
Application de la méthode X-FEM à la résolution de problèmes de micromécanique

Patrice Cartraud — Mathieu Cloirec — Nicolas Moës

GeM (Institut de Recherche en Génie Civil et Mécanique, UMR CNRS 6183)

Ecole Centrale de Nantes

BP 92101

F-44321 Nantes Cedex 3

{patrice.cartraud,mathieu.cloirec,nicolas.moes}@ec-nantes.fr

RÉSUMÉ. La méthode des éléments finis étendue X-FEM permet d'enrichir les fonctions de forme éléments finis, et donc de prendre en compte des discontinuités au sein d'un élément. Elle est appliquée ici à la résolution de problèmes de micromécanique, pour faciliter le maillage de la cellule, qui peut ainsi ne pas respecter l'interface matériau. Une nouvelle fonction d'enrichissement est proposée, et une solution numérique de même qualité qu'une approche éléments finis classique est obtenue. Plusieurs exemples numériques sont présentés, sur des applications matériau, et sur une structure câble.

ABSTRACT. The eXtended Finite Element Method (X-FEM) allows one to enrich finite element approximation space, thus accounting for discontinuities inside an element. This method is applied in this paper to the solution of micromechanical problem, in order to simplify the mesh generation, since it does not need to conform to the material interfaces. A new enrichment function is proposed, which turns out to have the same accuracy as the classical finite element method. Numerical experiments are presented, for material applications, and for a stranded-rope structure.

MOTS-CLÉS : homogénéisation, X-FEM, partition de l'unité, level set.

KEYWORDS: homogenization, X-FEM, partition of unity, level set.

1. Introduction

La méthode X-FEM (eXtended Finite Element Method) [MOË 00], repose sur la partition de l'unité [MEL 96], selon laquelle une approximation éléments finis peut représenter de façon exacte une fonction quelconque. Cette propriété permet, *via* de nouveaux degrés de liberté associés à ces fonctions, l'introduction de discontinuités à l'intérieur des éléments finis. Il en résulte un gain important lors de la réalisation du maillage.

Dans ce travail, cette méthode est appliquée à la résolution de problèmes de micromécanique.

Dans la littérature, c'est très majoritairement la méthode des éléments finis qui est utilisée pour la résolution de ce type de problèmes. Les approches varient au niveau de la mise en œuvre, et on se reportera à [BÖH 98] pour avoir un état de l'art dans ce domaine. Dans la plupart des travaux, le maillage se conforme au contour des hétérogénéités, c'est-à-dire qu'un seul matériau est présent au sein d'un élément fini. Il en résulte que le maillage peut s'avérer fastidieux, voire même impossible avec des mailleurs standards. L'utilisation de X-FEM permet de contourner ce problème, puisqu'il est possible d'utiliser un maillage qui ne respecte pas l'interface entre les constituants. Les éléments traversés par une interface matériau sont alors enrichis, en choisissant une fonction adaptée à la physique du problème, c'est-à-dire restituant la discontinuité des déformations à l'interface.

Après avoir rappelé brièvement la formulation des problèmes de micromécanique en section 2, le principe de la représentation géométrique de l'interface matériau, par la méthode des level-sets (fonctions de niveau) [SET 99], sera présentée en section 3. Le choix des fonctions d'enrichissement sera discuté en section 4, les performances de différentes fonctions étant évaluées en termes de convergence. Nous reprenons ici pour l'essentiel les idées présentées dans [MOË 03], en précisant certains détails d'implémentation. Enfin, la méthode sera appliquée à différents exemples, dont une application récente à un câble.

2. Formulation des problèmes de micromécanique

Nous considérons ici le cas de l'homogénéisation périodique en élasticité linéaire, mais l'approche numérique proposée peut s'appliquer aussi à une méthode de type modules effectifs ou à des lois de comportement non linéaires.

