



AVERTISSEMENT

Ce document est le fruit d'un long travail approuvé par le jury de soutenance et mis à disposition de l'ensemble de la communauté universitaire élargie.

Il est soumis à la propriété intellectuelle de l'auteur. Ceci implique une obligation de citation et de référencement lors de l'utilisation de ce document.

D'autre part, toute contrefaçon, plagiat, reproduction illicite encourt une poursuite pénale.

Contact : ddoc-theses-contact@univ-lorraine.fr

LIENS

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 122. 4

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 335.2- L 335.10

http://www.cfcopies.com/V2/leg/leg_droi.php

<http://www.culture.gouv.fr/culture/infos-pratiques/droits/protection.htm>

Modélisation multiéchelle des matériaux hétérogènes : application aux alliages à mémoire de forme

Rui XU

Superviseurs:

Prof. Hamid Zahrouni (hamid.zahrouni@univ-lorraine.fr) LEM3,
Université de Lorraine CNRS, France
Prof. Tarak Ben Zineb (tarak.ben-zineb@univ-lorraine.fr) LEM3,
Université de Lorraine, CNRS, France
Prof. Heng Hu (huheng@whu.edu.cn) School of Civil Engineering,
Wuhan University, China

1 Introduction générale

Afin de réduire les coûts, la taille et la consommation d'énergie, les applications de miniaturisation dans divers domaines industriels tels que l'aérospatiale, les télécommunications et l'automobile, ont connu une formidable expansion au cours des dernières décennies. L'utilisation d'alliages à mémoire de forme (AMF) comme matériau constitutif de ces systèmes permet de grandes déformations réversibles et/ou une conversion d'énergie thermomécanique induite par la transformation de phase. De plus, le remplacement des AMF en vrac par des systèmes composites ou architecturés augmente les rapports rigidité/poids et amortissement/poids et amplifie la déformation réversible susmentionnée. Une meilleure compréhension et maîtrise de ces propriétés contribuera au développement d'applications innovantes. De cette façon, il est important de développer un outil de conception numérique adapté et efficace pour de telles applications, compte tenu de leurs comportements thermomécaniques à plusieurs échelles, basé sur la méthode des éléments finis et un modèle constitutif thermomécanique précis pour les AMF.

Dans le chapitre 2, une méthode par éléments finis multi-échelles générique 3D (FE²) est proposée pour modéliser la pseudo-élasticité et les effets de mémoire de

forme des composites à base de AMF. Dans cette méthode, les composites sont séparés en un niveau macroscopique et un niveau microscopique, où le comportement constitutif de chaque point d'intégration au niveau macroscopique est représenté par le comportement efficace d'un élément de volume représentatif (RVE) correspondant. Ce comportement efficace est calculé par la méthode des éléments finis sous le RVE maillé par élément de volume. La transition d'information en temps réel entre les deux niveaux est réalisée sur une plateforme commerciale ABAQUS via son sous-programme matériel défini par l'utilisateur (UMAT). Un modèle thermodynamique, proposé par [Chemisky et al. \(2011\)](#), est adopté pour décrire le comportement constitutif total du AMF. Ce modèle considère trois mécanismes de déformation dépendant du chemin liés à la transformation de phase, à la réorientation de la martensite et à l'accommodation des jumeaux par la dérivation de l'énergie libre de Gibbs. En considérant un composite renforcé de fibres AMF, plusieurs tests thermodynamiques de la littérature soumis à des charges de traction-compression et de flexion sont étudiés pour valider notre modèle multi-échelle, qui montre une bonne précision et fiabilité. De plus, ce modèle est utilisé pour la conception et la simulation de AMF architecturés grâce à sa plateforme informatique générique ABAQUS. Tout d'abord, une analyse paramétrique au niveau cellulaire avec une série de RVE est réalisée pour prédire les relations entre la fraction de vide, la rigidité totale, l'effet d'hystérésis et la masse des AMF. Deuxièmement, les réponses structurelles des AMF architecturés sont étudiées par la méthode FE², qui utilise le comportement constitutif efficace du RVE pour représenter le comportement de la structure macroscopique. Grâce à un test de flexion en trois points, on observe que la structure hérite des fortes réponses non linéaires — à la fois l'effet d'hystérésis et la superélasticité — des AMF architecturés au niveau cellulaire. De plus, l'influence de la fraction de vide au niveau RVE sur les réponses structurelles des matériaux peut être décrite plus spécifiquement et directement, au lieu d'utiliser un RVE pour prédire au niveau microscopique. Ainsi, ce travail pourrait être référencé pour optimiser la rigidité, l'effet d'hystérésis et la masse des structures AMF architecturées et étendu pour d'éventuelles applications avancées.

