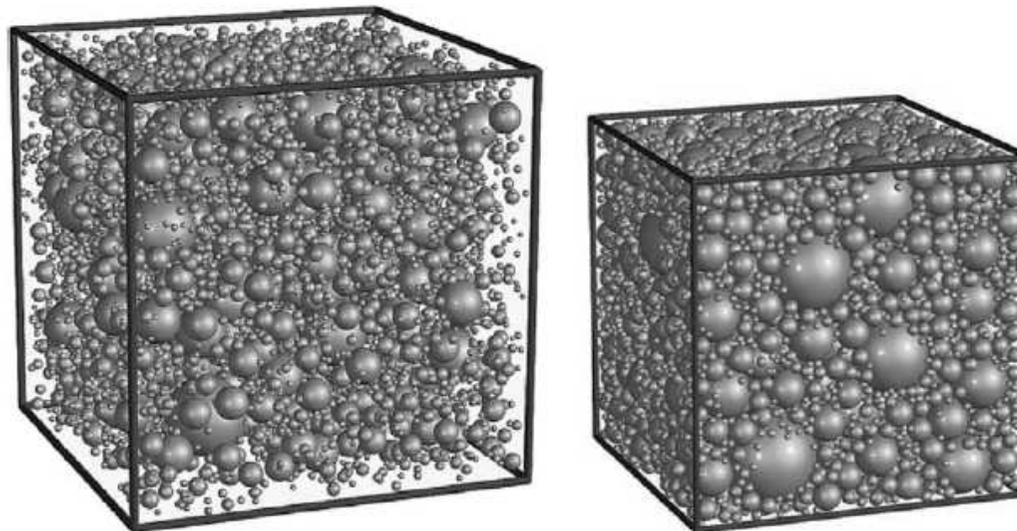
Méthode dite concurrente de croissance de particules sphériques au cours du temps.

- Etat initial : positions aléatoires de N centre de particules de diamètre nul dans un domaine fermé.
- Conditions de périodicité imposées sur les bords du domaine.
- On affecte à chaque point un vecteur vitesse initial dont les composantes sont également tirées aléatoirement. Les particules se déplacent selon leur vecteur vitesse initial et leur diamètre augmente dans le temps. Le grossissement des sphères permet d'augmenter la fraction volumique de particules au cours du temps et le processus est arrêté quand la fraction volumique de particules visée est atteinte.



Autres méthodes de génération d'une microstructure aléatoire

La méthode de perturbations aléatoires de la position des particules peut être appliquée à un arrangement initialement ordonné et compact.



Modèle SPACE par Stroeve et al. (Comput. Methods Appl. Mech. Engrg., vol. 193, 2004)

Difficile à réaliser pour des fractions volumiques importantes car l'espace entre les particules permettant leur mouvement est réduit.

De plus, cette méthode ne permet pas de perturber significativement la structure périodique de manière à créer une structure totalement aléatoire.

Autres méthodes de génération d'une microstructure aléatoire

- Visscher et Bolsterli (1972) : méthode séquentielle consistant à lâcher et laisser rouler les particules dans un cube sous l'action d'une force gravitationnelle. Cette méthode introduit une direction préférentielle et impose aux particules d'être en contact les unes avec les autres.
- Hinrichsen *et al.* (1990) : méthode dite concurrente basée sur un ensemble de particules générées par le modèle séquentiel, puis déplacées dans les directions de la voisine la plus éloignée. Le diamètre des particules est alors augmenté jusqu'à ce que deux particules entrent en contact. Le processus est répété.
- Jordey et Tory (1985) : méthode dite concurrente basée sur un grossissement progressif des particules, associé à un réarrangement des particules les plus proches dans la direction opposée de leurs centres (réarrangements non aléatoires).

Du micro au macro

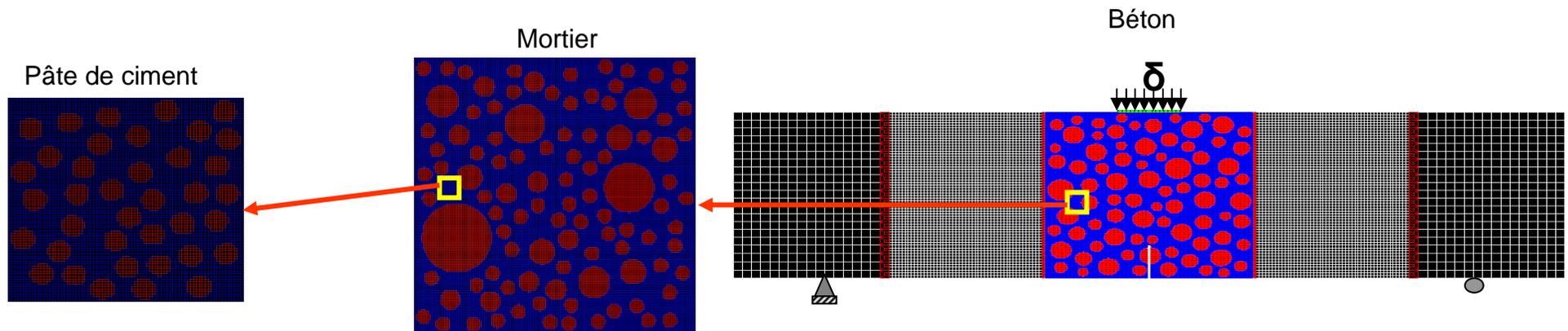
Un bon choix des équations et de la microstructure à modéliser ne permet pas d'obtenir directement des résultats applicables à une structure (macro) :

- dépend du type de conditions aux limites : déformation ou contrainte homogène, périodique, etc.
- le passage des conditions environnementales ou de chargement, appliquées à la surface de la structure macroscopique, au VER peut s'implémenter de différentes façons,
- les gradients de contrainte et/ou de déformation dû à un chargement non-uniforme ou à une concentration de contrainte ou encore à des effets de bords affectent les résultats.

Du micro au macro

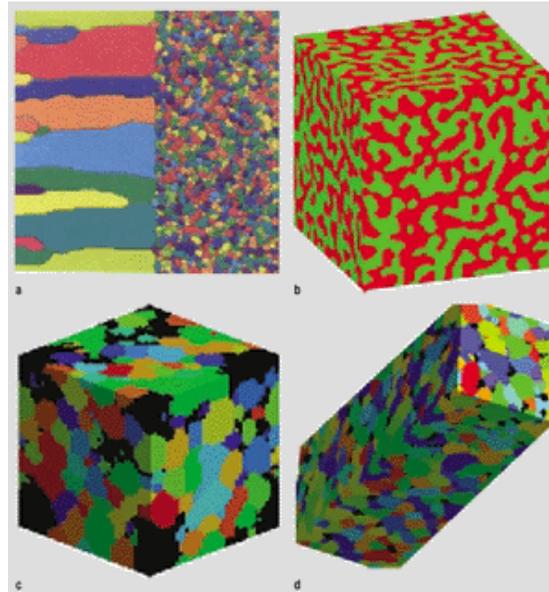
Différentes solutions existent :

- un VER biphasique avec un choix optimal des dimensions (ex: béton numérique) – approche mésoscopique

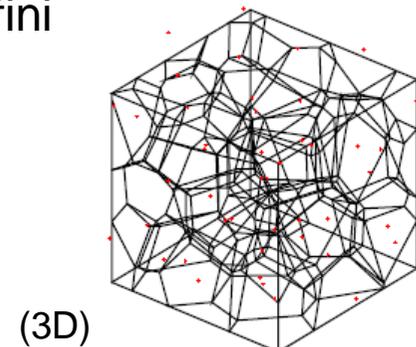
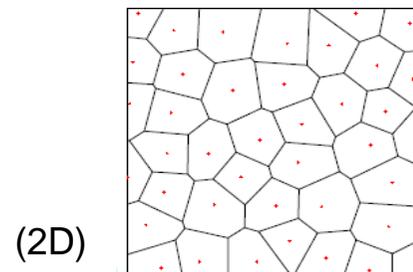


Du micro au macro

- lattice model (physique statistique) avec plusieurs VER représentant la variabilité spatiale des propriétés

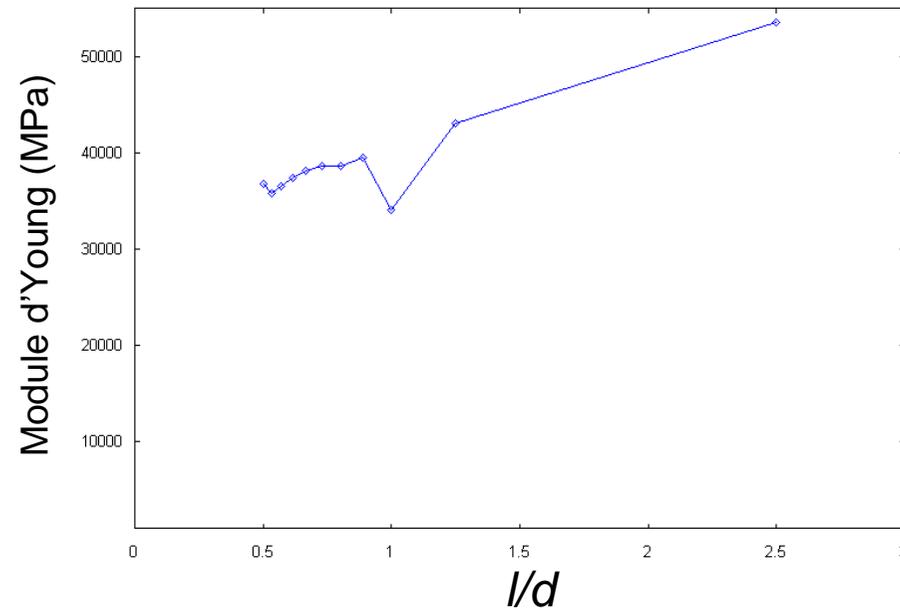


- les cellules de Voronoi où chaque polygone de Voronoi contenant une hétérogénéité est traité comme un élément fini



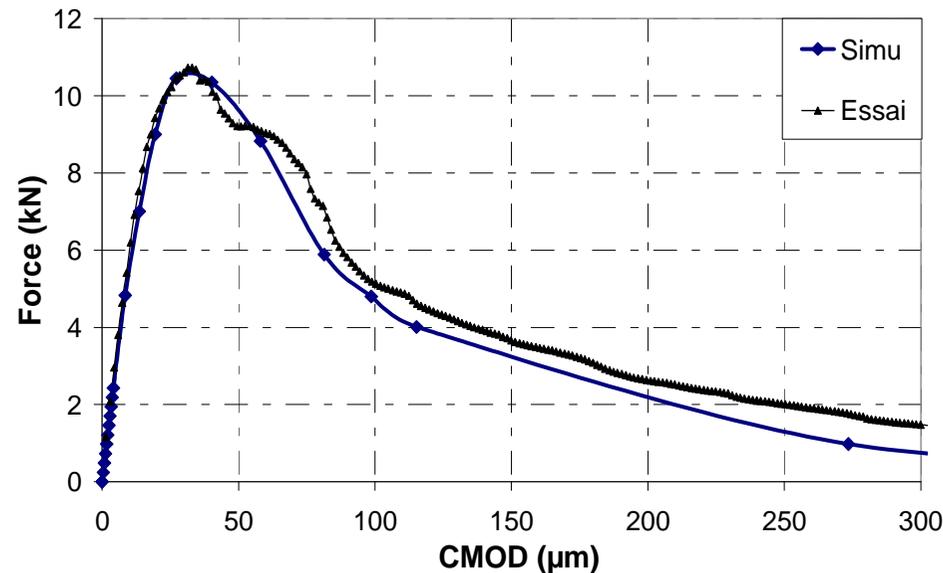
Du micro au macro

Attention à bien définir la limite de résolution du problème en fonction de la taille des éléments / taille des hétérogénéités !