Les équations du problème à résoudre sont classiques, cf. [MIC 99] par exemple. Le volume élémentaire représentatif du matériau correspond à sa période (encore appelée cellule de base). Il s'agit de trouver, sur cette période, σ , e , u^m tels que :

$$\begin{cases} \operatorname{div} \sigma(\mathbf{y}) = \mathbf{0} \\ \sigma(\mathbf{y}) = \mathbf{a}(\mathbf{y}) : \mathbf{e}(\mathbf{y}) = \mathbf{a}(\mathbf{y}) : (\mathbf{E} + \mathbf{e}(u^m(\mathbf{y}))) \\ u^m \text{ périodique} \\ \sigma \cdot \mathbf{n} \text{ anti-périodique} \end{cases} \quad [1]$$

où anti-périodique signifie que la fonction prend des valeurs opposées sur 2 faces opposées de la cellule. La loi de comportement macroscopique relie \mathbf{E} à la moyenne des contraintes Σ , et est obtenue en soumettant la cellule à des déformations macroscopiques \mathbf{E} unitaires. Si on introduit le tenseur du second ordre \mathbf{I}^{ij} défini par :

$$\mathbf{I}_{kh}^{ij} = \frac{1}{2}(\delta_{ik}\delta_{jh} + \delta_{ih}\delta_{jk}) \quad [2]$$

et en notant \mathbf{u}^{mij} la solution du problème (1) avec la donnée $\mathbf{E} = \mathbf{I}^{ij}$, la raideur homogénéisée a pour expression ($|\Omega|$ désigne le volume de la cellule de base Ω) :

$$\begin{cases} a_{ijkl}^{hom} = a(\mathbf{I}^{kl} + \mathbf{u}^{mkl}, \mathbf{I}^{ij} + \mathbf{u}^{mij}) = a(\mathbf{I}^{kl}, \mathbf{I}^{ij}) + a(\mathbf{I}^{ij}, \mathbf{u}^{mkl}) \\ a(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \mathbf{e}(\mathbf{u}) : \mathbf{a} : \mathbf{e}(\mathbf{v}) d\Omega \end{cases} \quad [3]$$

La cellule de base contient les différentes phases du matériau, et les hétérogénéités peuvent être de forme complexe, ou en grand nombre quand on veut représenter le caractère aléatoire de leur disposition géométrique au sein du matériau.

La méthode X-FEM va permettre de considérer plusieurs matériaux au sein d'un même élément fini.

3. Représentation par fonctions de niveau

En pratique, l'interface matériau dans la cellule de base est décrite de façon implicite, en calculant à chaque nœud I du maillage, sa distance ϕ_I à l'interface (avec un signe positif ou négatif selon qu'on se situe dans l'une ou l'autre phase). On peut alors obtenir une représentation continue de la fonction de niveau, en utilisant les fonctions de forme éléments finis classiques :

$$\phi(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{I}} \phi_{\mathbf{I}} \mathbf{N}_{\mathbf{I}}(\mathbf{x}) \quad [4]$$

L'iso-zéro de la fonction de niveau ϕ représente donc la position de l'interface. On obtient ainsi une représentation de type élément fini de l'interface, qui a pour avantage de simplifier l'expression des fonctions d'enrichissement, cf. section 4.

Grâce à la méthode X-FEM, le maillage peut ne pas être conforme à l'interface. Cependant, l'interface étant décrite par une approche de type éléments finis, il est nécessaire de prendre un maillage assez fin à son voisinage pour, d'une part, être capable de la détecter (changement de signe de la fonction de niveau pour deux nœuds appartenant au même élément fini), et, d'autre part, en obtenir une bonne approximation géométrique. Ceci n'est pas en soi réellement pénalisant, car les gradients de la solution recherchée étant élevés près de l'interface, ce faisant on diminue l'erreur numérique. Dans ce travail, c'est sur des considérations exclusivement géométriques qu'un algorithme simple de raffinement de maillage est mis en œuvre. Le critère de raffinement est fondé sur la comparaison de la courbure de la fonction de niveau à la taille caractéristique de l'élément fini traversé, voir [MOË 03] pour plus de détails.

4. Stratégie d'enrichissement

Avec la méthode X-FEM, un enrichissement est ajouté à l'approximation éléments finis classique, en tirant profit des propriétés de la partition de l'unité [MEL 96] :

$$\mathbf{u}^{\text{X-FEM}} = \sum_{\mathbf{I}} \mathbf{u}_{\mathbf{I}} \mathbf{N}_{\mathbf{I}}(\mathbf{x}) + \mathbf{u}^{\text{enr}}, \quad \mathbf{u}^{\text{enr}} = \sum_{\mathbf{J}} \mathbf{a}_{\mathbf{J}} \mathbf{N}_{\mathbf{J}}(\mathbf{x}) \mathbf{F}(\mathbf{x}) \quad [5]$$

Les degrés de liberté additionnels $\mathbf{a}_{\mathbf{J}}$ apparaissent pour les nœuds dont le support est traversé par une interface matériau, cf. figure 1.