Malgré la modélisation multi-échelle de matériaux et de structures minces à base de AMF, le phénomène d'instabilité est un problème compliqué typique dans les structures minces étudiées. Cependant, la méthode multi-échelle simultanée adoptée nécessite une RVE à chaque point d'intégration du modèle d'éléments finis macroscopiques, dont la taille de l'élément dépend de la longueur d'onde de la fibre microscopique bouclée, ce qui entraîne une grande quantité de calculs. Par ailleurs, la relation entre les modes de flambage des fibres microscopiques et l'instabilité macroscopique doit également être étudiée plus avant. Ainsi, dans le

chapitre 3, un modèle multiéchelle à calcul efficace est proposé pour simuler et analyser avec précision le phénomène d’instabilité des composites renforcés de fibres longues. La méthode FE^2 basée sur la théorie de l’homogénéisation est adoptée pour réaliser l’interaction en temps réel entre les niveaux microscopiques et macroscopiques. Pour augmenter l’efficacité de calcul au niveau microscopique et contrôler les calculs non linéaires, l’analyse liée à Fourier est effectuée sur les RVE en utilisant la technique des coefficients de Fourier à variation lente (TSVFC), où toutes les inconnues à variation rapide sont remplacées par des inconnues à variation lente. Le système multi-échelle non linéaire établi est résolu par la méthode numérique asymptotique (ANM), qui est plus fiable et prend moins de temps que les autres méthodes itératives classiques. Ce modèle est utilisé pour étudier l’instabilité structurelle et le micro-flambement des fibres des composites renforcés de fibres longues. Les effets de la longueur d’onde des fibres sur le flambage et le post-flambement de la macro-structure sont discutés.

Bien qu’un solveur non linéaire efficace et un modèle RVE réduit soient développés pour améliorer l’efficacité globale de calcul de l’approche de modélisation multi-échelles, le coût de calcul doit encore être réduit dans ce cadre multi-échelles simultané. Parce que les informations sur chaque point d’intégration macroscopique sont censées être mises à jour à chaque itération pendant le calcul macroscopique en ligne, ce qui nécessite d’énormes calculs répétitifs sur les RVE associés. Inspirées par l’informatique pilotée par les données, de nouvelles approches qui découplent les échelles sont proposées pour réduire le coût de calcul en ligne des structures composites dans le chapitre 4, à savoir la méthode des éléments finis multi-échelles pilotée par les données (FE^2 pilotée par les données) et l’informatique structurée pilotée par le génome (SGD). Dans la méthode FE^2 basée sur les données, les échelles corrélées de la méthode FE^2 classique sont ici divisées pour être calculées séquentiellement et séparément: les problèmes microscopiques sont calculés à l’avance pour construire un matériau hors ligne base de données du génome, qui sera ensuite utilisée dans l’analyse macroscopique basée sur les données. Dans ce nouveau cadre, les difficultés de formulation et de résolution de systèmes multi-échelles compliqués sont évitées en traitant des problèmes à échelle unique. De plus, le calcul en ligne des problèmes microscopiques dans la méthode FE^2 classique est remplacé par la recherche de points de données sur la base de données hors ligne dans la méthode FE^2 pilotée par les données. Ainsi, l’efficacité informatique en ligne de l’analyse structurelle est considérablement améliorée. Après cela, le calcul SGD est proposé pour les structures composites à parois minces, où la base de données Structural-Genome est collectée par la méthode FE^2 . Par rapport à l’analyse basée sur le génome matériel (MGD), proposée par Kirchdoerfer et Ortiz, 2016, la

nouvelle méthode SGD bénéficie non seulement de la réduction du modèle, mais également de la capacité de gérer facilement la géométrie microscopique complexe et les propriétés des matériaux. Plusieurs tests numériques sont considérés pour démontrer l'efficacité et la robustesse de la méthode proposée.

