

Modélisations second gradient

Résumé

On présente ici les modélisations second gradient issue des travaux de Chambon et al ([bib1], [bib2], [bib3]) et second gradient de dilatation issue des travaux de Fernandes et al ([bib4], [bib5]).

Ces modélisations s'inscrivent dans le cadre des milieux à microstructure et ont comme objectif numérique de donner des résultats convergents par rapport à la finesse de la discrétisation spatiale pour éviter d'obtenir des solutions localisées. Elles doivent être utilisées dès lors que les lois rhéologiques mécaniques considérées présentent un adoucissement du comportement traduisant l'endommagement ou la dégradation d'un matériau avant fissuration.

La modélisation second gradient de dilatation est, en fait, une approche simplifiée du second gradient restreinte aux matériaux assujettis au phénomène de dilatance. L'objectif numérique est de réduire de façon significative les temps de calcul. Elle se prête particulièrement bien aux géomatériaux.

Table des matières

1 Le modèle second gradient.....	3
1.1 Présentation succincte des milieux à microstructure.....	3
1.2 Le modèle second gradient.....	4
1.3 Discrétisation spatiale par éléments finis.....	5
2 Le modèle second gradient de dilatation.....	6
2.1 Les milieux à microstructure dilatants.....	6
2.2 Le modèle second gradient de dilatation.....	6
2.3 Discrétisation spatiale par éléments finis.....	7
3 Intégration numérique des modèles second gradient	8
3.1 Les modélisations second gradients dans Code_Aster : des “patches régularisants”.....	8
3.2 La modélisation second gradient.....	9
3.2.1 Le champ de déformations.....	9
3.2.2 Le champ des contraintes.....	9
3.2.3 La matrice tangente.....	10
3.3 La modélisation second gradient de dilatation.....	10
3.3.1 Le champ de déformations.....	10
3.3.2 Le champ des contraintes.....	10
3.3.3 La matrice tangente.....	10
4 Conseils/Procédure pour l'utilisation des modèles second gradient.....	11
4.1 L'élasticité linéaire second gradient.....	11
4.2 Les noms des modélisations dans Code_Aster.....	12
4.3 Un exemple commenté.....	12
4.4 Estimation du paramètre de régularisation A1 (2nd gradient de dilatation).....	13
4.4.1 Résolution analytique.....	14
4.4.2 Résolution numérique.....	17
5 Fonctionnalité et vérifications.....	17
6 Bibliographie	17
7 Description des versions du document.....	18

1 Le modèle second gradient

1.1 Présentation succincte des milieux à microstructure

A l'origine de cette théorie, on trouve les travaux de Mindlin ([bib6], [bib7]) dans le cadre de l'élasticité linéaire. Ces travaux ont ensuite été repris par Germain ([bib8], [bib9]) qui en a donné une expression par application du principe des travaux virtuels, base des méthodes numériques en vue d'une application par éléments finis.

Cette théorie implique la définition d'une cinématique enrichie. En plus du champ classique des déplacements u_i , on considère le tenseur du second ordre, noté f_{ij} et appelé gradient cinématique microscopique, qui modélise à la fois les déformations et les rotations à l'échelle des grains de la structure. On attire ici l'attention sur le fait que, dans le cadre des milieux à microstructure, le gradient de déformation microscopique n'a aucune raison d'être lié au gradient d'un quelconque champ dépendant du déplacement macroscopique. Il n'est pas nécessairement symétrique. Le gradient de déformation microscopique f_{ij} est une variable au même titre que le déplacement macroscopique u_i , contrairement au champ de déformation classique (macroscopique), qui lui est obtenu par dérivation

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$$

Un fait essentiel à la base de l'écriture de cette théorie porte sur l'énoncé du principe d'objectivité ou également d'indifférence matérielle :

La puissance virtuelle des efforts intérieurs à un système est nulle dans tout mouvement virtuel rigidifiant le système à l'instant considéré.

En négligeant l'expression des efforts extérieurs de volume pour des raisons de simplification d'écriture, la conséquence de l'axiome des puissances virtuelles des efforts intérieurs conduit à l'expression de la formulation variationnelle, pour tout champ cinématiquement admissible (u_i^*, f_{ij}^*)

$$\int_{\Omega} \left(\sigma_{ij} \frac{\partial u_i^*}{\partial x_j} + \tau_{ij} \left(f_{ij}^* - \frac{\partial u_i^*}{\partial x_j} \right) + \Sigma_{ijk} \frac{\partial f_{ij}^*}{\partial x_k} \right) dv = \int_{\partial\Omega} (t_i u_i^* + T_{ij} f_{ij}^*) ds \quad (1)$$

où t_i et T_{ij} sont respectivement les forces de traction et les doubles forces correspondant aux conditions aux limites, sur la frontière $\partial\Omega$, conjuguées des variables cinématiques.

La formulation variationnelle (1) est un autre moyen d'exprimer les relations d'équilibre qui s'expriment

$$\frac{\partial (\sigma_{ij} - \tau_{ij})}{\partial x_j} = 0 \quad (2)$$

$$\frac{\partial \Sigma_{ijk}}{\partial x_k} - \tau_{ij} = 0 \quad (3)$$

et on trouve pour l'expression des conditions aux limites

$$t_i = (\sigma_{ij} - \tau_{ij}) n_j \quad (4)$$

$$T_{ij} = \Sigma_{ijk} n_k \quad (5)$$

où n_j désigne la normale sortante à la frontière $\partial\Omega$.

Pour compléter le problème, il faut définir les lois de comportement qui vont lier les variables statiques σ_{ij} , τ_{ij} , Σ_{ijk} respectivement à l'histoire des variables cinématiques de $\frac{\partial u_i}{\partial x_j}$,

$$\left(f_{ij} - \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \text{ et } \frac{\partial f_{ij}}{\partial x_k}.$$

Ces modèles ont déjà prouvé qu'ils étaient efficaces du point de vue de la régularisation. Cependant, ils sont complexes dans leur utilisation à cause des différentes lois de comportement à spécifier. De plus, la discrétisation par la méthode des éléments finis en 3D induit l'ajout de 9 degrés de liberté supplémentaires par nœud correspondant aux composantes f_{ij} . Les temps de calcul sont alors relativement importants et par conséquent non-compatibles avec le type d'études que nous souhaitons réaliser.