Du micro au macro

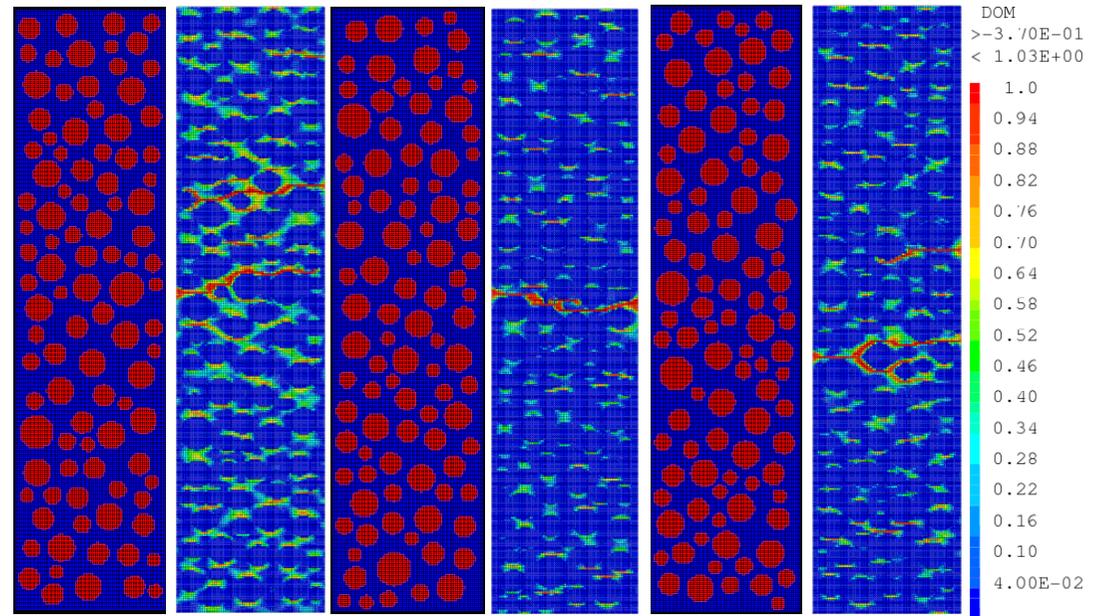
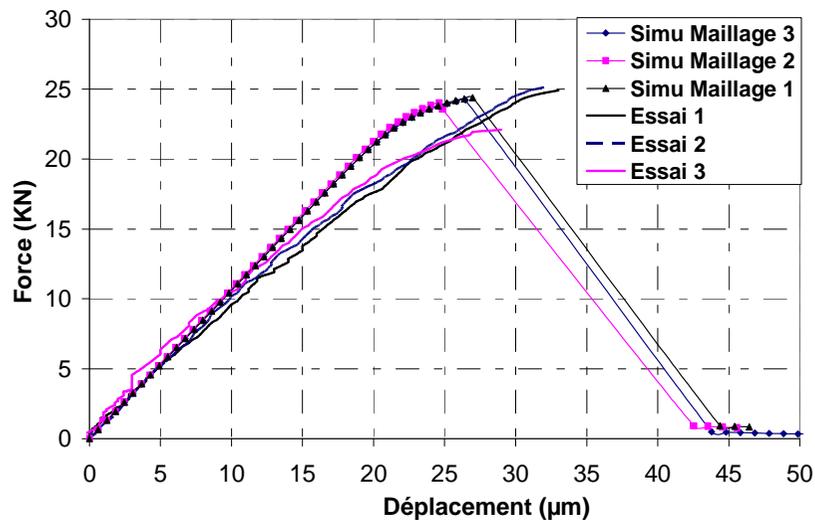
- l'augmentation de la taille du VER tend à lisser les fluctuations locales des propriétés associées à la microstructure et tend à diminuer les propriétés effectives globales à l'échelle macro
- les mécanismes responsables de la localisation des déformations et de la fissuration contribuent à la variabilité aléatoire du comportement de la microstructure
- Pas d'instabilités en pré-pic : bonne concordance
- Instabilités en post-pic : effets locaux pas parfaitement identifiés et écarts relatifs avec l'exp.



Du micro au macro

Evolution de la micro-fissuration (test de traction sur un béton)

3 distributions aléatoires des granulats



➡ Même comportement dans la partie pré-pic avec des résistances maximales légèrement différentes (écart-type= 0,18 kN).

➡ Localisation des fissures différente avec chaque distribution des granulats.



eDURMAT 18-22 novembre 2013, Nantes

1. Prendre en compte une microstructure aléatoire

QUESTIONS

Intérêt ?

A quoi faut-il faire attention ?



eDURMAT 18-22 novembre 2013, Nantes

3. Modélisation hiérarchique des déformations d'un matériau de l'échelle atomique à l'échelle macroscopique

Méthode des modules effectifs

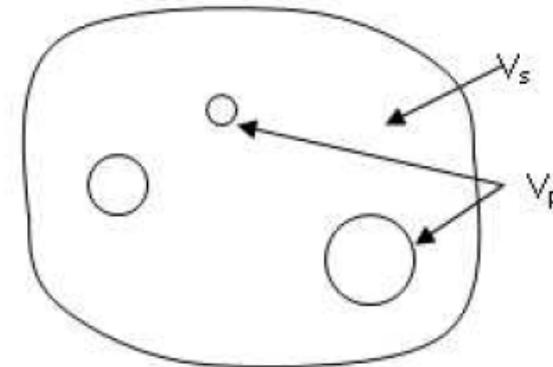
➤ Problème cellulaire

$$\begin{aligned} \operatorname{div}_{\mathbf{y}}(\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{y})) &= 0 & \mathbf{y} \in V \\ \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{y}) &= \mathbf{C}(\mathbf{y}) : (\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{y}) - \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{y})\Delta T) & \mathbf{y} \in V_m \cup V_r \\ \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{y}) &= \frac{1}{2}(\nabla(\mathbf{u}) + \nabla(\mathbf{u})^t) & \mathbf{y} \in V_m \cup V_r \\ \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{y}) &= -p^l \boldsymbol{\delta} & \mathbf{y} \in V_p \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} &= -p^l \mathbf{n} & \mathbf{y} \in \Gamma_{sl} \\ \|\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}\| &= 0 & \mathbf{y} \in \Gamma_{mr} \\ \|\mathbf{u}(\mathbf{y})\| &= 0 & \mathbf{y} \in \Gamma_{mr} \end{aligned}$$

$$\langle\langle \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}) \rangle\rangle_V = \frac{1}{|V|} \int_{\partial V} (\mathbf{u}(\mathbf{y}) \otimes \mathbf{n})_s dy = \mathbf{E}$$

➤ Découplage du problème à résoudre

1. $\mathbf{E} \neq 0, \Delta T = 0, p^l = 0$
2. $\mathbf{E} = 0, \Delta T \neq 0, p^l = 0$
3. $\mathbf{E} = 0, \Delta T = 0, p^l \neq 0$



Méthode des modules effectifs

➤ Calcul du tenseur d'élasticité équivalent

$$\Sigma^e = \langle \sigma^e \rangle_V = \frac{1}{|V|} \int_V \sigma^e(\mathbf{y}) d\mathbf{y} = \mathbf{C}^{hom} : \mathbf{E}$$

➤ Calcul du tenseur de dilatation thermique équivalent

$$\Sigma^T = \frac{1}{|V|} \int_V \sigma^T(\mathbf{y}) d\mathbf{y} = - \mathbf{C}^{hom} : \alpha^{hom} \Delta T$$

➤ Calcul du tenseur de Biot équivalent (Château et Dormieux, 1998)

$$\mathbf{B} = (\mathbf{I} - \mathbf{C}^{hom} : \mathbf{S}^s) : \delta$$

Méthode des modules effectifs

➤ Exple : propriétés effectives de pâtes de ciment au très jeune âge

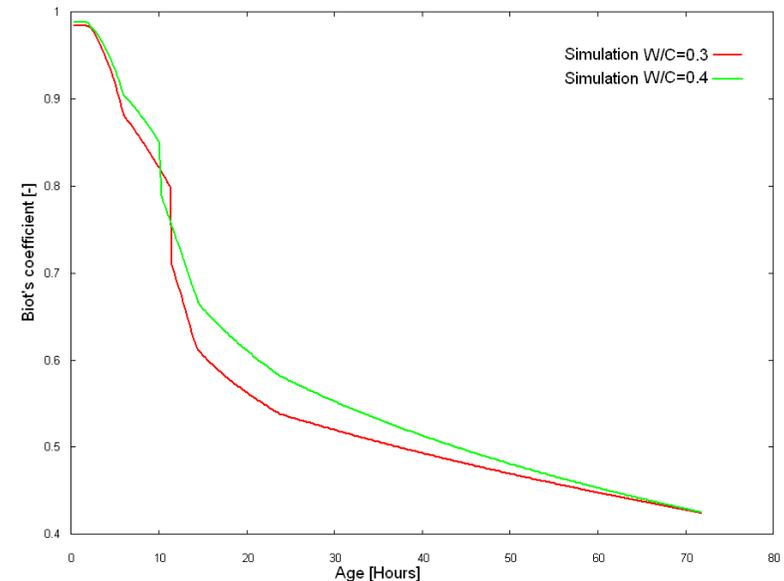
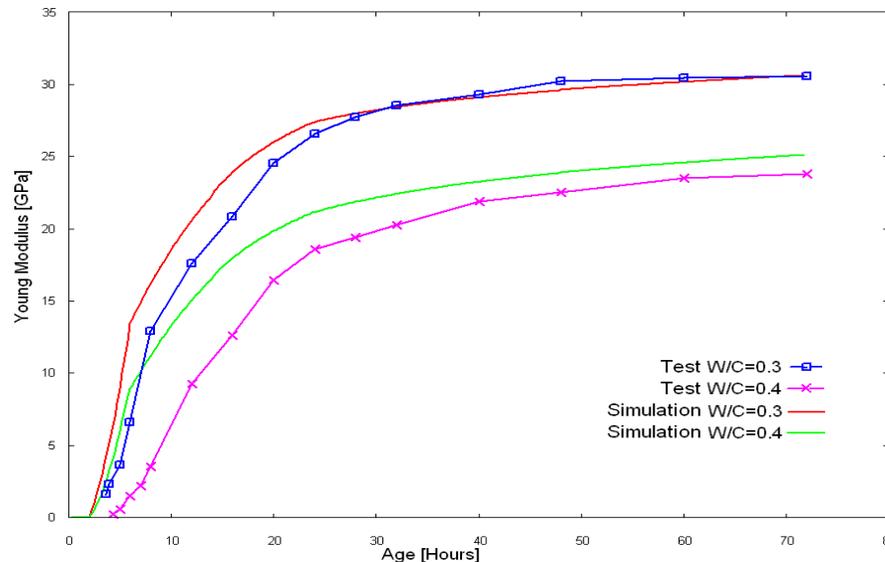
Calcul du module d'Young effectif Application du schéma auto-cohérent

$$\sum_{i=1}^2 f_i \frac{k_i - k^{\text{hom}}}{1 + \alpha(k_i - k^{\text{hom}}) / k^{\text{hom}}} = 0 \quad \text{où} \quad \beta = \frac{6(k^{\text{hom}} + 2\mu^{\text{hom}})}{5(3k^{\text{hom}} + 4\mu^{\text{hom}})}$$

$$\sum_{i=1}^2 f_i \frac{\mu_i - \mu^{\text{hom}}}{1 + \beta(\mu_i - \mu^{\text{hom}}) / \mu^{\text{hom}}} = 0 \quad \text{où} \quad \alpha = \frac{3k^{\text{hom}}}{3k^{\text{hom}} + 4\mu^{\text{hom}}}$$



Calcul du coefficient de Biot effectif

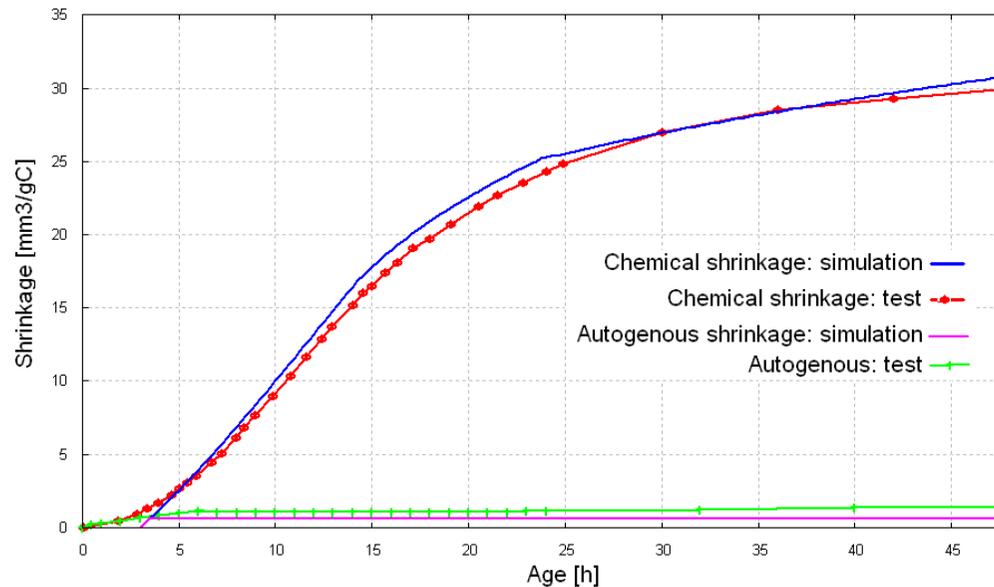


Méthode des modules effectifs

➤ Exple : propriétés effectives de pâtes de ciment au très jeune âge

Déformation macroscopique de la pâte de ciment soumise à une dépression interne

$$dE^{cp} = \frac{1}{k^{hom}} \left[\frac{p_c (k^{hom} - k_s^{hom})}{k_w - k_s^{hom}} \right]$$





eDURMAT 18-22 novembre 2013, Nantes

Dynamique moléculaire (DM)

➤ Introduction

D'un point de vue conceptuel, une bonne part de la dynamique moléculaire issue de la nanomécanique peut être facilement compréhensible avec les méthodes classiques de la mécanique et les théories d'homogénéisation.