2 Résumé et perspective

Cette thèse vise à proposer des méthodes numériques efficaces pour la simulation multi-échelle de structures composites et cellulaires basées sur AMF. À cette fin, la méthode des éléments finis multiéchelles est adoptée pour formuler le cadre multiéchelles de base. De plus, des problèmes typiques tels que l'instabilité et l'efficacité de calcul sont étudiés pour optimiser le cadre multi-échelle de base. Les principales contributions peuvent être résumées comme les points suivants:

- Tout d'abord, un outil numérique multi-échelle implémenté sur ABAQUS est développé pour la modélisation de structures composites à base de AMF et de matériaux architecturés. Les résultats montrent que ce modèle proposé pourrait être appliqué pour prédire la réponse du composite renforcé de fibres en tirant parti du PE et du SME des AMF. Malgré le composite renforcé de fibres AMF, le comportement de superélasticité d'une structure AMF architecturée est également étudié avec le modèle d'éléments finis multi-échelles. L'effet de la modification de la fraction de vide sur la rigidité cellulaire, la fraction de volume martensitique maximale, l'effet d'hystérésis et les réponses structurelles sont discutés en détail. Les résultats montrent que l'outil multi-échelle est nécessaire et efficace pour simuler le comportement non linéaire de la structure AMF architecturée.
- Deuxièmement, la méthode de réduction du modèle (TSVFC), le solveur non linéaire efficace (ANM) sont en outre adoptés pour améliorer l'efficacité de calcul dans la modélisation multi-échelles du phénomène d'instabilité des structures composites. Le modèle multi-échelle implémenté avec TSVFC et ANM peut simuler avec précision et efficacité le phénomène d'instabilité des composites renforcés de fibres longues, dans lequel une première défaillance macroscopique globale résulte de la structure composite instable tandis qu'une seconde défaillance macroscopique locale provient du flambage microscopique des fibres.
- Troisièmement, l'efficacité de calcul en ligne de l'analyse macroscopique est considérablement améliorée par le découplage des échelles dans le cadre informatique basé sur les données. Les résultats montrent que la méthode FE²

proposée basée sur les données garantit une grande précision et l'ensemble des informations par rapport à la méthode FE² classique. En outre, un nouveau paradigme informatique SGD est proposé pour l'analyse des structures composites à parois minces en introduisant une contrainte et une déformation généralisées avec des éléments structurels à l'échelle macroscopique. Les résultats montrent que le schéma SGD proposé permet d'effectuer efficacement l'analyse numérique des composites à parois minces, en particulier avec des hétérogénéités microscopiques complexes où les équations constitutives sont assez difficiles à obtenir.

La présente thèse laisse quelques sujets qui seraient les directions de recherche possibles à aborder à l'avenir:

- L'outil numérique proposé pour les matériaux et structures à base de AMF peut être utilisé pour concevoir d'autres structures composites AMF grâce à la polyvalence et à la fiabilité de sa plate-forme informatique ABAQUS. Pour une application supplémentaire de la procédure multi-échelle avec le solveur non linéaire ANM, l'instabilité des structures AMF architecturées ou composites minces dans les cas 3D peut être envisagée.
- Dans le schéma informatique piloté par les données, le processus de correspondance des données peut encore être optimisé en introduisant à l'avenir des algorithmes tels que la dichotomie. En comparaison avec le problème d'origine à plusieurs échelles dans un cadre concurrent, les problèmes à échelle unique sont mieux traités dans la littérature et peuvent être analysés de manière relativement plus efficace. Comme travaux futurs, nous pouvons nous attendre à ce que certains modèles d'éléments finis de haute performance tels que les poutres [De Pietro et al. \(2016\)](#); [Hui et al. \(2017\)](#), les plaques [Huang et al. \(2017\)](#) et les coques [Cong et al. \(2015\)](#), puissent être adoptés à la fois aux échelles macroscopique et microscopique pour réduire le coût de calcul dans les étapes en ligne et hors ligne. Par exemple, le calcul SGD allège considérablement le fardeau de la dimensionnalité des données en adoptant des éléments structurels à l'échelle macroscopique. À l'ère actuelle des données, cette combinaison de l'analyse structurale traditionnelle et de la technique basée sur les données a un grand potentiel dans la conception technique et l'optimisation des structures composites.
- Pour appliquer les procédures basées sur les données aux matériaux et structures basés sur AMF, les procédures informatiques existantes basées sur les données doivent encore être développées pour les mécanismes dépendants

du chemin. Pendant ce temps, compte tenu du comportement thermomécanique compliqué des AMF avec beaucoup de paramètres, la réduction de la dimensionnalité de la base de données sera un autre sujet d'étude intéressant.