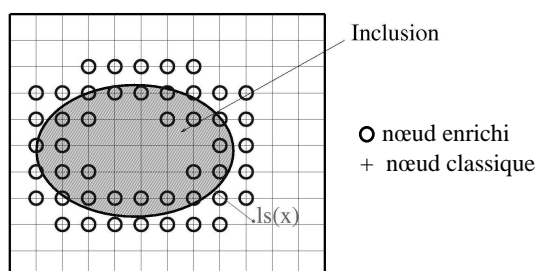


Figure 1. Principe de la méthode X-FEM

La fonction d'enrichissement F doit être choisie avec pour objectif de représenter au mieux la physique du problème, c'est-à-dire ici, avoir une dérivée discontinue à l'interface matériau. Il reste néanmoins plusieurs choix possibles. Dans [SUK 01], c'est la valeur absolue de la fonction de niveau qui est utilisée :

$$F^1(\mathbf{x}) = \left| \sum_{\mathbf{I}} \phi_{\mathbf{I}} \mathbf{N}_{\mathbf{I}}(\mathbf{x}) \right| \quad [6]$$

et il est montré que le fait de régulariser cette fonction loin de l'interface améliore la convergence. Nous proposons un autre choix de fonction d'enrichissement [MOË 03] :

$$F^2(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{I}} |\phi_{\mathbf{I}}| \mathbf{N}_{\mathbf{I}}(\mathbf{x}) - \left| \sum_{\mathbf{I}} \phi_{\mathbf{I}} \mathbf{N}_{\mathbf{I}}(\mathbf{x}) \right| \quad [7]$$

Ces différentes fonctions sont représentées dans le cas 1D figure 2. Notons que dans le cas 1D, les enrichissements $F^1 + \text{smoothing}$ et F^2 permettent d'obtenir la solution exacte, contrairement à F^1 . De plus, l'utilisation de $F^1 + \text{smoothing}$ pose certains problèmes d'interpolation quand on passe en 2D et 3D [BEL 03], ce qui rend *a priori* plus attractif l'enrichissement F^2 . Quoiqu'il en soit, le choix de la fonction d'enrichissement sera guidé par un critère de convergence, cf. section 5.

En pratique, lorsqu'un élément est traversé par une interface matériau, on suit la procédure générale exposée dans [MOË 99]. Ainsi, on intègre séparément dans les différents matériaux. La première étape consiste donc à décomposer l'élément en sous-domaines, propres à chaque matériau, et délimités par le contour initial de l'élément et l'iso-zéro de la fonction de niveau. Ces sous-domaines sont en 3D le résultat de la

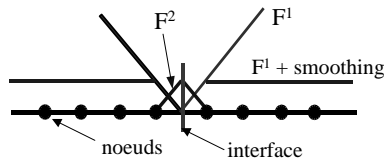


Figure 2. Les différents choix de fonctions d'enrichissement

coupe d'un tétraèdre par un plan. Pour l'intégration numérique, d'après (5), les fonctions d'interpolation pour le champ enrichi sont du type $N_J(\mathbf{x})\mathbf{F}(\mathbf{x})$, avec F qui peut prendre différentes formes, cf. figure 2. Le produit $N_J(\mathbf{x})\mathbf{F}(\mathbf{x})$ est donc polynômial, et le nombre de points de Gauss est déterminé de sorte que l'intégration soit exacte sur des éléments de forme simple.

5. Tests de convergence

Pour étudier les performances de la méthode X-FEM, le cas test d'une inclusion 2D circulaire en milieu infini est considéré. Cet exemple est traité avec un maillage éléments finis qui respecte l'interface (noté FEM), puis avec un autre maillage où on ne la respecte pas et où trois méthodes différentes de calcul sont utilisées. Dans la première (notée FEM-non-conforming), pour les éléments traversés par l'interface, la loi de comportement de chaque phase est prise en compte au niveau des points d'intégration. Dans les deux autres, on utilise la méthode X-FEM, avec l'enrichissement F^1 régularisé (méthode notée X-FEM-1 + smoothing) et F^2 respectivement (notée X-FEM-2).