1.2 Le modèle second gradient

En partant du modèle précédent, exprimé par la relation (1), on peut restreindre la cinématique en forçant le gradient microscopique à être égal au gradient macroscopique (voir Chambon et al [bib2] pour une analyse détaillée)

$$f_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \quad (6)$$

L'avantage de cette hypothèse est de réduire le nombre de variables indépendantes et d'introduire des lois de comportement plus simples. L'expression des puissances virtuelles remaniée après quelques manipulations algébriques s'écrit alors pour tout champ cinématiquement admissible u_i^*

$$\int_{\Omega} \left(\sigma_{ij} \frac{\partial u_i^*}{\partial x_j} + \Sigma_{ijk} \frac{\partial^2 u_i^*}{\partial x_j \partial x_k} \right) dv = \int_{\partial\Omega} \left(p_i u_i^* + P_i D u_i^* \right) ds \quad (7)$$

où p_i et P_i sont les conditions aux limites définies par

$$p_i = \sigma_{ij} n_j - n_k n_j D \Sigma_{ijk} - \frac{D \Sigma_{ijk}}{D x_k} n_j - \frac{D \Sigma_{ijk}}{D x_j} n_k + \frac{D n_l}{D x_l} \Sigma_{ijk} n_j n_k - \frac{D n_j}{D x_k} \Sigma_{ijk} \quad (8)$$

$$P_i = \Sigma_{ijk} n_j n_k \quad (9)$$

avec

$$Dq \text{ qui désigne la dérivée normale de la variable } q : Dq = \frac{\partial q}{\partial x_j} n_j$$

$$\frac{Dq}{D x_j} \text{ qui désigne la dérivée tangentielle de la variable } q : \frac{Dq}{D x_j} = \frac{\partial q}{\partial x_j} - n_j Dq$$

L'hypothèse sur l'égalité entre champ de déformations microscopique et macroscopique (6) a un impact direct sur l'expression des conditions aux limites car les variables u_i^* et f_{ij}^* ne sont plus indépendantes.

Il a déjà été montré que ce modèle corrige la dépendance de l'épaisseur des bandes de localisation par rapport à la discrétisation du maillage (voir Chambon et al [bib1] ou Matsushima et al [bib3]). Pour cela, le modèle peut être utilisé en prenant en compte deux lois de comportement différentes, l'une pour décrire la partie premier gradient classique et l'autre pour le second gradient. En ce qui concerne cette dernière, n'importe quelle relation pourrait-être considérée, mais jusqu'à aujourd'hui, c'est en général de l'élasticité linéaire qui a été choisie.

1.3 Discrétisation spatiale par éléments finis

Écrite sous sa forme de l'équation 7, la discrétisation par la méthode des éléments finis de l'expression du second gradient suppose que les champs u_i et u_i^* sont deux fois dérivables. La mise en œuvre numérique d'une telle condition implique l'intégration d'éléments finis C1-continus (comme cela a été proposé par Chambon et al [bib1] dans le cadre de cette formulation second gradient unidimensionnelle ou encore Zervos et al [bib10] dans une approche similaire en gradient de déformation).

Une seconde approche consiste à introduire une formulation mixte par le biais de multiplicateurs de Lagrange. Cela consiste à affaiblir la contrainte mathématique (6) dans l'écriture de la formulation variationnelle (7). On obtient alors pour tout champ cinématiquement admissible $(u_i^*, f_{ij}^*, \lambda_{ij}^*)$

$$\int_{\Omega} \left(\sigma_{ij} \frac{\partial u_i^*}{\partial x_j} + \Sigma_{ijk} \frac{\partial f_{ij}^*}{\partial x_k} + \lambda_{ij} \left(f_{ij}^* - \frac{\partial u_i^*}{\partial x_j} \right) - \lambda_{ij}^* \left(f_{ij} - \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \right) dv = \int_{\partial \Omega} (t_i u_i^* + T_{ij} f_{ij}^*) ds \quad (10)$$

où λ_{ij} sont les multiplicateurs de Lagrange. L'avantage de cette nouvelle expression vient du fait que les interpolations des inconnues nodales, que sont $(u_i, f_{ij}, \lambda_{ij})$, ne nécessitent que des conditions de C0-continuité. L'inconvénient est dû, en revanche, à l'ajout de nouveaux degrés de liberté qui ne permet pas de faire diminuer le nombre d'inconnues du problème.

La mise en œuvre numérique proposée dans Code_Aster est détaillée au chapitre 3. On précise ici uniquement les espaces d'approximation des variables définissant le champ cinématique. Les interpolations polynômiales sont les suivantes :

- 1) des fonctions de formes du second ordre pour les variables de déplacements u_i ,
- 2) des fonctions de formes du premier ordre pour le tenseur des déformations microscopique f_{ij}
- 3) des fonctions constantes par élément pour les multiplicateurs de Lagrange λ_{ij} .

On parle d'une formulation second gradient P2-P1-P0. La modélisation est actuellement disponible dans Code_Aster uniquement sous l'hypothèse des déformations planes. On donne en figure 1.3-a une représentation de l'élément fini associé à cette combinaison d'interpolations.

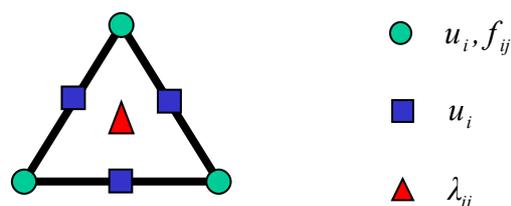


Figure 1.3-a : Discrétisation élément fini du modèle second gradient pour les déformations planes

2 Le modèle second gradient de dilatation

Le principe des milieux à microstructure est basé sur la prise en compte des déformations microscopiques pour introduire dans l'expression du modèle une longueur interne. Si l'efficacité de la régularisation apportée par le modèle second gradient ne fait aucun doute, les temps de calcul des simulations peuvent devenir prohibitifs. Pour les diminuer dans le cadre particulier des matériaux dilatants (pour lesquels la déformation volumique évolue en fonction du chargement) on restreint la généralité de l'effet régularisant aux milieux à microstructure dilatants.