3 Les publications

Articles dans ISI Web of Sciences:

- Hui Y.[†], **Xu R.**[†], Giunta G., De Pietro G., Hu H., Belouettar S., Carrera E., 2019. Multiscale CUF-FE² nonlinear analysis of composite beam structures. *Computers and Structures*, 221: 28-43.
- **Xu R.**[†], Hui Y.[†], Hu H., Huang Q., Zahrouni H., Ben Zineb T., Potier-Ferry M., 2019. A Fourier-related FE² multiscale model for instability phenomena of long fiber reinforced materials. *Composite Structures*, 211: 530-539.
- **Xu R.**, Bouby C., Zahrouni H., Ben Zineb T., Hu H., Potier-Ferry M., 2018. A multiscale analysis on the superelasticity behavior of architected shape memory alloy materials. *Materials*, 11(9), 1746.
- **Xu R.**, Bouby C., Zahrouni H., Ben Zineb T., Hu H., Potier-Ferry M., 2018. 3D modeling of shape memory alloy fiber reinforced composites by multiscale finite element method. *Composite Structures*, 200: 408-419.
- Huang Q., Choe J., Yang J., **Xu R.**, Hui Y., Hu H., 2019. The effects of kinematics on post-buckling analysis of sandwich structures. *Thin-Walled Structures*, 143: 106204.
- Huang Q., Choe J., Yang J., Hui Y., **Xu R.**, Hu H., 2019. An efficient approach for post-buckling analysis of sandwich structures with elastic-plastic material behavior. *International Journal of Engineering Science*, 142: 20-35.
- Yang J., **Xu R.**, Hu H., Huang Q., Huang W., 2019. Structural-Genome-Driven computing for composite structures. *Composite Structures*, 215: 446-453.
- Huang Q., **Xu R.**, Liu Y., Hu H., Giunta G., Belouettar S., Potier-Ferry M., 2017. A two-dimensional Fourier-series finite element for wrinkling analysis of thin films on compliant substrates. *Thin-Walled Structures*, 114: 144-153.

Conférences internationales:

- **Rui Xu**, Wei Yan, Heng Hu, Qun Huang, Jie Yang. A data-driven multiscale finite element method for composite materials. Accepted to oral presentation in 4th China International Congress on Composite Materials (CCCM-4), Zhuhai, China, 2019.
- **Rui Xu**, Wei Yan, Heng Hu, Qun Huang, Jie Yang, Tarak Ben Zineb, Hamid Zahrouni. A data-driven multiscale finite element method for composite structures. Accepted to oral presentation in 22th International Conference on Composite Structures (ICCS22), Wuhan, China, 2019.
- **Rui Xu**, Céline Bouby, Hamid Zahrouni, Tarak Ben Zineb, Heng Hu, Michel Potier-Ferry. Multiscale finite element modeling for shape memory alloy fiber reinforced composite. Accepted to oral presentation in 7th International Conference on Smart Materials and Nanotechnology in Engineering (SMN2019), Harbin, China, 2019.
- **Rui Xu**, Wei Yan, Heng Hu, Qun Huang, Jie Yang. A novel multiscale computational homogenization framework based on data-driven computing. Accepted to oral presentation in 5th International Conference on Mechanics of Composites (MECHCOMP 2019), Lisbon, Portugal, 2019.
- **Rui Xu**, Céline Bouby, Hamid Zahrouni, Tarak Ben Zineb, Heng Hu, Michel Potier-Ferry. A multiscale modeling on alloy based cellular materials shape memory. Accepted to oral presentation in 14th Colloque National en Calcul des Structures (CSMA 2019), Giens, France, 2019.
- **Rui Xu**, Yanchuan Hui, Heng Hu, Qun Huang, Hamid Zahrouni, Tarak Ben Zineb, Michel Potier-Ferry. A double scale analysis on the phenomena of long fiber reinforced materials. Accepted to oral presentation in 14th Colloque National en Calcul des Structures (CSMA 2019), Giens, France, 2019.
- **Rui Xu**, Céline Bouby, Hamid Zahrouni, Tarak Ben Zineb, Heng Hu, Michel Potier-Ferry. A multiscale approach for the thermomechanical modeling of shape memory alloy fiber reinforced composites. Accepted to poster in 11th European Symposium on Martensitic Transformations (ESOMAT 2018), Metz, France, 2018.
- **Rui Xu**, Wei Yan, Yanchuan Hui, Qun Huang, Heng Hu. Multiscale modeling for instability phenomena of long fiber reinforced composite with a reduced microscopic model. Accepted to oral presentation in Chinese Conference on Computational Mechanics in conjunction with International Sym-

posium on Computational Mechanics' 2018 (CCCM-ISCM 2018), Nanjing, China, 2018.