En d'autres termes, il est possible de caractériser les contraintes de systèmes discrets sans toujours s'attacher à des principes de mécanique statistique ou des théories cinétiques de la matière.

Dynamique moléculaire

➤ Equations du mouvement

Mécanique newtonienne : les propriétés d'un ensemble d'atomes ou particules sont déterminées en étudiant la trajectoire de chaque particule au cours du temps

Les atomes sont considérés comme une masse ponctuelle et pour tous les atomes i d'un système on écrit le mouvement : $\vec{f}_i = m_i \vec{a}_i$

Les forces d'interactions sont obtenues par la mécanique quantique (DM ab initio) ou elles dérivent d'un potentiel empirique (DM classique).

L'objectif n'est pas de prédire de façon exacte la trajectoire d'un atome particulier (la nature chaotique du mouvement à N-corps rend impossible cette prédiction), mais bien de prédire un comportement d'ensemble, avec comme critère principal de convergence, la conservation de l'énergie.

Dynamique moléculaire

- Intégration numérique des équations de mouvement : pas de temps δt fini ($\sim 10^{-4}$)
- Approximation des équations différentielles par des équations aux différences finies.

À l'instant $t+\delta t$: nouvelles positions, vitesses et forces de toutes les particules.

→ Mouvement et réarrangement des atomes/défauts...

- Echelles de taille et de temps de l'ordre de qq dizaines de nm, et qq picosecondes.
- Données d'entrée d'un calcul de DM sont donc : un ensemble d'atomes, des potentiels interatomiques et, éventuellement, une série de « contraintes » imposées par le milieu extérieur (température, pression...).

Dynamique moléculaire

➤ Algorithme de Verlet

Position à $t+\delta t$ $\vec{r}_i(t + \delta t) = 2\vec{r}_i(t) - \vec{r}_i(t - \delta t) + \delta t^2 \cdot \vec{a}_i(t)$

Vitesse à t $\vec{v}_i(t) = \frac{\vec{r}_i(t + \delta t) - \vec{r}_i(t - \delta t)}{2\delta t}$

➤ Algorithme leapfrog (vitesses au milieu du pas d'intégration)

Vitesse au milieu du pas d'intégration $\vec{v}_i\left(t + \frac{\delta t}{2}\right) = \vec{v}_i\left(t - \frac{\delta t}{2}\right) + \delta t \cdot \vec{a}_i(t)$

Position $\vec{x}_i(t + dt) = \vec{x}_i(t) + \delta t \cdot \vec{v}_i\left(t + \frac{\delta t}{2}\right)$

Déplacement à $t+\delta t$ $\vec{r}_i(t + \delta t) = \vec{r}_i(t) + \delta t \cdot \vec{v}_i(t) + \frac{1}{2} \delta t^2 \cdot \vec{a}_i(t)$

Vitesse à $t+\delta t$ $\vec{v}_i(t + \delta t) = \vec{v}_i(t) + \frac{1}{2} \delta t \cdot [\vec{a}_i(t) + \vec{a}_i(t + \delta t)]$

Dynamique moléculaire

➤ Algorithme prédicteur-correcteur

Les autres familles algorithmes très utilisés sont les algorithmes prédicteurs-correcteurs. Dans un premier temps, on prédit les valeurs des positions, vitesses, accélérations, etc. par développement de Taylor. À partir de ces nouvelles positions, on calcule les forces. De ces forces on déduit l'accélération que l'on compare alors à l'accélération obtenue par le développement de Taylor et l'on applique un facteur correctif.

Dynamique moléculaire

➤ Ensembles thermodynamiques

Ensemble NVE

NVE : nombre d'atomes (N), volume étudié (V), énergie du système (E) fixes.

Pour les autres ensembles (canonique NVT, isotherme-isobar NPT), on doit modifier les équations de Newton.

Ensemble NVT

3 grandes méthodes sont utilisées : le scaling de vitesse, le thermostat d'Andersen et le thermostat de Nosé-Hoover.

Dynamique moléculaire

➤ Ensembles thermodynamiques

Scaling des vitesses : multiplication de toutes les vitesses par le facteur adéquat égal à $E_K^{\text{consigne}}/E_K$ avec E_K énergie cinétique du système et E_K^{consigne} celle que celui-ci devrait avoir

Thermostat d'Andersen : système couplé à un thermostat qui impose la température.

Forces stochastiques agissantes de temps en temps sur des particules sélectionnées au hasard. Entre les collisions stochastiques, le système évolue à énergie constante suivant les lois de Newton habituelles.

Thermostat de Nosé-Hoover : on introduit un terme de frottement ζ dans l'équation du mouvement :

$$m_i \vec{a}_i = \vec{f}_i - m_i \zeta \vec{v}_i$$

Son évolution temporelle est liée à la différence entre l'énergie cinétique mesurée et l'énergie cinétique désirée : $\dot{\zeta} = (E_K - E_K^{\text{consigne}}) / Q_T$

Où Q_T détermine la rapidité de la réponse du thermostat.

Dynamique moléculaire

➤ Ensembles thermodynamiques

Ensemble NPT

Pour l'ensemble isotherme-isobare NPT et selon la méthode de Nosé-Hoover, rajout d'un degré supplémentaire de liberté représentant le volume de la boîte, devenant une variable dynamique :

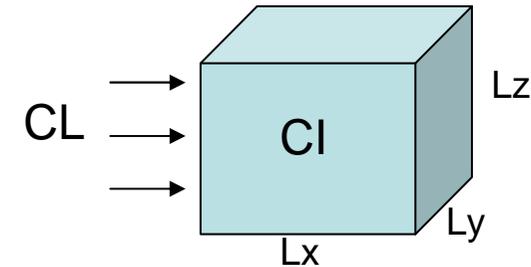
$$\dot{V} = (P - P^{consigne}) / Q_P$$

où Q_P détermine la rapidité de la réponse du barostat.

Si état de contrainte imposé, on introduit neuf autres degrés de liberté qui correspondent aux trois vecteurs définissant la boîte de simulation (méthode Parrinello-Rahman). Chaque degré de liberté est une variable dynamique qui évolue en fonction de l'état de contrainte désiré.

Dynamique moléculaire

➤ CI et CL



Conditions initiales

Positions et vitesses correspondantes à la température ambiante. Les propriétés ne dépendent pas des conditions initiales. On démarre avec un système dans un état proche de celui que l'on veut simuler : solide, liquide... Le mieux, lorsque cela est possible, est de partir de la dernière configuration (bien équilibrée) d'un état très proche.

Conditions aux limites

Le nombre d'atomes que l'ordinateur peut simuler est limité.

Pour simuler un cristal de taille pseudo-infinie, on applique souvent des conditions périodiques. Chaque fois qu'un atome quitte la boîte par une face, il est remis dans la boîte par la face opposée avec la même vitesse.

Conservation de la quantité de mouvement totale du système.

Quelques inconvénients : tout défaut sera répété à l'infini avec la périodicité de la boîte, ce qui peut introduire des erreurs en particulier si les champs de déformation induits par les défauts se superposent.

Dynamique moléculaire

➤ **Calcul des forces** \longleftrightarrow forces d'interactions entre les atomes

Dépendent du potentiel interatomique qui dépend des coordonnées des particules.

On utilise en général une table de voisins (on sauvegarde pour chaque atome la liste de ses voisins) qui est définie de sorte que le calcul des forces ne s'effectue que sur les voisins situés dans un certain rayon de coupure r_c .

Méthode des « cellules liées » (*link cell*) : découpage de la boîte de simulation en cellules parallélépipédiques (de taille supérieure à r_c). Chaque atome appartient à une cellule et interagit uniquement avec les atomes qui appartiennent à l'une des 26 cellules voisines.

Le nombre d'atomes interagissant avec un atome donné est indépendant de la taille du système et dépend uniquement de la densité atomique du matériau simulé et du rayon de coupure du potentiel.

Dynamique moléculaire

➤ Potentiel interatomique

Fonction $V(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3)$ des positions des atomes (énergie potentielle du système).
Elle est invariante par translation et par rotation.

Exploitation de la mécanique quantique : calculs de structure électronique (*ab initio*)

Pbs : très coûteuses en temps et leur introduction dans un code de simulation à l'échelle atomique n'est possible que pour des systèmes de petites tailles (quelques dizaines d'atomes).

Pour des systèmes contenant plus de particules, on utilise des solutions approchées de ces potentiels (potentiels empiriques ou semi-empiriques)

Construction :

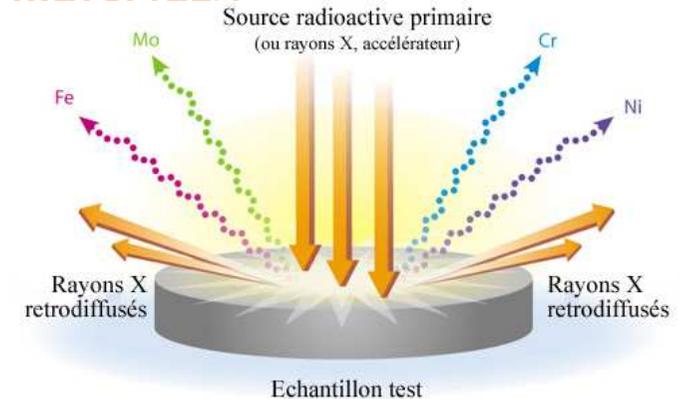
Le potentiel est construit à partir des positions relatives et non absolues des atomes
(force = Grad Potentiel)

- 1) Choix de la forme analytique (dépend du type de liaisons)
- 2) Ajustement de la fonction selon les propriétés physiques (énergie de cohésion, élasticité, énergie de surface et d'interface, relation pression-volume, etc.)

Dynamique moléculaire

➤ Exemple d'application : irradiation nucléaire de matériaux

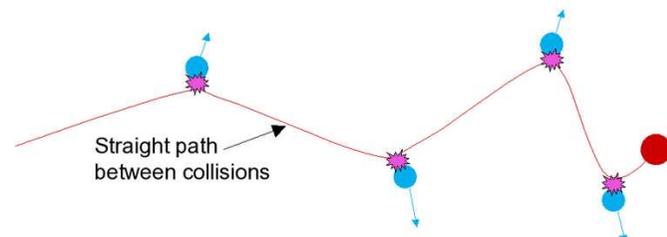
Bombardement neutronique intense qui entraîne de nombreux changements microstructuraux et altère les propriétés mécaniques des matériaux utilisés (notamment leur résistance à la fissuration).



Arrivée d'une particule source qui interagit avec les atomes composant la cible en leur transmettant une certaine quantité d'énergie cinétique. Si suffisante pour que l'atome (*Primary Knocked-on Atom* PKA) quitte son site atomique, celui-ci entrera en collision avec les atomes de son voisinage.

Ainsi de suite ...

Phénomène proche en proche : « cascade de déplacements » jusqu'à ce que toute l'énergie cinétique du neutron ait été transférée au réseau.



Dynamique moléculaire

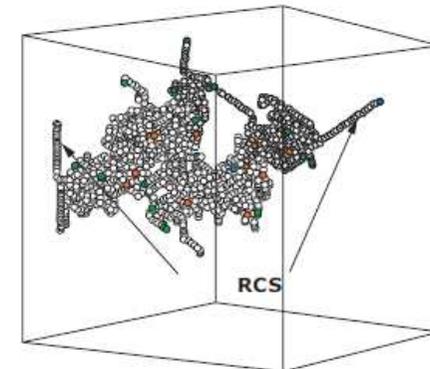
➤ Exemple d'application : irradiation nucléaire de matériaux

Aspect typique d'une cascade initiée dans du fer cubique centré par un PKA de 20 keV à 600 K à la fin de la phase de recombinaison.

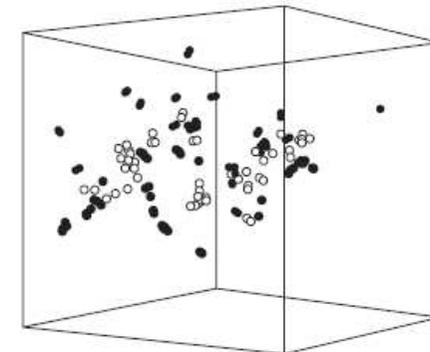
(a) Atomes remplacés c'est-à-dire qui ont changé de site (sphères blanches).

(b) Dommage résiduel : auto-interstitiels (sphères sombres) et lacunes (sphères blanches).

La taille de la boîte est de 23 nm de côté. On observe la présence de longues séquences de déplacements focalisés avec remplacements associés (*Replacement Collision Sequences RCS*) se terminant par un auto-interstitiel



(a)



(b)

Dynamique moléculaire

➤ Exemple d'application : DM gros grains

Utile pour augmenter l'échelle de temps en abandonnant l'échelle atomique

Permet de modéliser les interactions entre unités structurales d'un matériau : chaque « atome », ou noeud de simulation, ne représente alors plus un atome au sens strict, mais un ensemble d'atomes (par exemple, quelques monomères dans une chaîne macromoléculaire).