L'erreur globale en énergie, évaluée par rapport à la solution exacte, est donnée figure 3. On constate que la méthode X-FEM-2 améliore la précision obtenue avec X-FEM-1, et atteint le même taux de convergence que l'approche éléments finis classique.

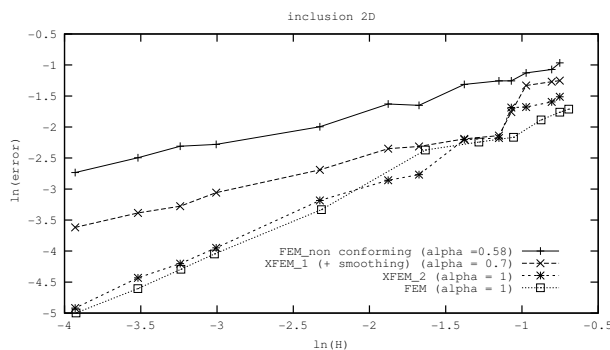


Figure 3. Taux de convergence pour l'inclusion 2D

6. Exemples numériques

6.1. Cas test : bicouche périodique

Nous considérons en tant que test de validation le cas d'un bicouche périodique, constitué de deux matériaux isotropes. Pour imposer les conditions de périodicité apparaissant dans la formulation des problèmes d'homogénéisation, les maillages de 2 faces de la cellule en vis-à-vis sont identiques. Lorsqu'un nœud sur le contour de la cellule, appartenant à un élément traversé par une interface, est enrichi, par périodicité, les nœuds correspondants le sont également. La période considérée est de forme cubique, et la trace du maillage sur une face est présentée figure 4, avec la nature des différents nœuds. La déformée correspondant à une déformation macroscopique de cisaillement dans le plan des couches est présentée figure 5. On vérifie la bonne prise en compte de la fonction d'enrichissement, avec une déformée linéaire par morceaux dans l'élément fini où les deux matériaux sont présents. Enfin, on vérifie que la solution numérique coïncide avec la solution analytique du problème [DUM 90].

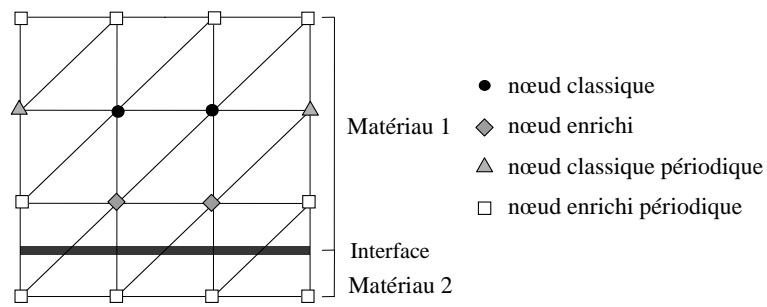


Figure 4. Maillage du bicouche périodique

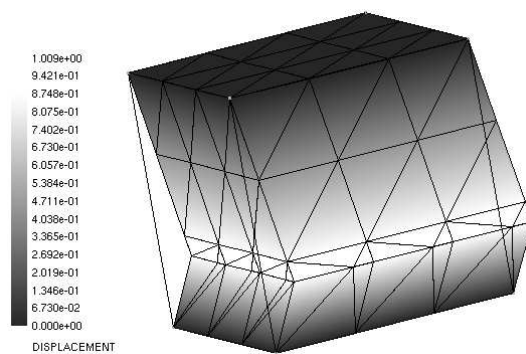


Figure 5. Déformée du bicouche périodique

6.2. Matériau à inclusions sphériques

Nous traitons à présent un matériau élastique à inclusions sphériques, réparties de façon aléatoire dans la matrice, cet exemple est tiré de [MIC 99]. Nous étudions donc plusieurs cellules, avec dans chaque cellule une répartition aléatoire (mais périodique) des inclusions.

La méthode X-FEM s'avère ici particulièrement intéressante, puisque le même maillage peut être utilisé pour ces différentes cellules. Il s'agit d'un maillage régulier, avec 32 éléments tétraèdre à 4 nœuds par côté. Avec ce maillage, pour 2 cellules contenant 32 inclusions, l'iso-zéro de la fonction de niveau (représentant l'interface matériau) est donnée figure 6.