2.1 Les milieux à microstructure dilatants

La cinématique de ces milieux est définie par le champ de déplacement habituel u_i , la variation volumique microscopique notée χ et ses gradients. Par dualité à cette cinématique enrichie, sont introduites les variables statiques des contraintes macroscopiques classiques σ_{ij} , la contrainte microscopique de dilatation κ et les doubles contraintes vectorielles de dilatation S_j . La variable κ est la composante conjuguée de la déformation volumique relative (du champ macroscopique par rapport au microscopique) $\varepsilon_V - \chi$, tandis que les composantes S_j définissent un vecteur qui est le conjugué du gradient de la dilatation microscopique $\frac{\partial \chi}{\partial x_j}$.

De façon analogue à l'expression de la puissance virtuelle des milieux à microstructure du chapitre 1.1, et en négligeant de nouveau l'expression des efforts extérieurs de volume pour simplification analytique, on trouve pour les milieux à microstructure dilatants, pour tout champ cinématiquement admissible (u_i^*, χ^*)

$$\int_{\Omega} \left(\sigma_{ij} \frac{\partial u_i^*}{\partial x_j} + \kappa (\varepsilon_V^* - \chi^*) + S_j \frac{\partial \chi^*}{\partial x_j} \right) dv = \int_{\partial \Omega} (t_i u_i^* + m \chi^*) ds \quad (11)$$

Pour laquelle

$$t_i = (\sigma_{ij} + \kappa \delta_{ij}) n_j \quad (12)$$

$$m = S_j n_j \quad (13)$$

sont les conditions aux limites, exprimées sur la frontière $\partial \Omega$, conjuguées par dualité aux variables cinématiques u_i et χ respectivement.

Les relations d'équilibre de ce problème s'écrivent

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + \frac{\partial \kappa}{\partial x_i} = 0 \quad (14)$$

$$\kappa + \frac{\partial S_j}{\partial x_j} = 0 \quad (15)$$

Le système d'équations composé de [(12), (13), (14) et (15)] est obtenu classiquement par application du théorème de la divergence et par une intégration par partie de (11).

2.2 Le modèle second gradient de dilatation

Suivant un principe analogue à celui mis en oeuvre pour le modèle second gradient du chapitre 1.2 , on introduit une contrainte mathématique pour forcer l'égalité entre les déformations volumiques macroscopique ε_V et microscopique χ

$$\chi = \varepsilon_V \quad (16)$$

L'expression des puissances virtuelles est alors la suivante, pour tout champ cinématiquement admissible u_i^*

$$\int_{\Omega} \left(\sigma_{ij} \frac{\partial u_i^*}{\partial x_j} + S_j \frac{\partial^2 u_i^*}{\partial x_i \partial x_j} \right) dv = \int_{\partial\Omega} \left(p_i u_i^* + P n_i D u_i^* \right) ds \quad (17)$$

où p_i et P sont les conditions aux limites définies par

$$p_i = \sigma_{ij} n_j - n_i n_j DS_j - \frac{DS_j}{Dx_j} n_i - \frac{DS_j n_j}{Dx_i} + \frac{Dn_p}{Dx_p} S_j n_j n_i \quad (18)$$

$$P = S_j n_j \quad (19)$$

Comme pour le modèle second gradient, l'hypothèse sur l'égalité entre champ de déformations volumiques microscopique et macroscopique (16) a un impact direct sur l'expression des conditions aux limites car les variables u_i^* et χ^* ne sont plus indépendantes.

Pour des raisons de simplicité, on suppose que $P=0$. La conséquence de cette hypothèse est que $S_j n_j = 0$ sur la frontière, ce qui réduit l'expression (18) à

$$p_i = \sigma_{ij} n_j - \frac{\partial S_j}{\partial x_j} n_i \quad (20)$$

Une propriété remarquable de cette simplification vient du fait qu'elle l'expression des conditions aux limites se décompose alors en la partie classique $\sigma_{ij} n_j$ et un second terme qui n'induit pas de composantes de cisaillement.

L'équation d'équilibre s'écrit

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial^2 S_j}{\partial x_i \partial x_j} = 0 \quad (21)$$

2.3 Discrétisation spatiale par éléments finis

Le but de la démarche du second gradient de dilatation est de définir un modèle régularisant, permettant d'assurer l'indépendance des résultats par rapport aux discrétisations spatiales, en introduisant un minimum d'inconnues nodales dans son approche par éléments finis. Pour cela on se limite aux applications considérant des matériaux dilatants. Or, discrétiser par la méthode des éléments finis l'expression (17) a comme conséquence d'imposer que le champ des inconnues de déplacement ainsi que sa divergence soient continus et dérivables. Cela revient à prendre en compte des éléments finis C1-continus.

On propose alors d'introduire la contrainte mathématique (16) dans l'expression des milieux à microstructure dilatants au moyen d'un couplage de multiplicateurs de Lagrange et de pénalisation. On obtient alors pour tout champ cinématiquement admissible $(u_i^*, \chi^*, \lambda^*)$

$$\int_{\Omega} \left(\sigma_{ij} \frac{\partial u_i^*}{\partial x_j} + S_j \frac{\partial \chi^*}{\partial x_j} - \lambda (\varepsilon_V^* - \chi^*) + \lambda^* (\varepsilon_V - \chi) + r (\varepsilon_V - \chi) (\varepsilon_V^* - \chi^*) \right) dv \quad (22)$$

$$= \int_{\partial\Omega} (p_i u_i^* + P n_i D u_i^*) ds$$

La mise en œuvre numérique proposée dans Code_Aster est détaillée au chapitre 3 . On précise ici uniquement les espaces d'approximation des variables définissant le champ cinématique. Les interpolations polynômiales sont les suivantes :

Une modélisation P2-P1-P0 en déformations planes

- 1) des fonctions de formes du second ordre pour les variables de déplacements u_i
- 2) des fonctions de formes du premier ordre pour le tenseur des déformations volumiques microscopique χ
- 3) des fonctions constantes par élément pour les multiplicateurs de Lagrange λ .

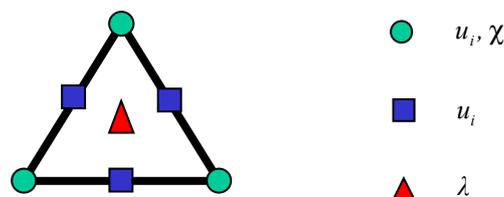


Figure 2.3-a : Discrétisation élément fini du modèle second gradient de dilatation pour les déformations planes

Une modélisation P2-P1-P1 en 3D

- 1) des fonctions de formes du second ordre pour les variables de déplacements u_i
- 2) des fonctions de formes du premier ordre pour le tenseur des déformations volumiques microscopique χ et pour les multiplicateurs de Lagrange λ .