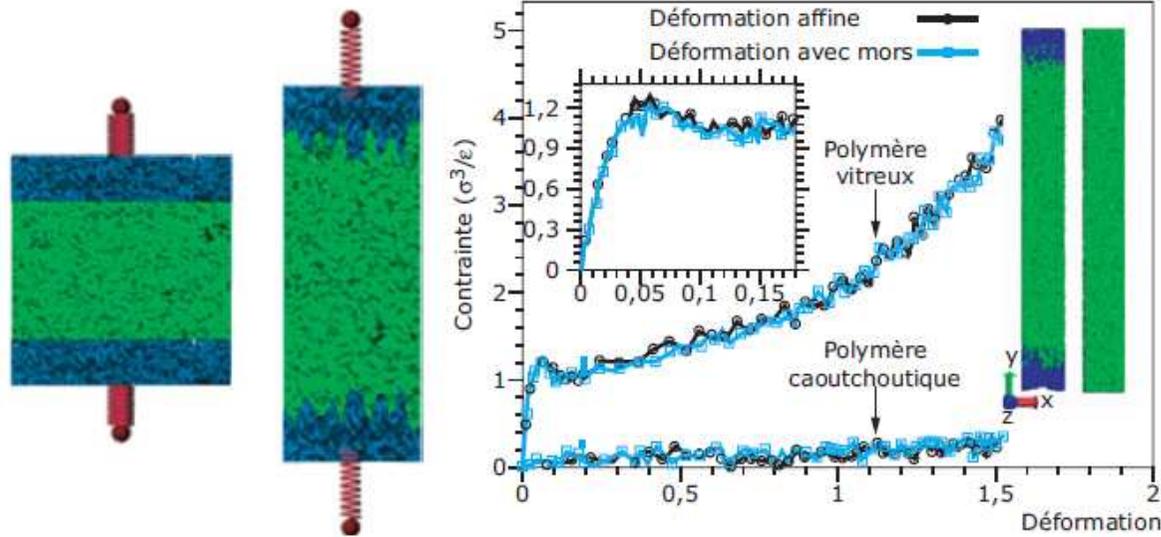
Les potentiels généralement utilisés pour prendre en compte les interactions entre deux noeuds voisins d'une même chaîne (liaisons fortes) sont des potentiels de type *Finitely Extensible Nonlinear Elastic* (FENE), alors que les autres liaisons (liaisons faibles) sont modélisés par des potentiels de Lennard-Jones (LJ) :

$$U_{\text{FENE}} = \frac{kR_0^2}{2} \ln \left[1 - \left(\frac{r}{R_0} \right)^2 \right]$$
$$U_{\text{LJ}} = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

k et R_0 sont la raideur et la largeur de la liaison FENE; ε et σ sont l'énergie et la longueur de la liaison LJ.

Dynamique moléculaire

➤ Exemple d'application : DM gros grains



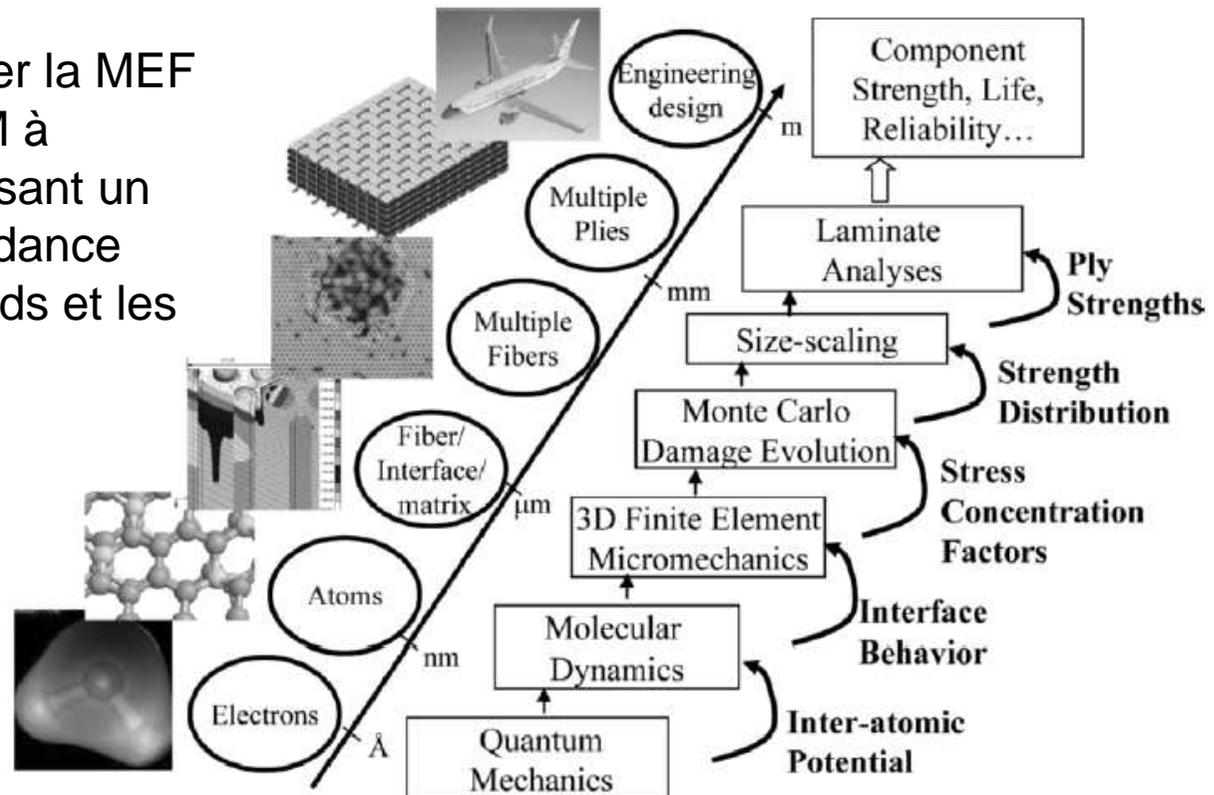
Essai de traction sur un polymère en dynamique moléculaire « gros grains ». Comparaison entre une déformation affine de la boîte de simulation et une déformation avec mors (partie bleue). La boîte de simulation est constituée de 200 chaînes enchevêtrées : chaque chaîne fait une longueur de 200 « grains »

Dynamique moléculaire

➤ Relier la DM aux méthodes appliquées aux échelles supérieures

La DM peut être utilisée pour le calcul des effets locaux en lieu des dislocations et des micro-fissures, alors que les méthodes continues peuvent être utilisées dans le même système dans les zones éloignées des défauts.

Il est aussi possible de lier la MEF à l'échelle macro à la DM à l'échelle micro en définissant un maillage avec correspondance une-à-une entre les nœuds et les atomes.



2. Modélisation hiérarchique des déformations d'un matériau de l'échelle atomique à l'échelle macroscopique

QUESTIONS

Nécessité de modéliser les atomes ?

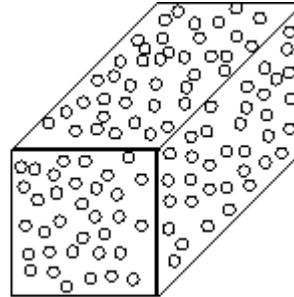
Pour quel type d'applications ?



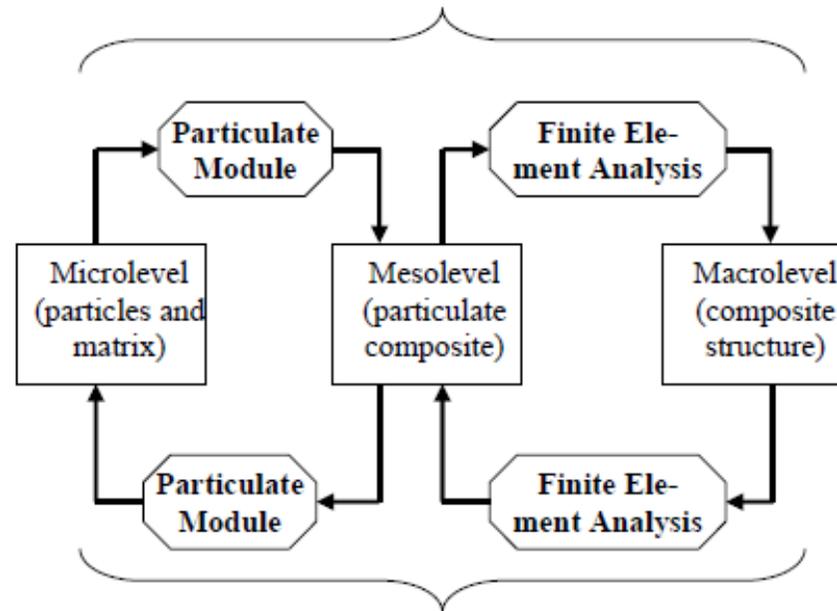
eDURMAT 18-22 novembre 2013, Nantes

4. Résistance d'un matériau à renforts

Matériaux à inclusions particulières

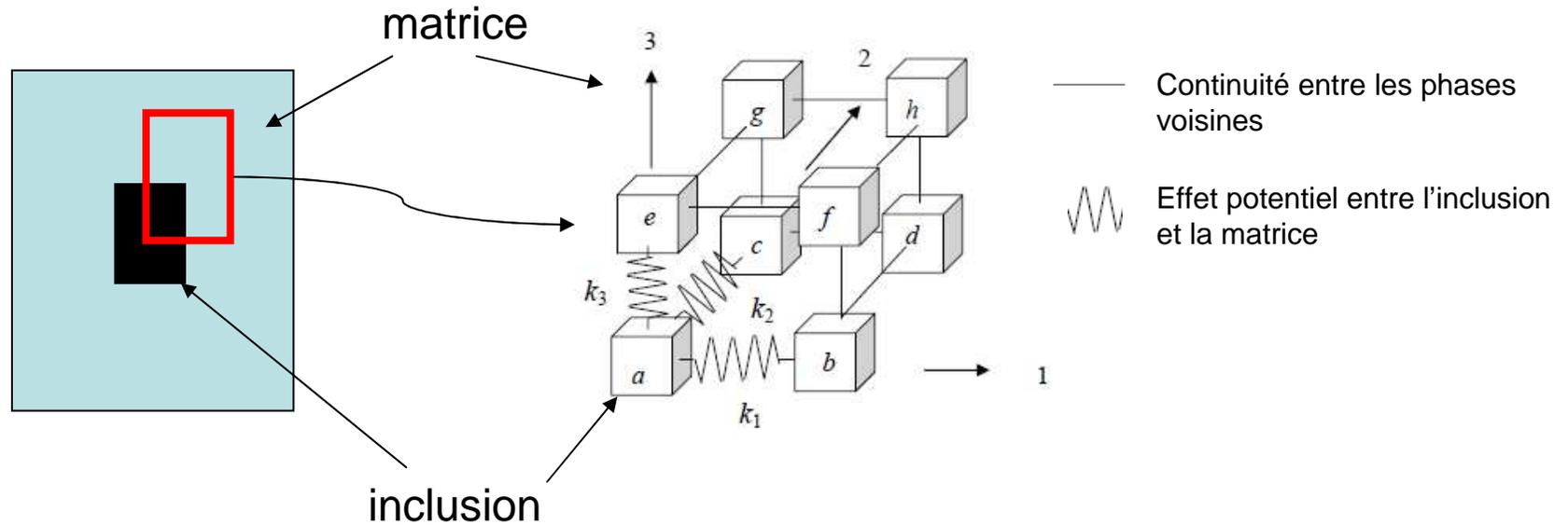


Homogénéisation



Localisation

Matériaux à inclusions particulières



Continuité des contraintes aux interfaces $\|\bar{\sigma} \cdot \bar{n}\| = \bar{0}$

Continuité des déplacements aux interfaces $\|\bar{u}(\bar{y})\| = \bar{0}$

Matériaux à inclusions particulières

A l'équilibre on a : $\sigma_{11}^a = \sigma_{11}^b$, $\sigma_{11}^c = \sigma_{11}^d$, $\sigma_{11}^e = \sigma_{11}^f$, $\sigma_{11}^g = \sigma_{11}^h$,

$$\sigma_{22}^a = \sigma_{22}^c, \quad \sigma_{22}^b = \sigma_{22}^d, \quad \sigma_{22}^e = \sigma_{22}^g, \quad \sigma_{22}^f = \sigma_{22}^h,$$

Idem pour les contraintes de cisaillement

Pour les contraintes

$$\sigma_{33}^a = \sigma_{33}^e, \quad \sigma_{33}^b = \sigma_{33}^f, \quad \sigma_{33}^c = \sigma_{33}^g, \quad \sigma_{33}^d = \sigma_{33}^h,$$

$$l_p \varepsilon_{11}^a + l_m \varepsilon_{11}^b + \left(l_p^2 \sigma_{11}^a / k_1 \right) = l_p \varepsilon_{11}^c + l_m \varepsilon_{11}^d = l_p \varepsilon_{11}^e + l_m \varepsilon_{11}^f = l_p \varepsilon_{11}^g + l_m \varepsilon_{11}^h.$$

Pour les déformations

$$l_p \varepsilon_{22}^a + l_m \varepsilon_{22}^c + \left(l_p^2 \sigma_{22}^a / k_2 \right) = l_p \varepsilon_{22}^b + l_m \varepsilon_{22}^d = l_p \varepsilon_{22}^e + l_m \varepsilon_{22}^g = l_p \varepsilon_{22}^f + l_m \varepsilon_{22}^h.$$

$$l_p \varepsilon_{33}^a + l_m \varepsilon_{33}^e + \left(l_p^2 \sigma_{33}^a / k_3 \right) = l_p \varepsilon_{33}^b + l_m \varepsilon_{33}^f = l_p \varepsilon_{33}^c + l_m \varepsilon_{33}^g = l_p \varepsilon_{33}^d + l_m \varepsilon_{33}^h.$$

avec $l_p = V_p^{1/3}$,
 $l_m = 1 - l_p$.