Les caractéristiques mécaniques de la particule et de la matrice sont respectivement $E_p = 70$ GPa, $\nu_p = 0.2$ et $E_m = 3$ GPa, $\nu_m = 0.35$, avec un taux d'inclusion de 26,78%. Pour la raideur homogénéisée a_{1111}^{hom} , en prenant la valeur moyenne sur différentes cellules, on obtient 7,611 GPa pour 8 particules et 7,711 pour 32 particules, soit des résultats très proches de ceux donnés dans [MIC 99]. D'autres exemples d'homogénéisation périodique sont traités dans [MOË 03].

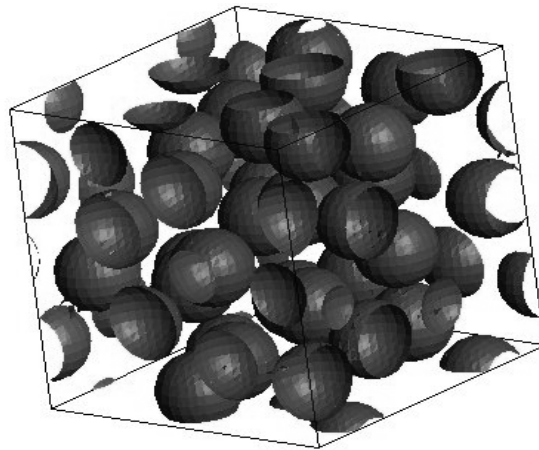


Figure 6. Iso-zéro de la fonction de niveau

6.3. Câble

Nous envisageons maintenant le cas d'un câble métallique, constitué d'une âme centrale cylindrique, entourée de 6 fils hélicoïdaux, cf. figure 7.

Sur cet exemple, on s'intéresse au comportement global en chargement axial. On ne résout pas à strictement parler un problème d'homogénéisation périodique sur ce cas. Pour simplifier, on applique un effort axial uniformément réparti dans une section extrême de la période du câble, la rotation axiale étant bloquée. L'autre section

extrême est encastree, et on a des conditions de bord libre sur le contour lateral. On calcule ensuite la deformation axiale globale a partir des deplacements moyens de ces deux sections extremes. Une etude de sensibilite effectuee par ailleurs [NAW 00] a montre que les hypotheses sur le contact ame-fils ont une influence negligeable sur le comportement global du cable en chargement axial, on supposera donc pour simplifier le contact collant, c'est-a-dire un deplacement continu a l'interface ame-fils, comme nous l'avons lors des applications precedentes.

L'ame et les fils helicoïdaux ont une section circulaire de rayon 2,675 et 2,59 mm respectivement. L'angle d'enroulement est de 8.18° , ce qui correspond a une longueur de periode de 230 mm. Enfin, on prend pour les caracteristiques de l'acier un module d'Young de 200 GPa, et un coefficient de Poisson de 0,3. Sur cet exemple, le maillage utilise correspond a un parallelepipede dont un cote a la longueur de la periode, les deux autres etant egaux, avec la section du cable comprise dans ce carre. Le maillage est realise avec des elements tetraedriques uniformement repartis sur les cotes. L'iso-zero des fonctions de niveau represente ici le contour des fils helicoïdaux et de l'ame. Les isovaleurs du deplacement axial du cable en traction, sur l'iso-zero des fonctions de niveau, sont presentees figure 8. Par ailleurs, on compare dans le tableau 1 la raideur axiale obtenue avec la methode presente, pour differents maillages, a une valeur de reference obtenue a l'aide d'une approche elements finis ou l'ame et les fils sont modelises par des poutres [NAW 00]. On verifie la convergence des resultats vers la valeur de reference.