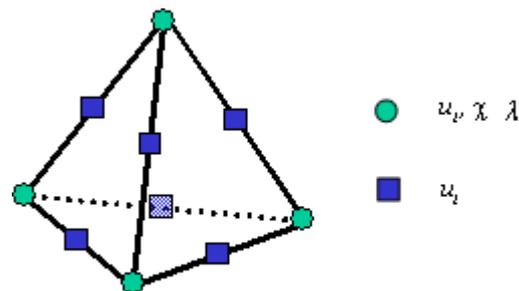


Figure 2.3-b : Discrétisation élément fini du modèle second gradient de dilatation pour le 3D.

3 Intégration numérique des modèles second gradient

3.1 Les modélisations second gradients dans Code_Aster : des “patches régularisants”

Les modélisations éléments finis mises en œuvre dans le cadre des chapitres 1 (second gradient) et 2 (second gradient de dilatation) suivent un protocole atypique par rapport aux procédures existantes dans Code_Aster. Le but est de définir les modèles seconds gradients comme des “patches régularisants” pour simplifier à la fois le développement informatique et généraliser la validité de la

méthode à l'ensemble des lois de comportements existantes dans Code_Aster. On interprète ces deux points dans la suite de ce chapitre.

Le principe - identique pour les deux modélisations - consiste donc à partitionner numériquement les formulations variationnelles respectives (second gradient et second gradient de dilatation) en une partie classique dite "locale" et une partie "régularisante" de la façon suivante (dans le cas du second gradient de dilatation)

$$\int_{\Omega} \left(\sigma_{ij} \frac{\partial u_i^*}{\partial x_j} \right) dv + \int_{\Omega} \left(S_j \frac{\partial \chi^*}{\partial x_j} - \lambda (\varepsilon_V^* - \chi^*) + \lambda^* (\varepsilon_V - \chi) + r (\varepsilon_V - \chi) (\varepsilon_V^* - \chi^*) \right) dv \quad (23)$$

$$= \int_{\partial\Omega} \left(p_i u_i^* + P n_i D u_i^* \right) ds$$

Le calcul du terme régularisant est indépendant de la partie locale sous condition que les lois de comportements introduites pour définir les variables statiques du premier ordre σ_{ij} et du second ordre S_j soient indépendantes. Cette hypothèse restrictive est donc actuellement obligatoire et est le principal inconvénient de cette stratégie de conception.

En revanche, l'intérêt vient du fait que le "patch régularisant" à introduire est indépendant de la partie locale. Il suffit donc de l'appliquer sur n'importe quel type de modélisation (mécanique, couplée hydro-mécanique, thermo-hydro-mécanique...). De plus, numériquement il n'y a aucun impact informatique sur la partie régularisante suite à l'intégration de nouvelles lois de comportements premier gradient.

3.2 La modélisation second gradient

En suivant donc le principe énoncé au chapitre 3.1, le "patch régularisant" représentatif de l'élément fini second gradient décrit au chapitre 1.3 se traduit par l'intégration numérique de la formulation suivante

$$\int_{\Omega} \left(\Sigma_{ijk} \frac{\partial f_{ij}^*}{\partial x_k} - \lambda_{ij} \left(\frac{\partial u_i^*}{\partial x_j} - f_{ij}^* \right) + \lambda_{ij}^* \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} - f_{ij} \right) \right) dv \quad (24)$$

On détaille ci-dessous les champs de déformations, de contraintes associés et la matrice tangente. Il n'y a aucune variable interne dans la description de cet élément fini. Pour rappel les variables nodales définissant les degrés de liberté sont les suivantes : $(u_i, f_{ij}, \lambda_{ij})$.

3.2.1 Le champ de déformations

$$E = \begin{pmatrix} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} - f_{ij} \right) \\ \frac{\partial f_{ij}}{\partial x_k} \\ \lambda_{ij} \end{pmatrix}$$

3.2.2 Le champ des contraintes

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \lambda_{ij} \\ \Sigma_{ijk} \\ -\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} - f_{ij}\right) \end{pmatrix}$$

3.2.3 La matrice tangente

La matrice tangente élémentaire de la modélisation second gradient est composée, entre autres, de la matrice tangente de rigidité élémentaire T^{2g} associée à la loi de comportement second gradient qui lie les doubles contraintes Σ_{ijk} aux gradients des déformations microscopiques $\frac{\partial f_{ij}}{\partial x_k}$.

$$K^{el} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & (\mathbf{Id})_{\dim(ij)} \\ 0 & (T^{2g})_{\dim(ijk)} & 0 \\ (-\mathbf{Id})_{\dim(ij)} & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

3.3 La modélisation second gradient de dilatation

En suivant à nouveau le principe énoncé au chapitre 3.1, le "patch régularisant" représentatif de l'élément fini second gradient de dilatation décrit au chapitre 2.3 se traduit par l'intégration numérique de la formulation

$$\int_{\Omega} \left(S_j \frac{\partial \chi^*}{\partial x_j} - \lambda (\varepsilon_V^* - \chi^*) + \lambda^* (\varepsilon_V - \chi) + r (\varepsilon_V - \chi) (\varepsilon_V^* - \chi^*) \right) dv \quad (25)$$

On détaille ci-dessous les champs de déformations, de contraintes associés et la matrice tangente. Il n'y a aucune variable interne dans la description de cet élément fini. Pour rappel les variables nodales définissant les degrés de liberté sont les suivantes : (u_i, χ, λ) .

3.3.1 Le champ de déformations

$$E = \begin{pmatrix} (\varepsilon_V - \chi) \\ \frac{\partial \chi}{\partial x_j} \\ \lambda \end{pmatrix}$$

3.3.2 Le champ des contraintes

$$\Sigma = \begin{pmatrix} r(\varepsilon_V - \chi) + \lambda \\ S_j \\ -(\varepsilon_V - \chi) \end{pmatrix}$$

3.3.3 La matrice tangente

La matrice tangente élémentaire de la modélisation second gradient est composée, entre autres, de la matrice tangente de rigidité élémentaire S^{2d} associée à la loi de comportement second gradient de

dilatation qui lie les doubles contraintes S_j aux gradients des déformations volumiques microscopiques $\frac{\partial \chi}{\partial x_j}$.

$$K^{el} = \begin{pmatrix} r & 0 & 1 \\ 0 & (S^{2d})_{\dim(j)} & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

4 Conseils/Procédure pour l'utilisation des modèles second gradient

Quelques manipulations simples sont à définir dans le fichier de commande Code_Aster pour utiliser les modélisations second gradients. La démarche est en revanche la même quelle que soit la modélisation locale. Des exemples sont disponibles dans la base des cas-tests de validation de Code_Aster. On peut citer, entre autres, les essais biaxiaux en élasticité linéaire en compression référencés ssl117, la construction d'une colonne de sol en non-linéaire (loi de comportement Hujeux en milieu poreux couplé hydromécanique) référencée wtnv132 ou l'essai triaxial en élasticité linéaire référencé sslv117.