Avec V_p la fraction vol. de l'inclusion et $(V_p)^{1/3}$ sa dimensions

Matériaux à inclusions particulières

Champs moyens de contraintes et déformations pour l'ensemble des cellules
(V^n : fraction volumique de la cellule n)

$$\bar{\sigma}_{ij} = \sum_n V^n \sigma_{ij}^n$$

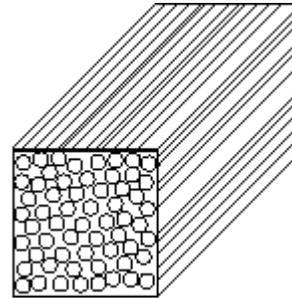
$$\bar{\varepsilon}_{ij} = \sum_n V^n \eta_{ij}^n$$



$$\begin{aligned} [E^{eff}] &= [V][E][R] \\ \{\varepsilon\} &= [R]\{\bar{\varepsilon}\} \end{aligned}$$

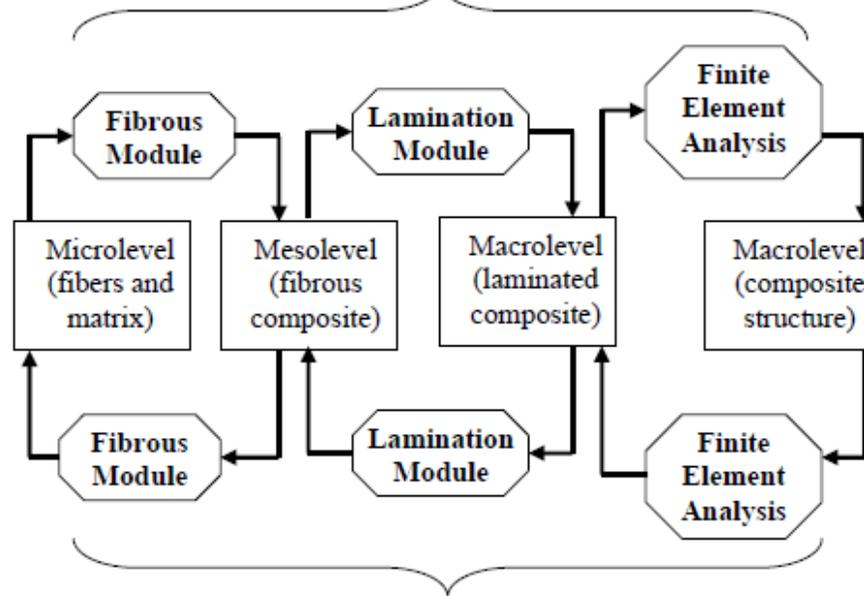
Tenseur effectif des propriétés du composite
où R est le tenseur des localisations

Matériaux fibrés



Description en multi-couches

Homogénéisation



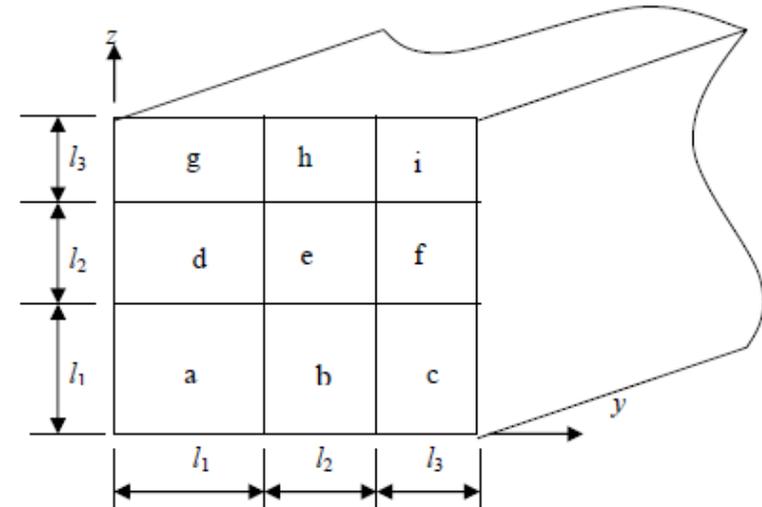
Une étape supplémentaire :
Module de laminage

Localisation

Matériaux fibrés

A l'équilibre on a : Pour les contraintes

$$\begin{aligned} \Delta \sigma_y^a &= \Delta \sigma_y^b, & \Delta \sigma_y^b &= \Delta \sigma_y^c, & \Delta \sigma_y^d &= \Delta \sigma_y^e, \\ \Delta \sigma_y^e &= \Delta \sigma_y^f, & \Delta \sigma_y^g &= \Delta \sigma_y^h, & \Delta \sigma_y^h &= \Delta \sigma_y^i, \\ \Delta \sigma_z^a &= \Delta \sigma_z^d, & \Delta \sigma_z^d &= \Delta \sigma_z^g, & \Delta \sigma_z^b &= \Delta \sigma_z^e, \\ \Delta \sigma_z^e &= \Delta \sigma_z^h, & \Delta \sigma_z^c &= \Delta \sigma_z^f, & \Delta \sigma_z^f &= \Delta \sigma_z^i, \end{aligned}$$



Pour les déformations

$$\begin{aligned} l_1 \Delta \varepsilon_y^a + l_2 \Delta \varepsilon_y^b + l_3 \Delta \varepsilon_y^c &= l_1 \Delta \varepsilon_y^d + l_2 \Delta \varepsilon_y^e + l_3 \Delta \varepsilon_y^f \\ &= l_1 \Delta \varepsilon_y^g + l_2 \Delta \varepsilon_y^h + l_3 \Delta \varepsilon_y^i, \\ l_1 \Delta \varepsilon_z^a + l_2 \Delta \varepsilon_z^d + l_3 \Delta \varepsilon_z^g &= l_1 \Delta \varepsilon_z^b + l_2 \Delta \varepsilon_z^e + l_3 \Delta \varepsilon_z^h \\ &= l_1 \Delta \varepsilon_z^c + l_2 \Delta \varepsilon_z^f + l_3 \Delta \varepsilon_z^i, \end{aligned}$$

avec

$$l_1 = \sqrt{v_f}, \quad l_2 = \sqrt{l_1^2 + v_m} - l_1, \quad l_3 = 1 - l_1 - l_2,$$

3. Résistance d'un matériau à renforts

QUESTIONS

Quelles informations doit-on apporter à ces approches ?

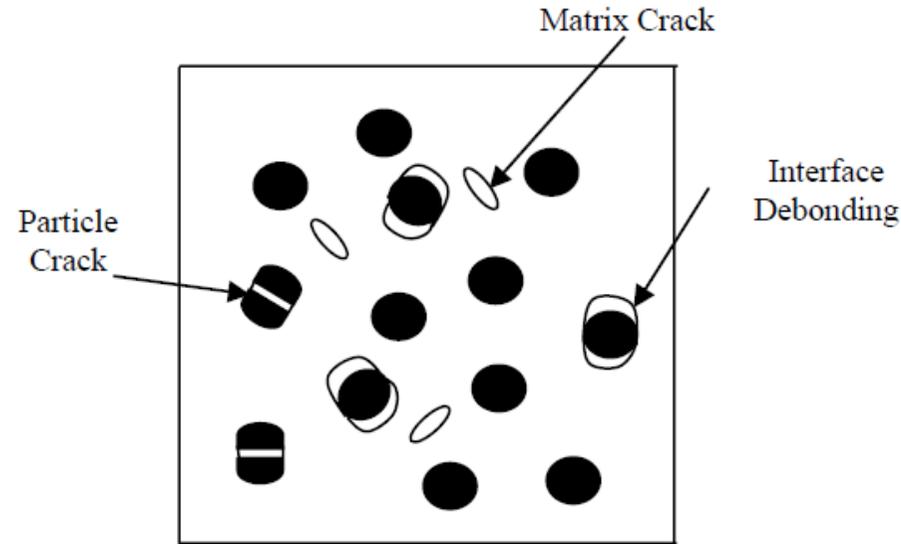
Que peut-on en tirer ?



eDURMAT 18-22 novembre 2013, Nantes

5. Modélisation multi-échelles de l'endommagement

Endommagement du béton

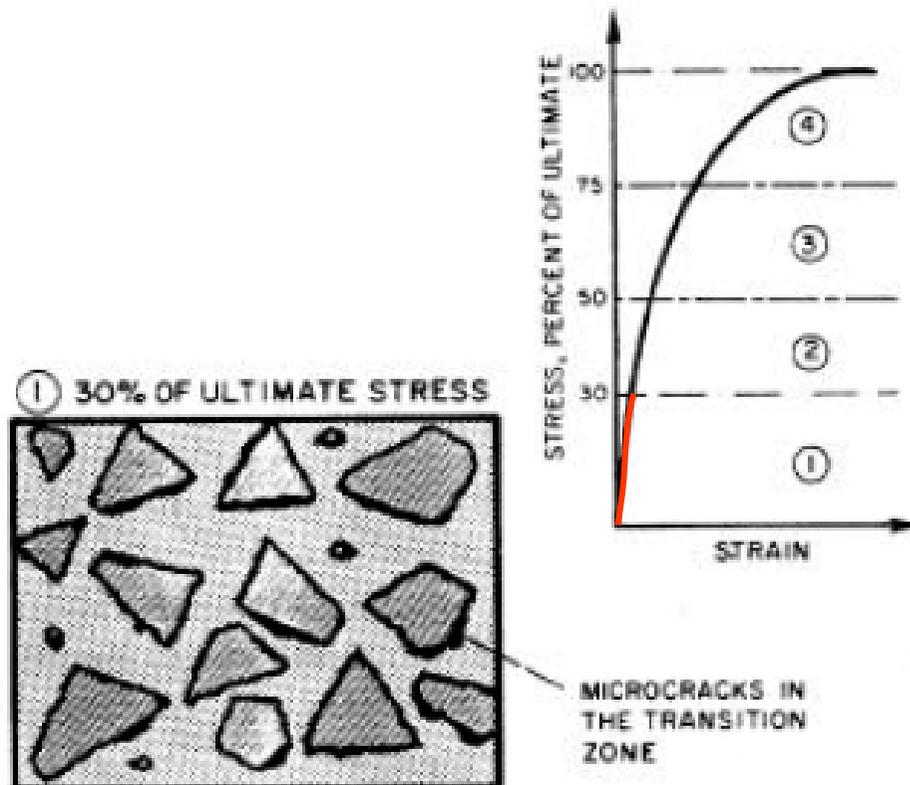


L'endommagement est l'ensemble des évolutions irréversibles accompagnées par des mécanismes de dissipation d'énergie.

La rupture est définie par l'impossibilité pour le système d'assurer ses fonctionnalités structurelles.