- **Rui Xu**, Yanchuan Hui, Qun Huang, Heng Hu, Hamid Zahrouni, Tarak Ben-zineb, Shaobo Zhu. Multiscale modeling for instability phenomena of long fiber reinforced composite with a double scale microscopic model. Accepted to oral presentation in World Congress on Computational Mechanics (WCCM XIII), New York City, USA, 2018.
- **Rui Xu**, Yanchuan Hui, Qun Huang, Heng Hu, Hamid Zahrouni, Tarak Ben-zineb, Shaobo Zhu. A reduced model for handling the instabilities of long fiber reinforced composite with multilevel finite element method. Accepted to oral presentation in 1st International Conference on Mechanics of Advanced Materials and Structures (ICMAMS 2018), Torino, Italy, 2018.
- **Rui Xu**, Céline Bouby, Hamid Zahrouni, Tarak Ben Zineb, Heng Hu, Michel Potier-Ferry. Multi-scale modeling of the thermomechanical behavior of shape memory alloy/polymer composites by multilevel finite element method. Accepted to oral presentation in 1st International Conference on Theoretical, Analytical and Computational Methods for Composite Materials and Composite Structures (ICOMP 2018), Wuhan, China, 2018.
- Jongchol Choe, Jian Liu, **Rui Xu**, Qun Huang, Heng Hu. A Fourier-reduced model for global-local-coupling wrinkling analysis of sandwich plates. Accepted to oral presentation in 20th International Conference on Composite Structures, Paris, France, 2017.
- **Rui Xu**, Céline Bouby, Hamid Zahrouni, Tarak Ben Zineb, Heng Hu, Michel Potier-Ferry. Modélisation multiéchelle du comportement thermomécanique des composites en alliage à mémoire de forme/polymère par la méthode des éléments finis au carré. Accepted to oral presentation in Congrès Français de Mécanique 2017, Lille, France, 2017.
- **Rui Xu**, Céline Bouby, Hamid Zahrouni, Tarak Ben Zineb, Heng Hu, Michel Potier-Ferry. Multiscale modeling of the thermomechanical behavior of shape memory alloy/ polymer composites by finite element square method. Accepted to oral presentation in 3rd International Conference on Mechanics of Composites, Bologna, Italy, 2017.
- Yanchuan Hui, **Rui Xu**, Heng Hu, Gaetano Giunta, Salim Belouettar. A novel FE² method based Fourier macroscopic model for instability phenom-

ena of long fiber reinforced composites. Accepted by 19th International Conference on Composite Structures, Porto, Portugal, 2016.

- Yanchuan Hui, **Rui Xu**, Qun Huang, Heng Hu. A Fourier-related FE² multi-scale model for instability phenomena of long fiber reinforced materials. Accepted to oral presentation in World Congress on Computational Mechanics (WCCM XII), Seoul, Korea, 2016.

References

- Y. Chemisky, A. Duval, E. Patoor, T. B. Zineb, Constitutive model for shape memory alloys including phase transformation, martensitic reorientation and twins accommodation, *Mechanics of Materials* 43 (7) (2011) 361–376.
- G. De Pietro, Y. Hui, G. Giunta, S. Belouettar, E. Carrera, H. Hu, Hierarchical one-dimensional finite elements for the thermal stress analysis of three-dimensional functionally graded beams, *Composite Structures* 153 (2016) 514–528.
- Y. Hui, G. Giunta, S. Belouettar, Q. Huang, H. Hu, E. Carrera, A free vibration analysis of three-dimensional sandwich beams using hierarchical one-dimensional finite elements, *Composites Part B: Engineering* 110 (2017) 7–19.
- Q. Huang, Y. Liu, H. Hu, Q. Shao, K. Yu, G. Giunta, S. Belouettar, M. Potier-Ferry, A Fourier-related double scale analysis on the instability phenomena of sandwich plates, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 318 (2017) 270–295.
- Y. Cong, S. Nezamabadi, H. Zahrouni, J. Yvonnet, Multiscale computational homogenization of heterogeneous shells at small strains with extensions to finite displacements and buckling, *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 104 (4) (2015) 235–259.