4.1 L'élasticité linéaire second gradient

Pour utiliser les modélisations second gradients il faut définir deux lois de comportements pour décrire respectivement les relations macroscopiques entre contraintes σ_{ij} et déformations ε_{ij} et les relations microscopiques entre doubles contraintes (Σ_{ijk} pour le second gradient ou S_j pour le second gradient de dilatation) et gradient de déformations $\frac{\partial f_{ij}}{\partial x_k}$ pour le second gradient ou gradient de déformation volumique $\frac{\partial \chi}{\partial x_j}$ pour le second gradient de dilatation.

Pour le choix du comportement de type premier gradient – celui qui intervient dans la modélisation locale décrite en section 3.1 – il n'y a aucune restriction : toutes les lois de comportements sont possibles. En revanche, on dispose actuellement d'une seule relation de comportement de type second gradient. Il s'agit de l'élasticité linéaire proposée par Mindlin ([bib6], [bib7]) dont voici l'écriture en 2D

$$\begin{bmatrix} \Sigma_{111} \\ \Sigma_{112} \\ \Sigma_{121} \\ \Sigma_{122} \\ \Sigma_{211} \\ \Sigma_{212} \\ \Sigma_{221} \\ \Sigma_{222} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a^{12345} & 0 & 0 & a^{23} & 0 & a^{12} & a^{12} & 0 \\ 0 & a^{145} & a^{145} & 0 & a^{25} & 0 & 0 & a^{12} \\ 0 & a^{145} & a^{145} & 0 & a^{25} & 0 & 0 & a^{12} \\ a^{23} & 0 & 0 & a^{34} & 0 & a^{25} & a^{25} & 0 \\ 0 & a^{25} & a^{24} & 0 & a^{34} & 0 & 0 & a^{23} \\ a^{12} & 0 & 0 & a^{25} & 0 & a^{145} & a^{145} & 0 \\ a^{12} & 0 & 0 & a^{25} & 0 & a^{145} & a^{145} & 0 \\ 0 & a^{12} & a^{12} & 0 & a^{23} & 0 & 0 & a^{12345} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \chi_{111} \\ \chi_{112} \\ \chi_{121} \\ \chi_{122} \\ \chi_{211} \\ \chi_{212} \\ \chi_{221} \\ \chi_{222} \end{bmatrix} \quad (26)$$

où $\chi_{ijk} = \frac{\partial f_{ij}}{\partial x_k}$ et tous les termes de la matrice dépendent de cinq constantes selon la relation suivante

$$\left\{ \begin{array}{l} a^{12345} = 2(a^1 + a^2 + a^3 + a^4 + a^5) \\ a^{23} = a^2 + 2a^3 \\ a^{12} = a^1 + \frac{a^2}{2} \\ a^{145} = \frac{a^1}{2} + a^4 + \frac{a^5}{2} \\ a^{25} = \frac{a^2}{2} + a^5 \\ a^{34} = 2(a^3 + a^4) \end{array} \right.$$

Fernandes et al [bib5] ont appliqué ce modèle pour le second gradient de dilatation en simplifiant l'expression (26) en 2D par

$$\begin{bmatrix} S_1 \\ S_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3a^1 & 0 \\ 0 & 3a^1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \frac{\partial \chi}{\partial x_1} \\ \frac{\partial \chi}{\partial x_2} \end{bmatrix} \quad (27)$$

4.2 Les noms des modélisations dans Code_Aster

L'hypothèse des déformations planes est actuellement possible pour les modélisations second gradients dans Code_Aster. Pour le second gradient le nom de la modélisation est D_PLAN_2DG tandis que pour le second gradient de dilatation le nom de la modélisation est D_PLAN_DIL.

Les mailles acceptées sont des QUAD9 et des TRIA7 pour les deux modélisations P2-P1-P0 second gradients. Pour le second gradient de dilatation il est également possible d'utiliser des mailles QUAD8 et TRIA6 auquel cas la modélisation est alors définie sans multiplicateurs de Lagrange et la contrainte mathématique (16)) est uniquement assurée par la pénalisation.

Pour les applications 3D, le nom de la modélisation est 3D_DIL pour le second gradient de dilatation. Les mailles acceptés sont des TETRA10, des PENTA15 ou des HEXA20 pour les interpolations P2-P1-P1..

4.3 Un exemple commenté

Voici un exemple de fichier de commande au format Code_Aster. Les commentaires introduits par le caractère `*$*` sont propres aux "patches régularisants" introduits par les modélisations second gradients.

lecture du maillage (quadratique)

```
MA = LIRE_MAILLAGE()
```

`*$*` Duplication du maillage (quadratique). Seules les mailles sont dupliquées, les nœuds restent communs. Le but est d'associer à chacun de ces maillages une modélisation différente uniquement sur la partie structure. Pour ce qui est de l'application des conditions aux limites on ne duplique pas les mailles, c'est directement l'expression (20) qui sera appliquée.

```
MAIL=CREA_MAILLAGE(MAILLAGE=MA,
                   CREA_GROUP_MA=( _F(NOM='ROCHE_REG',
                                       GROUP_MA='ROCHE') ) )
```

\$ Introduction de nœuds centraux aux éléments finis du nouveau maillage pour une interpolation P2-P1-P0. Procédure nécessaire pour prendre en compte les interpolations des multiplicateurs de Lagrange.

```
MAILLAGE=CREA_MAILLAGE (MAILLAGE=MAIL,  
                        MODI_MAILLE=( _F (GROUP_MA = 'ROCHE_REG',  
                                         OPTION = 'QUAD8_9'),  
                                         _F (GROUP_MA = 'ROCHE_REG',  
                                               OPTION = 'TRIA6_7'))))
```