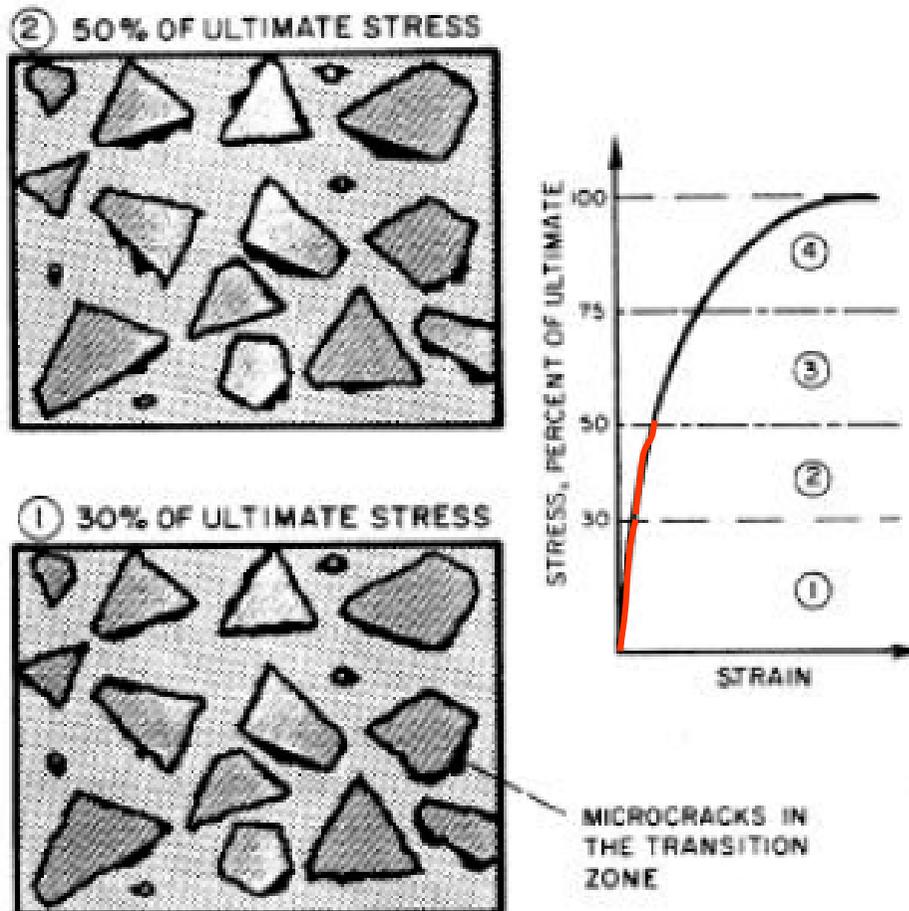
Endommagement du béton

Si $F < 30\%$ de la charge ultime : les microfissures dans ITZ restent stables et le comportement est élastique linéaire



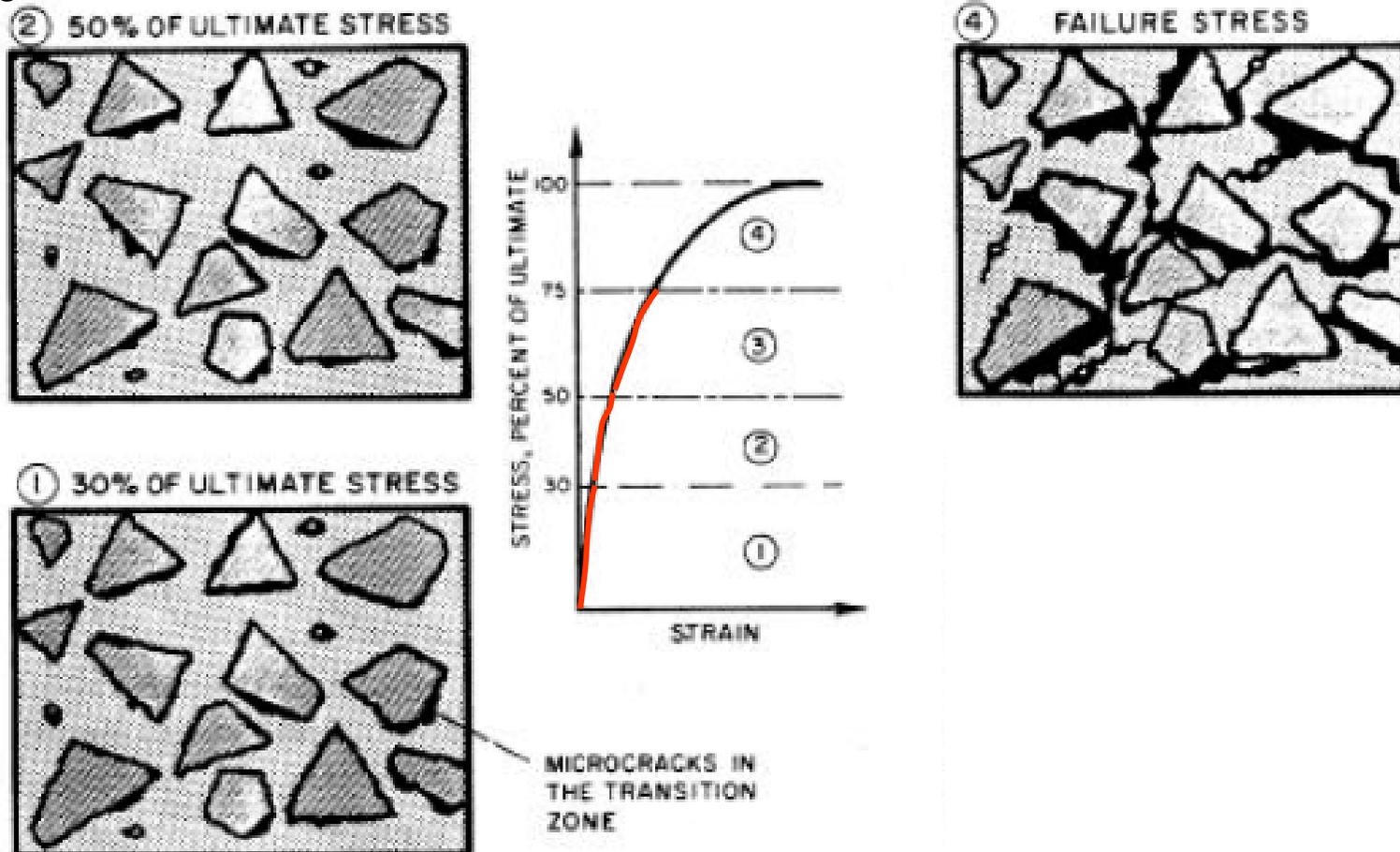
Endommagement du béton

Si $30\% < F < 50\%$ de la charge ultime : les microfissures dans ITZ se propagent et le comportement linéaire commence à dévier. Localisation de contraintes



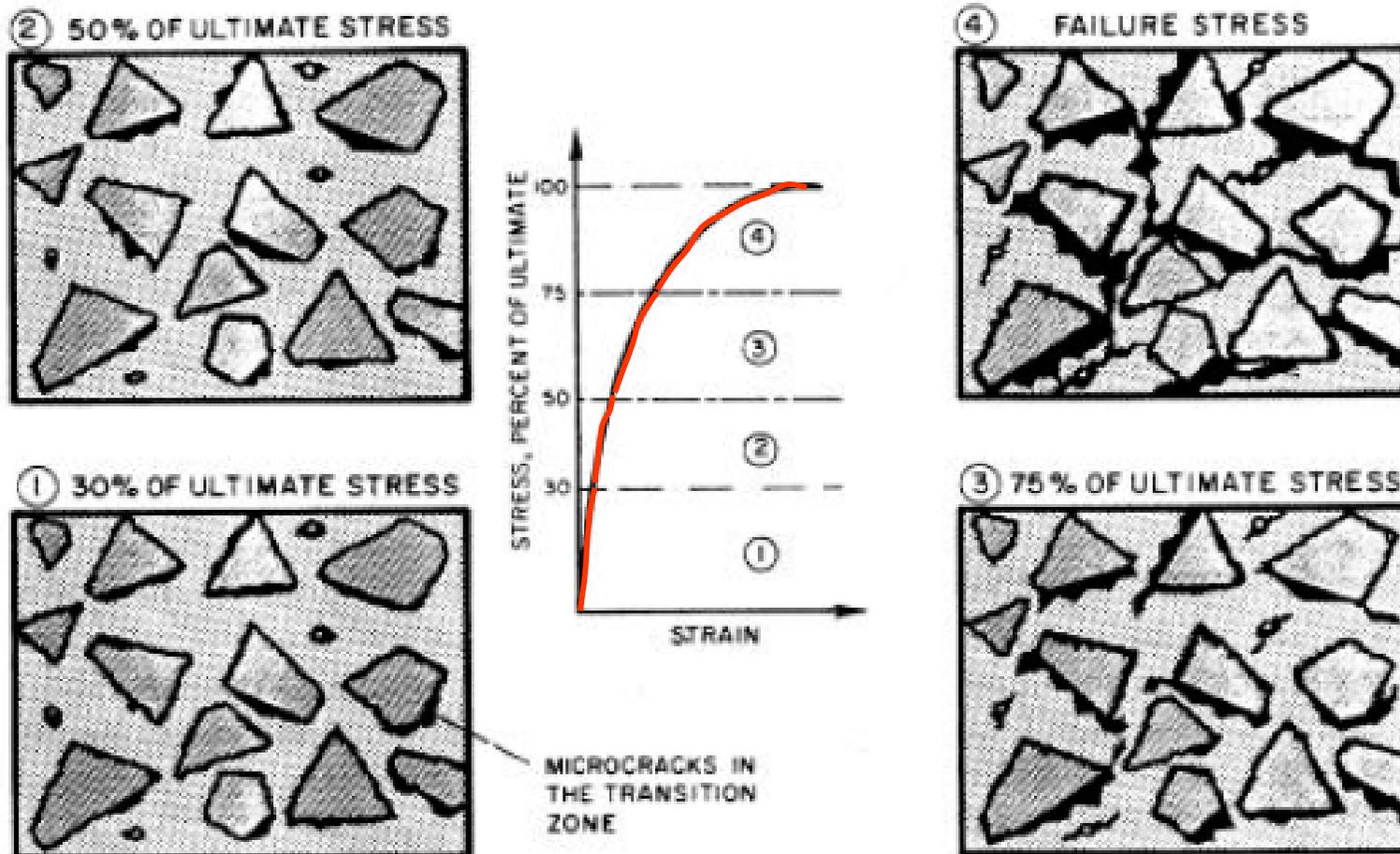
Endommagement du béton

Si $50\% < F < 75\%$ de la charge ultime : les microfissures se forment dans la pâte à 60% de la charge. Elles se propagent dans la pâte et le comportement devient non-linéaire



Endommagement du béton

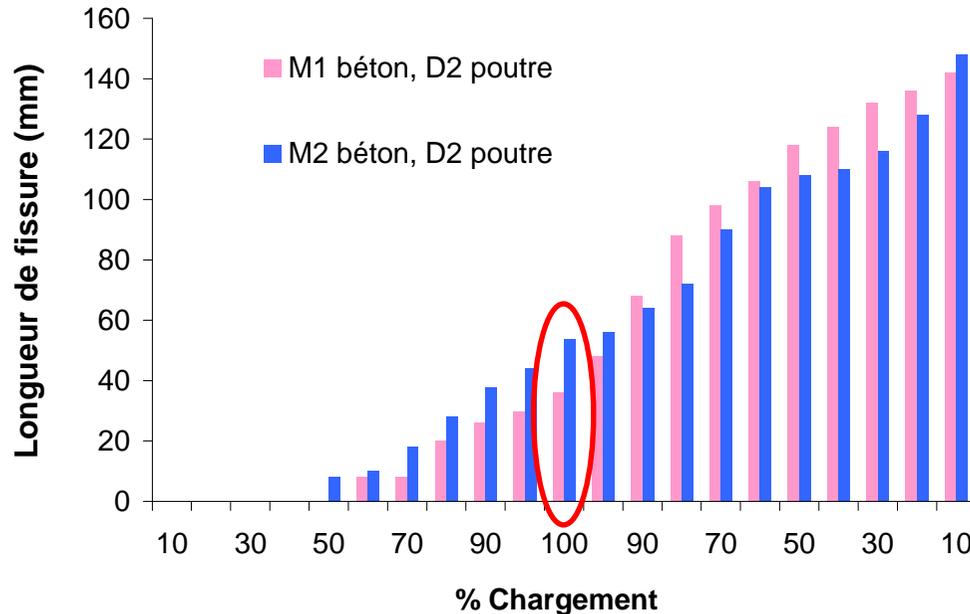
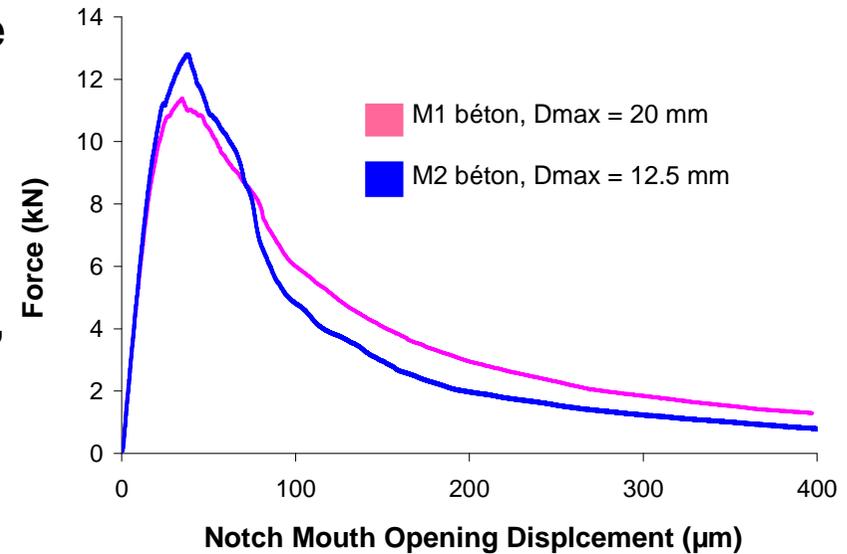
Si $F > 75\%$ de la charge ultime : apparition de fissures continues dans la pâte et propagation rapide. Début de la rupture.



Quel type d'endommagement pour quelle échelle

Grande variété de mécanismes dissipatifs de l'énergie associée à l'endommagement

L'échelle de base liée à ces mécanismes dépend de la taille des hétérogénéités (grains de ciment, grains de sable, granulats, interface acier-béton).