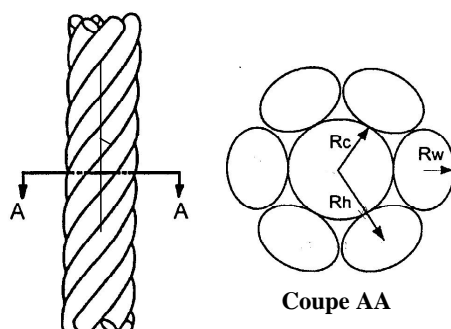


Figure 7. Géométrie du câble

Caractéristiques du calcul	4x4x58	8x8x15	10x10x230	[NAW 00]
Raideur axiale ($10^8 N$)	0.200	0.259	0.280	0.292

Tableau 1. Raideur axiale du câble

7. Conclusion

Nous proposons dans ce travail une application de la méthode X-FEM pour le traitement des problèmes cellulaires d'homogénéisation pour des microstructures de

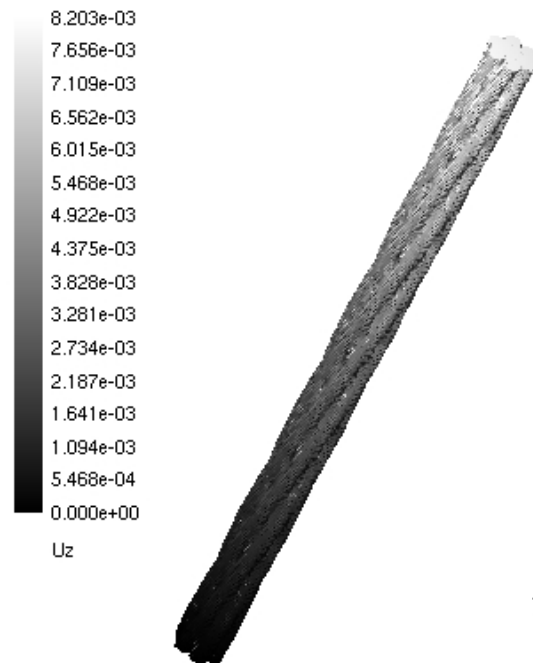


Figure 8. *Déplacements axiaux du câble en traction*

géométrie complexe. Les différents exemples traités montrent que grâce à une nouvelle fonction d'enrichissement, il est possible d'obtenir une solution d'une qualité comparable à celle d'une approche éléments finis classique, en évitant la difficulté du maillage de la cellule.

8. Bibliographie

- [BEL 03] BELYTSCHKO T., PARIMI C., MOËS N., SUKUMAR N., USUI S., « Structured extended finite element methods for solids defined by implicit surfaces », *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 56, 2003, p. 609–635.
- [BÖH 98] BÖHM H., « A Short Introduction to Basic Aspects of Continuum Micromechanics », Cdl-fmd report 3-1998, http://ilfb.tuwien.ac.at/links/mom_m.html, 1998, TU Wien, Vienna.
- [DUM 90] DUMONTET H., Homogénéisation et effets de bords dans les matériaux composites, Thèse d'Etat, Université Paris 6, 1990.
- [MEL 96] MELENK J., BABUŠKA I., « The Partition of Unity Finite Element Method : Basic theory and applications », *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.*, vol. 39, 1996, p. 289-314.
- [MIC 99] MICHEL J., MOULINEC H., SUQUET P., « Effective properties of composite materials with periodic microstructure : a computational approach », *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.*, vol. 172, n° 1-4, 1999, p. 109-143.

- [MOË 99] MOËS N., DOLBOW J., BELYTSCHKO T., « A finite element method for crack growth without remeshing », *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 46, 1999, p. 131-150.
- [MOË 00] MOËS N., Contributions au calcul des structures : Une extension de la méthode des éléments finis. Le contrôle des calculs éléments finis non linéaires, Mémoire d'Habilitation, Ecole Normale Supérieure de Cachan, 2000.
- [MOË 03] MOËS N., CLOIREC M., CARTRAUD P., REMACLE J., « A computational approach to handle complex microstructure geometries », *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.*, vol. 192, 2003, p. 3163-3177.
- [NAW 00] NAWROCKI A., LABROSSE M., « A finite element model for simple straight wire rope », *Computers and Structures*, vol. 77, 2000, p. 345-359.
- [SET 99] SETHIAN J. A., *Level Set Methods & Fast Marching Methods : Evolving Interfaces in Computational Geometry, Fluid Mechanics, Computer Vision, and Materials Science*, Cambridge University Press, Cambridge, UK, 1999.
- [SUK 01] SUKUMAR N., CHOPP D. L., MOËS N., BELYTSCHKO T., « Modeling Holes and Inclusions by Level Sets in the Extended Finite Element Method », *Comp. Meth. in Applied Mech. and Engrg.*, vol. 190, 2001, p. 6183-6200.