\$ Affectation d'une modélisation à chacun des maillages.

```
MODELE=AFPE_MODELE (MAILLAGE = MAILLAGE,  
                   AFPE = ( _F (GROUP_MA = 'ROCHE',  
                                PHENOMENE = 'MECANIQUE',  
                                MODELISATION = 'D_PLAN'),  
                             _F (GROUP_MA = 'ROCHE_REG',  
                                PHENOMENE = 'MECANIQUE',  
                                MODELISATION = 'D_PLAN_DIL'))))
```

Prise en compte des conditions aux limites :

\$ Attention l'expression des conditions aux limites avec prise en compte des modélisations second gradients diffère de celle des modélisations locales (voir chapitre 1).

```
CHCI=AFPE_CHAR_MECA (MODELE=MODELE,  
                    DDL_IMPO=(...),...)
```

Définition des paramètres matériaux pour la loi de comportement premier gradient

```
SOL1 = DEFI_MATERIAU ( ... )
```

\$ Définition des paramètres matériaux pour la loi de comportement second gradient. Actuellement n'a été introduit que l'élasticité linéaire second gradient proposée par Mindlin.

```
SOL2 = DEFI_MATERIAU (ELAS_2NDG = _F (A1=10,A2=0,A3=0,A4=0,A5=0), ...)
```

\$ Affectation des paramètres matériaux suivant la même procédure que pour la définition des modélisations.

```
MATE = AFPE_MATERIAU (MAILLAGE = MAILLAGE,  
                     AFPE = ( _F (TOUT = 'ROCHE',  
                                   MATER = SOL1),  
                               _F (GROUP_MA = 'ROCHE_REG',  
                                   MATER = SOL2))
```

\$ Définition du calcul statique non linéaire avec une loi de comportement associé à chacune des modélisation : comportement de type Drucker-Prager pour le premier gradient, et élasticité linéaire pour le second gradient

```
U1 = STAT_NON_LINE (MODELE = MODELE,  
                   CHAM_MATER = MATE,  
                   EXCIT = ( _F (CHARGE = CHCI), ... ),  
                   SOLVEUR = ( _F (METHODE='MUMPS'), ),  
                   COMP_INCR = ( _F (GROUP_MA='ROCHE',  
                                     RELATION='DRUCK_PRAGER'),  
                                 _F (GROUP_MA='ROCHE_REG',  
                                     RELATION='ELAS'), ), ),  
                   NEWTON = _F ( MATRICE = 'TANGENTE', REAC_ITER = 1 ),  
                   INCREMENT = _F (LIST_INST = TEMPS )
```

4.4 Estimation du paramètre de régularisation A_1 (2nd gradient de dilatation)

Dans le but de caractériser au mieux la valeur à affecter au paramètre de régularisation, A_1 , du 2nd gradient de dilatation, il est possible de déterminer une borne supérieure à ce paramètre en fonction de la matrice tangente en vitesse de tout modèle de comportement adoucissant. De cette façon, l'utilisateur pourra déterminer en fonction de la taille des mailles du problème qu'il traite la valeur du paramètre A_1 la mieux adaptée à son problème.

Ce calcul est basé sur un problème analytique 2D d'une bande de cisaillement [bib2 et bib11].

La rupture dans les géomatériaux se caractérise souvent par la formation de zones à déformations localisées, relatant un passage de zones de déformations homogènes vers des modes de déformations non homogènes. L'apparition de ce phénomène peut être vu sur le plan théorique comme le changement spontané du mode de déformation, assimilé à une bifurcation d'une branche de l'équilibre, c'est à dire l'intersection de deux branches de solutions fonctions des paramètres de contrôle. Dans le cadre des milieux continus, il est possible de dégager sous des conditions restreintes des critères de bifurcation permettant d'identifier le paramètre de contrôle provoquant l'apparition de la bande de cisaillement, ainsi que les orientations potentielles de celle-ci. En revanche, pour les milieux continus classiques, le régime de « post-localisation », notamment la largeur de la bande de cisaillement, ne peut pas être caractérisée. Les résultats expérimentaux montrent néanmoins que cette largeur est un élément intrinsèque aux propriétés du matériau, lié à sa microstructure (forme et taille des grains, Desrues et Viggiani [bib12]) et son état initial (indice des vides et état de contraintes). L'utilisation de la théorie du second gradient local de dilatation permet d'enrichir la cinématique du milieu traduisant ainsi les effets de la microstructure à l'échelle globale. Dans cette section, nous allons extraire d'un problème analytique bidimensionnel les éléments permettant de caractériser la largeur de la bande de cisaillement durant le régime de « post-localisation ».

La formulation du problème en vitesse s'écrit alors sous la forme suivante, en considérant les forces de volume constantes :

$$\int_{\Omega} \dot{\sigma}_{ij} \dot{\epsilon}_{ij}(u^*) + \dot{S}_j \eta_j(u^*) dv = \int_{\partial\Omega} \dot{F}_i u_i^* ds \quad \forall u^* \in \mathcal{V}_0 \quad (28)$$

$\dot{\sigma}_{ij}$, \dot{S}_j et \dot{F}_i sont les dérivées temporelles des termes introduits dans l'équation 17 .

4.4.1 Résolution analytique

Le problème analytique bidimensionnel abordé ci-dessous a été résolu par [bib2] pour un modèle de second gradient complet avec le modèle local élastoplastique de Mohr-Coulomb décrit par [bib13]. L'exemple consiste à appliquer le modèle de second gradient de dilatation dans une couche cisailée et à déterminer les solutions du problème en vitesse.

On considère une couche définie dans le plan (x, y) avec z l'axe perpendiculaire au plan. Chambon et al. [bib2] considèrent une couche infinie comprise entre deux plans définis par $x=0$ et $x=l$ (Figure 4.4-a). Les champs de déplacement sont notés u dans la direction x et v dans la direction y . \dot{u} et \dot{v} sont supposés ne dépendre que de x et leurs dérivées par rapport à x seront notées \dot{u}' .

L'état initial du matériau est défini homogène. Les évolutions des conditions aux limites appliquées au domaine sont les suivantes :

- pour $x=0$, $\dot{u}=0$, $\dot{v}=0$
- pour $x=l$, \dot{F}_i sont connues.

Les forces de volume sont supposées constantes.