↓ Taille de granulat

↑ Charge maximale

↑ Longueur de la fissure au pic

Quel type d'endommagement pour quelle échelle

Si l'intérêt est de définir la réponse inélastique des caractéristiques effectives globales alors il suffit d'introduire dans le modèle des mécanismes de dissipation d'énergie.

Si l'intérêt est de définir les caractéristiques particulières de rupture d'un matériau, l'analyse doit se faire à l'échelle locale des mécanismes physiques.

Les variables macro d'endommagement sont judicieusement choisies pour refléter les processus irréversibles à l'échelle méso. Tel que pour une homogénéisation d'ordre faible ces variables macro sont définies par la moyenne des variables méso en négligeant les détails liés à la distribution de l'endommagement dans le VER. Mais cette procédure fait perdre les informations sur la distribution de l'endommagement et ne permet pas le développement fiable d'équations d'évolution de l'endommagement.

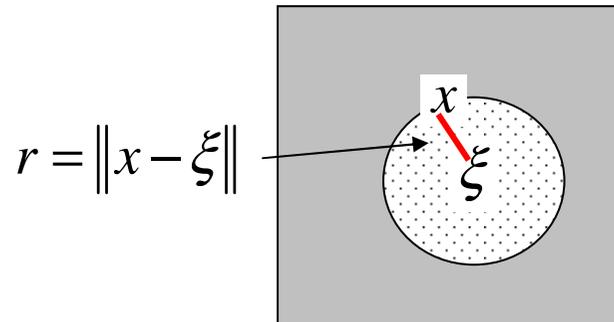
Quel type d'endommagement pour quelle échelle

Les variables de description de l'endommagement peuvent être des scalaires ou des tenseurs.

Un caractère important de l'endommagement doit être pris en compte : son influence sur son espace proche environnant (effet non-local).

Variables remplacées par des variables « non-locales » obtenues par moyenne des points voisins

$$\bar{\varepsilon}_{eq}(x) = \int_V \alpha(x, \xi) \varepsilon_{eq}(\xi) d\xi \quad \text{avec} \quad \alpha(x, \xi) = \frac{\alpha_0(\|x - \xi\|)}{\int_V \alpha_0(\|x - \varsigma\|) d\varsigma}$$



Exemple : $\alpha_0(r) = \exp\left(-\frac{r^2}{2l^2}\right)$

Longueur interne

4. Modélisation multi-échelles de l'endommagement

QUESTIONS

Quelle est la signification des échelles de longueur de l'endommagement ?

En général, l'échelle de longueur est définie telle que les événements interviennent sur une distance plus petite que le VER.

Peut-on identifier une hiérarchie d'échelles de longueur ?

Une simple hiérarchie n'existe pas due à des mécanismes d'endommagement complexes agissant simultanément (microfissuration de la matrice, glissement matrice-granulat, glissement matrice-acier, etc.)



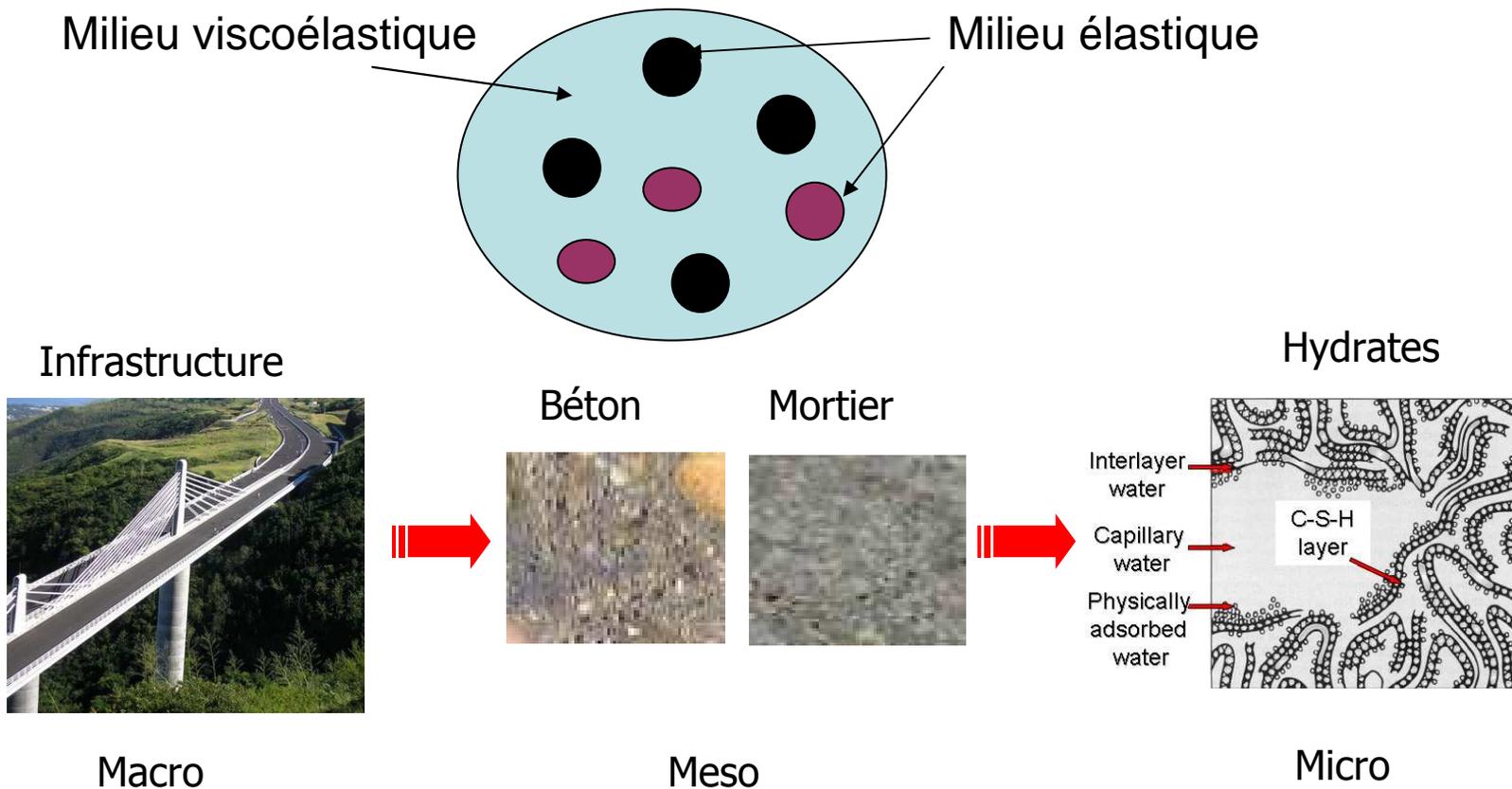
eDURMAT 18-22 novembre 2013, Nantes

6. Dépendance au temps

Fluage

L'objectif est de modéliser l'évolution de multiples microfissures dans un milieu viscoélastique pouvant conduire à la ruine de la structure.

Exple : formations géologiques, matériaux cimentaires, organes humains, composants composites de structures aéronautiques, structures métalliques, etc.



Fluage

➤ Formulation générale du problème

Micro

$$\bar{\nabla} \cdot \bar{\sigma}_\mu + \rho \bar{f} = 0, \quad \forall \bar{x}_\mu \in V_\mu,$$

$$\bar{\varepsilon}_\mu \equiv \frac{1}{2} [\bar{\nabla} \bar{u}_\mu + (\bar{\nabla} \bar{u}_\mu)^T],$$

$$\bar{\sigma}_\mu(\bar{x}_\mu, t) = \Omega_{\tau=-\infty}^{t=t} \{ \bar{\varepsilon}_\mu(\bar{x}_\mu, \tau) \},$$

+ Modèle d'endommagement

Cpt viscoélastique linéaire non-vieillissant

$$\bar{\sigma}_\mu(\bar{x}_\mu, t) = \int_{-\infty}^t \tilde{E}_\mu(\bar{x}_\mu, t - \tau) \frac{\partial \bar{\varepsilon}_\mu(\bar{x}_\mu, \tau)}{\partial \tau} d\tau,$$

Macro

$$\bar{\sigma}_{\mu+1} = \bar{\sigma}_\mu + \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{V_\mu |\bar{x}|^j} \int_{V_\mu} (\bar{\sigma}_\mu - \bar{\sigma}) |\bar{x}|^j dV, \quad \text{avec} \quad \bar{\sigma}_\mu \equiv \frac{1}{V_\mu} \int_{V_\mu} \bar{\sigma}_\mu dV$$

$$\bar{\sigma}_{\mu+1}(\bar{x}_{\mu+1}, t) = \int_{-\infty}^t \tilde{E}_{\mu+1}(\bar{x}_{\mu+1}, t - \tau) \frac{\partial \bar{\varepsilon}_{\mu+1}}{\partial \tau} d\tau, \quad \text{avec} \quad \tilde{E}_{\mu+1}(\bar{x}_{\mu+1}, t) \equiv \int_{V_\mu} \tilde{E}(\bar{x}_\mu, t - \tau) dV$$

Fluage

➤ Exemple de problème couplé fluage-endommagement

➤ Loi de comportement

$$\underline{\underline{\sigma}}(\underline{y}) = \underline{\underline{C}}(\underline{y}, \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{y})) : \underbrace{(\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{y}) - \underline{\underline{\varepsilon}}^{fp}(\underline{y}))}_{\underline{\underline{\varepsilon}}^e}$$

➤ Modèle d'endommagement basé sur la relation entre la contrainte totale et la contrainte effective [Fichant et al., 99] :

$$\underline{\underline{\tilde{\sigma}}}(\underline{y}) = \underline{\underline{C}}^0(\underline{y}) : \underline{\underline{\varepsilon}}^e(\underline{y}) \quad \text{et} \quad \underline{\underline{\sigma}}(\underline{y}) = \underline{\underline{C}}(\underline{y}, \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{y})) : \left(\underline{\underline{C}}^0(\underline{y}) \right)^{-1} : \underline{\underline{\tilde{\sigma}}}(\underline{y})$$

➤ Evolution de l'endommagement :

$$d = 1 - \frac{\underline{\underline{\varepsilon}}_{d0}}{\underline{\underline{\varepsilon}}_{eq}} \exp \left[B_t (\underline{\underline{\varepsilon}}_{d0} - \underline{\underline{\varepsilon}}_{eq}) \right]$$

[Saliba et al., 2013][Mazzotti et Savoia, 2003]

Paramètre de couplage ?

$$\underline{\underline{\varepsilon}}_{eq} = \sqrt{\langle \underline{\underline{\varepsilon}}^e \rangle_+ : \langle \underline{\underline{\varepsilon}}^e \rangle_+ + \beta \langle \underline{\underline{\varepsilon}}^v \rangle_+ : \langle \underline{\underline{\varepsilon}}^v \rangle_+}$$

Fluage

- Visco-elastic model based on 3 Kelvin-voigt chains:

$$\eta_{fp}^i \dot{\underline{\varepsilon}}_{fp}^i(t) + k_{fp}^i \underline{\varepsilon}_{fp}^i(t) = \underline{\tilde{\sigma}}(t)$$

- Linearisation of the stress:

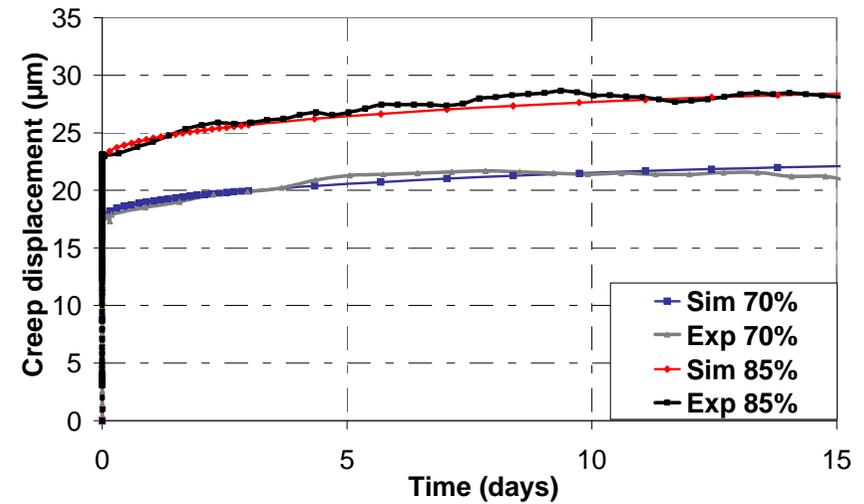
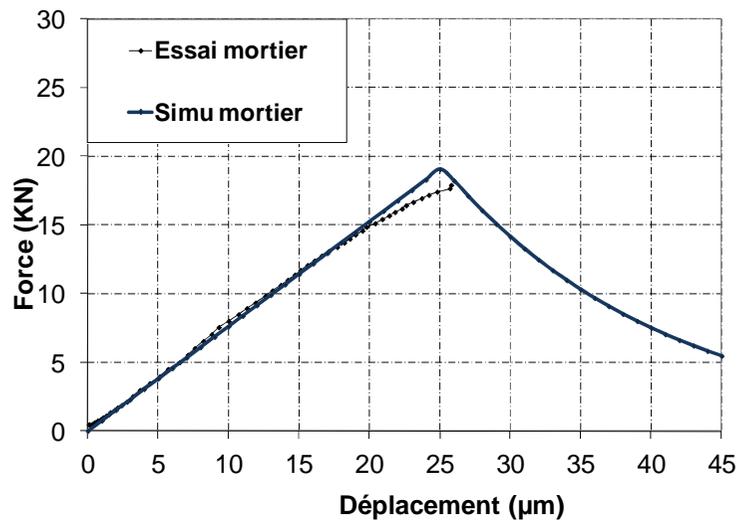
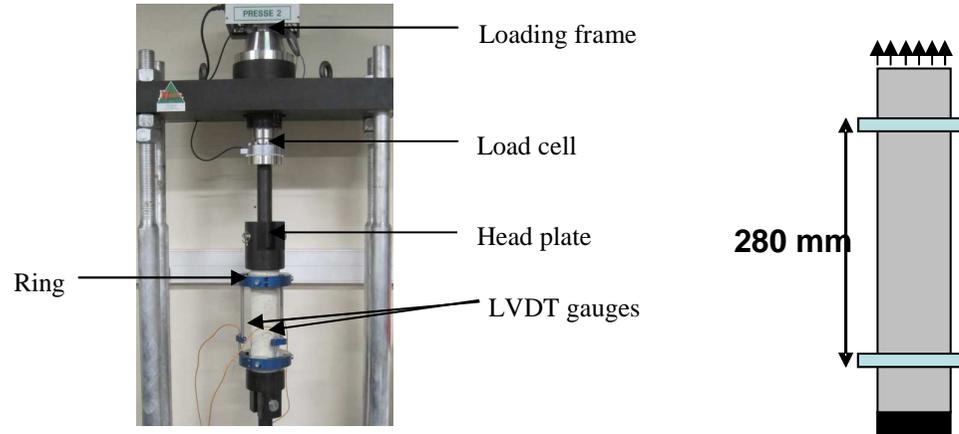
$$\underline{\tilde{\sigma}}(t) = \underline{\tilde{\sigma}}_n + \Delta \underline{\tilde{\sigma}}_{n+1} \frac{(t - t_n)}{\Delta t_n}$$

- Creep strain

$$\Delta \underline{\varepsilon}_{fp}^{n+1} = \underline{\varepsilon}_{fp}^{n+1} - \underline{\varepsilon}_{fp}^n = \boxed{a_{fp}} \underline{\varepsilon}_{fp}^n + \boxed{b_{fp}} \underline{\tilde{\sigma}}_n + \boxed{c_{fp}} \underline{\tilde{\sigma}}_{n+1}$$

Fluage

Calibration of the failure and visco-elastic properties of matrix and inclusions

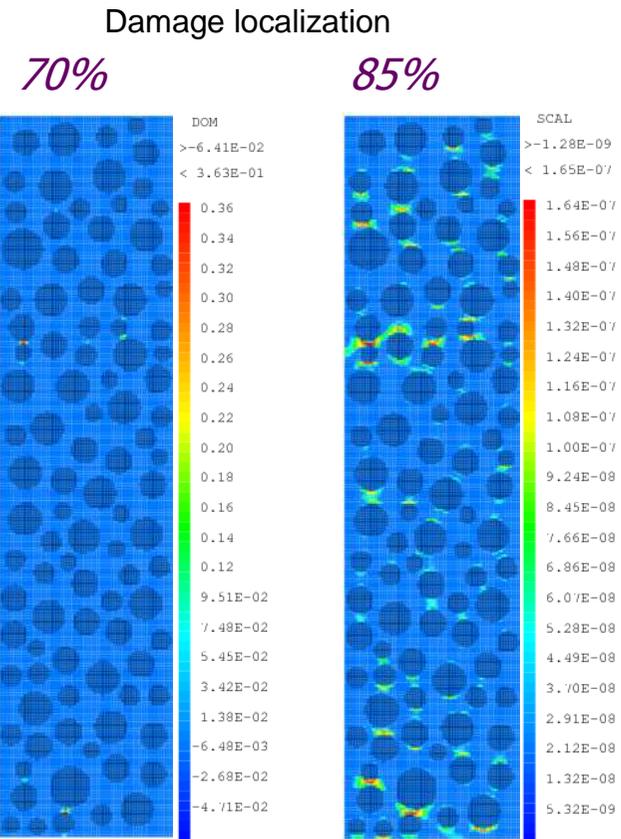
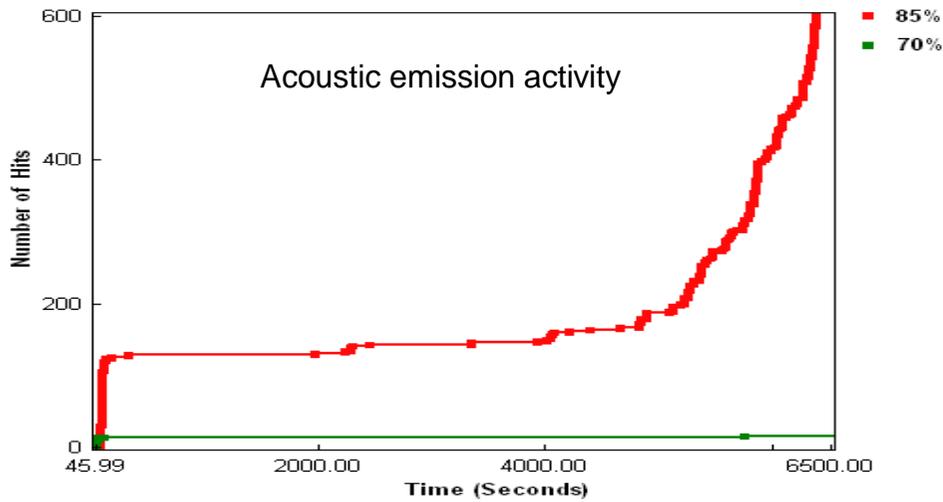
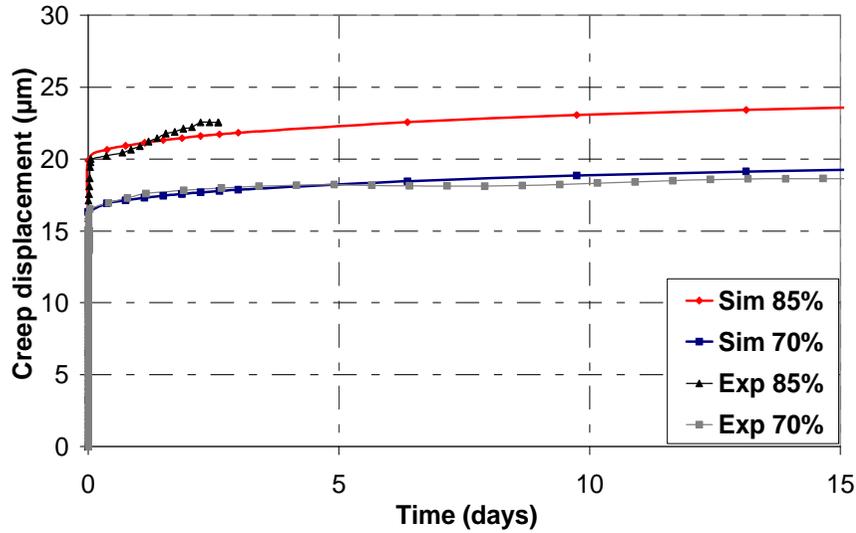


	E (GPa)	ν	f_t (MPa)	Gf (J/m ²)
Mortar	22,5	0,24	2	20
Aggregate	60	0,24	6	60

K_{fp}^1 (GPa)	K_{fp}^2 (GPa)	K_{fp}^3 (GPa)
776,7	472	98,1
τ_{fp}^1 (days)	τ_{fp}^2 (days)	τ_{fp}^3 (days)
0,1	1	10

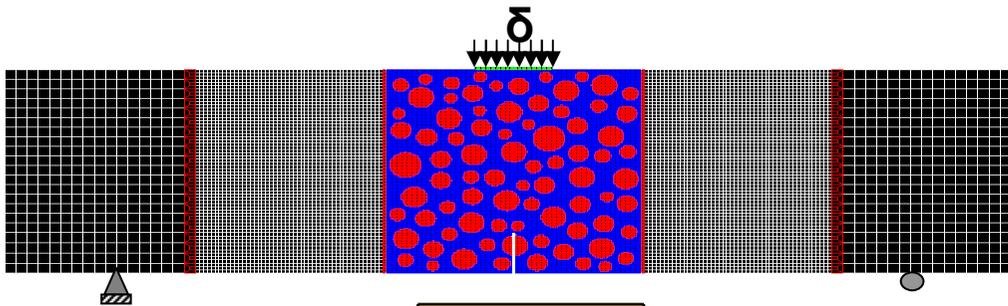
Fluage

Simulation of the tensile creep of concrete

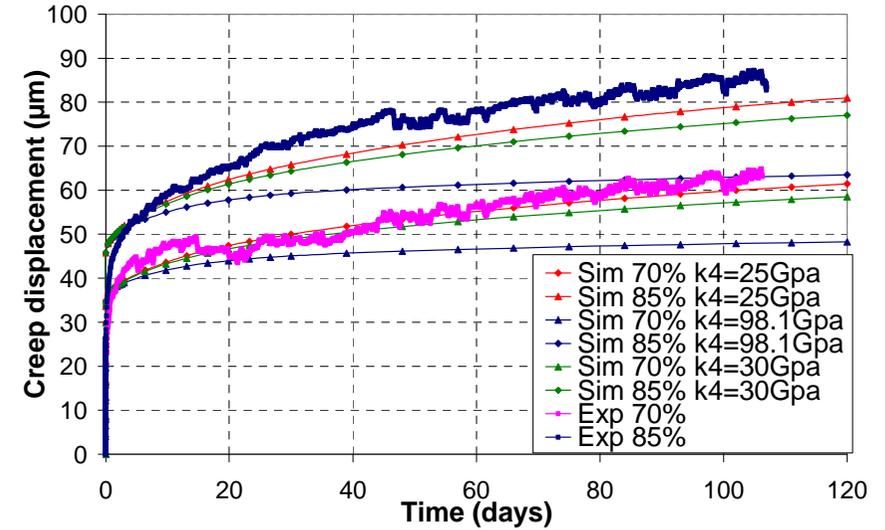


Fluage

Simulation of the flexural creep of concrete



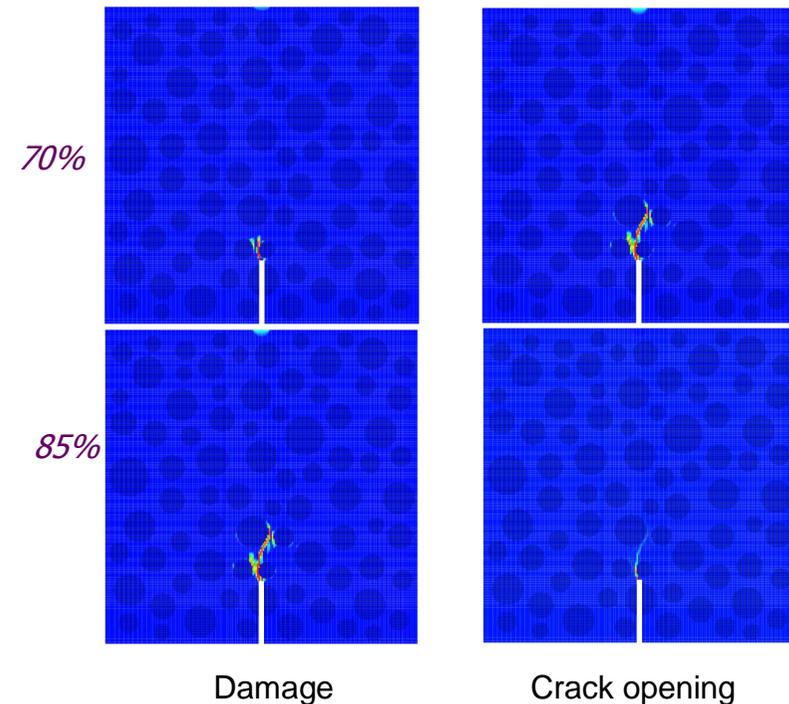
K_{fp}^4 (GPa)
98,1
τ_{fp}^4 (jours)
100



The macroscopic behaviour of concrete under creep loading is characterized by a progressive degradation of the material stiffness.

This behaviour is caused by the growth and coalescence of micro-cracks at the mortar-aggregates interfaces due to strain incompatibilities.

That means that the mechanical properties of concrete are gradually and locally degraded under creep





eDURMAT 18-22 novembre 2013, Nantes

QUESTIONS

Intérêt de la modélisation micromécanique / modélisation macroscopique ?

Problèmes liés à la modélisation micromécanique ?

Comment les éviter ?

Modélisation prédictive ?

Autres questions ?