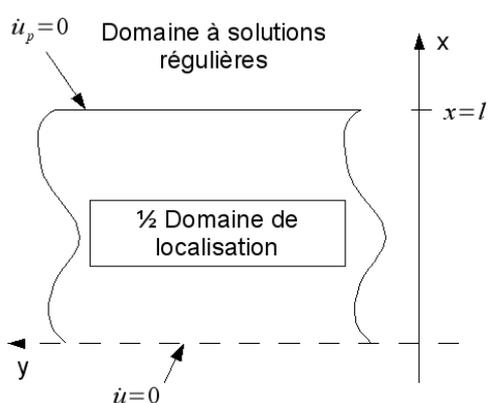


Figure 4.4-a : Domaine étudié

Les conditions de symétrie appliquées à la frontière $x=0$ indiquent que le domaine étudié a une largeur totale de $2l$.

Ce problème peut être vu comme l'analyse du comportement d'une bande de localisation, où l'orientation de la bande est supposée et l'état de contraintes est laissé libre de toute restriction. La frontière du domaine en $x=l$ définit la zone de transition entre la zone de localisation (domaine étudié) et le domaine d'un solide quelconque où les solutions sont supposées régulières et stables.

Le gradient du champ de déplacement dans le domaine prend la forme suivante :

$$\dot{u}_{i,j} = \begin{bmatrix} \dot{u}' & 0 \\ \dot{v}' & 0 \end{bmatrix} \quad (29)$$

Le champ de déformation macroscopique s'écrit explicitement :

$$\dot{\epsilon}_{ij} = \frac{1}{2}(\dot{u}_{i,j} + \dot{u}_{j,i}) = \begin{bmatrix} \dot{u}' & \frac{1}{2}\dot{v}' \\ \frac{1}{2}\dot{v}' & 0 \end{bmatrix} \quad (30)$$

Le seul terme non nul du gradient des déformations volumiques est :

$$\frac{\partial \dot{\epsilon}_v}{\partial x_1} = \dot{u}'' \quad (31)$$

L'application du principe des travaux virtuels au champ de déplacement imposé après 2 intégrations par parties donne les équations d'équilibre suivantes pour le problème en vitesse :

$$\frac{\partial \dot{\sigma}_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial^2 \dot{S}_j}{\partial x_i \partial x_j} = 0 \Rightarrow \begin{cases} \dot{\sigma}'_{11} - \dot{S}'_1 = 0 \\ \dot{\sigma}'_{12} = 0 \end{cases} \quad (32)$$

Les conditions aux limites fournissent en $x=l$:

$$\begin{cases} \dot{\sigma}'_{11} - \dot{S}'_1 = \dot{F}_1 \\ \dot{\sigma}'_{12} = \dot{F}_2 \\ 3a^1 \dot{u}''' = 0 \end{cases} \quad (33)$$

Après intégration spatiale des équations d'équilibre en tenant compte des conditions aux limites pour un problème homogène, les solutions du problème respectent les équations suivantes :

$$\begin{cases} \dot{\sigma}'_{11} - \dot{S}'_1 = \dot{F}_1 \\ \dot{\sigma}'_{12} = \dot{F}_2 \end{cases} \quad (34)$$

En utilisant les lois constitutives des premier et second gradients, les équations deviennent :

$$\begin{cases} H_{1111} \dot{u}' + H_{1112} \dot{v}' - 3a^1 \dot{u}''' = \dot{F}_1 \\ H_{1211} \dot{u}' + H_{1212} \dot{v}' = \dot{F}_2 \end{cases} \quad (35)$$

Le système d'équations différentielles couplées peut se réduire à une équation, la seconde équation exprimant une relation linéaire entre les premiers gradients des déplacements verticaux et horizontaux dans la bande.

$$\begin{cases} H_{1111} \dot{u}' + H_{1112} \frac{\dot{F}_2 - H_{1211} \dot{u}'}{H_{1212}} - 3a^1 \dot{u}''' = \dot{F}_1 \\ \frac{\dot{F}_2 - H_{1211} \dot{u}'}{H_{1212}} = \dot{v}' \end{cases} \quad (36)$$

Les solutions de ce système d'équations différentielles linéaires d'ordre 2 s'expriment comme la somme d'une solution particulière répondant aux conditions aux limites imposées et d'une solution partielle établie à partir des racines du polynôme caractéristique de ce système : $\dot{u}' = \dot{u}'_0 + \dot{u}'_p$

On suppose pour \dot{u}'_p une solution du type $\dot{u}'_p = e^{\eta x}$ qui permet d'établir l'équation caractéristique suivante :

$$H_{1111} - H_{1112} \frac{H_{1211}}{H_{1212}} - 3a^1 \eta^2 = 0 \quad (37)$$

On peut alors donner l'expression de la solution partielle en fonction des paramètres matériau du premier et second gradient :

$$\text{soit } \eta^2 = \frac{H_{1111} H_{1212} - H_{1112} H_{1211}}{3a^1 H_{1212}} \quad (38)$$

La loi constitutive de premier gradient étant élasto-plastique, les solutions seront différentes selon l'état de la région considérée. Dans une région à comportement élastique, la loi constitutive s'écrit $\dot{\sigma} = A \dot{\epsilon}$ et dans une région à comportement plastique $\dot{\sigma} = H^{ep} \dot{\epsilon}$.

Finalement les solutions du problème prennent les formes suivantes en fonction du signe de

$$\eta^2 = \Delta = \frac{H_{1111} H_{1212} - H_{1112} H_{1211}}{3a^1 H_{1212}} \quad (39)$$

• Si $\Delta > 0$, alors

$$\dot{u}' = \dot{u}'_0 + (C_{11} \exp(\eta_1 x) + C_{12} \exp(\eta_2 x)) \quad (40)$$

avec $\eta_i = \pm \sqrt{\Delta}$ et \dot{u}'_0 obtenue à partir de l'équation de la solution particulière :

$$\dot{u}'_0 = \frac{H_{1212} \dot{F}_1 - H_{1112} \dot{F}_2}{H_{1111} H_{1212} - H_{1112} H_{1211}} \quad \text{et} \quad \dot{v}'_0 = \frac{H_{1111} \dot{F}_2 - H_{1211} \dot{F}_1}{H_{1111} H_{1212} - H_{1112} H_{1211}} \quad (41)$$

De plus, les solutions partielles \dot{u}'_p vérifient les équations suivantes :

$$\frac{H_{1111} H_{1212} - H_{1112} H_{1211}}{3a^1 H_{1212}} \dot{u}'_p - \dot{u}'_p''' = 0 \quad (42)$$

A partir des conditions de symétrie du domaine étudié et $\dot{u}'_p(l) = 0$, on en déduit que les coefficients C_{11} et C_{12} sont nuls.

• Si $\Delta < 0$, alors

$$\dot{u}' = \dot{u}'_0 + (C_{21} \cos(\omega x) + C_{22} \sin(\omega x)) \quad (43)$$

avec $\omega = \sqrt{\frac{H_{1211}H_{1112} - H_{1212}H_{1111}}{3a^1H_{1212}}}$. De même que pour les solutions précédemment établies

pour les zones où $\Delta > 0$, la solution partielle \dot{u}_p vérifie l'équation 42.

L'expression de la solution dans la zone où $\Delta < 0$ fait apparaître des fonctions trigonométriques. Il est donc clair qu'une zone de localisation peut apparaître dans la structure. On peut alors admettre que la structure privilégie une longueur interne de $l_c = 2\pi/\omega$, s'exprimant selon le premier mode de plus basse énergie.

On constate aussi que la dépendance de la longueur interne l_c est en $\sqrt{a^1}$. Il est intéressant de remarquer également que la condition d'apparition des solutions de bifurcations est contrôlée uniquement par les termes du modèle de premier gradient. Autrement dit, la prise en compte d'une cinématique enrichie restreinte aux milieux de second gradient ne modifie pas la valeur du paramètre de contrôle provoquant l'apparition d'une solution bifurquée en bandes de cisaillement.

4.4.2 Résolution numérique

L'option de calcul élémentaire PDIL_ELGA, détermine, pour un état initial donné des contraintes et variables internes, la valeur de A1_LC2 établie selon la formule suivante:

$$A1_LC2 = \frac{a^1}{l_c^2} = \frac{[H_{1211}H_{1112} - H_{1111}H_{1212}]}{3H_{1212}(2\pi)^2} \quad (44)$$

pour différentes orientations de la bande de cisaillement. L'écriture explicite des composantes du tenseur de rigidité du modèle local classique est obtenue via les routines de calcul des matrices tangentes en vitesse.

Une rotation de la bande de cisaillement d'un angle θ implique une rotation locale appliquée aux composantes du tenseur des contraintes. Elle permet d'estimer les nouvelles composantes du tenseur constitutif local du modèle de comportement classique, portant sur le premier gradient des déplacements.

La discrétisation angulaire utilisée est tout d'abord de 5° . Autour du premier maximum relevé, on effectue une discrétisation à 1° puis 0.2° . De cette façon, on s'assure d'obtenir une valeur précise du paramètre A1_LC2.

L'utilisateur peut ensuite définir la valeur de A1 adaptée à la discrétisation spatiale de la structure étudiée, sachant qu'un minimum de 6 éléments sur LC apparaît nécessaire pour garantir l'indépendance aux maillages des résultats.

La validation numérique de l'option de calcul PDIL_ELGA est portée dans les cas-tests SSNV208A, SSNP125A et WTNV132C.

5 Fonctionnalité et vérifications

La liste des tests de validation pour le second gradient :

Cas-test	description
ssll117 (modélisations a->e)	Test de D_PLAN_DIL (voir V3.01.117) pour la modélisation P2-P1-P0 (voir §12)
ssll117f	Test de D_PLAN_2DG (voir V3.01.117) pour la modélisation P2-P1-P1
ssll117g	Test de D_PLAN_DIL (voir V3.01.117) pour la modélisation P2-P1-P1
sslv117a	Test de 3D_DIL (voir V3.04.117) pour la modélisation P2-P1-P1

6 Bibliographie

- [1] Chambon R, Caillerie D, El Hassan N : "One-dimensional localisation studied with a second grade model", Eur. J. Mech. A/Solids (1998), vol 17, pp 637-656.
- [2] Chambon R, Caillerie D, Matsushima T : "Plastic continuum with microstructure, local second gradient theories for geomaterials : localization studies", Int. J. Solids and Struct. (2001), vol 38, pp 8503-8527.
- [3] Matsushima T, Chambon R, Caillerie D : "Large strain finite element analysis of local second gradient models, application to localization", Int. J. Num. Meth. Eng. (2002), vol 54, pp 499-521.
- [4] Fernandes R : "Modélisation numérique objective des problèmes hydromécaniques couplés dans le cas des géomatériaux", Thèse de doctorat de l'Université Joseph Fourier – Grenoble, 23 janvier 2009.
- [5] Fernandes R, Chavant C, Chambon R : "A simplified second gradient model for dilatant materials : theory and numerical implementation", Int. J. Solids and Struct. (2008), vol 45, pp 5289-5307.
- [6] Mindlin RD : "Microstructure in linear elasticity", Arch. Ration. Mech. Anal. (1964), vol 16, pp 51-78.
- [7] Mindlin RD : "Second gradient of strain and surface-tension in linear elasticity", Int. J. Solids and Struct. (1965), vol 1, pp 417-738.
- [8] Germain P : "La méthode des puissances virtuelles en mécanique des milieux continus. Première partie : théorie du second gradient", Journal de Mécanique (1973), vol 12, pp 235-274.
- [9] Germain P : "The method of virtual power in continuum mechanics. Part 2 : Microstructure", SIAM J. Appl. Math. (1973), vol 25, pp 556-575.
- [10] Zervos A, Papanastasiou P, Vardoulakis I : "A finite element displacement formulation for gradient elastoplasticity", Int. J. Num. Meth. Eng. (2001), vol 50, pp 1369-1388.
- [11] Foucault A. : "Modélisation du comportement cyclique des ouvrages en terre intégrant des techniques de régularisation ", Thèse de doctorat de l'Ecole Centrale Paris – Laboratoire MSS-Mat, 21 juin 2010.
- [12] Desrues J., Viggiani G. "Strain localization in sand: an overview of the experimental results obtained in Grenoble using stereophotogrammetry". Int. J. Num. Anal. Meth. Geom. (2004), vol. 28: pp. 279-321.
- [13] Vardoulakis I., Sulem J. "Bifurcation Analysis in Geomechanics". London : Blackie, 1995.

7 Description des versions du document

Indice document	Version Aster	Auteur(s) Organisme(s)	Description des modifications
A	9.3	R.FERNANDES	Texte initial