Changements d'échelle et couplages dans les matériaux et les biomatériaux

R. Peyroux

▶ **To cite this version:**

R. Peyroux. Changements d'échelle et couplages dans les matériaux et les biomatériaux. Mécanique des matériaux [physics.class-ph]. Université Grenoble 1, 2014. tel-02056817

HAL Id: tel-02056817

https://hal.univ-grenoble-alpes.fr/tel-02056817

Submitted on 20 Mar 2019

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

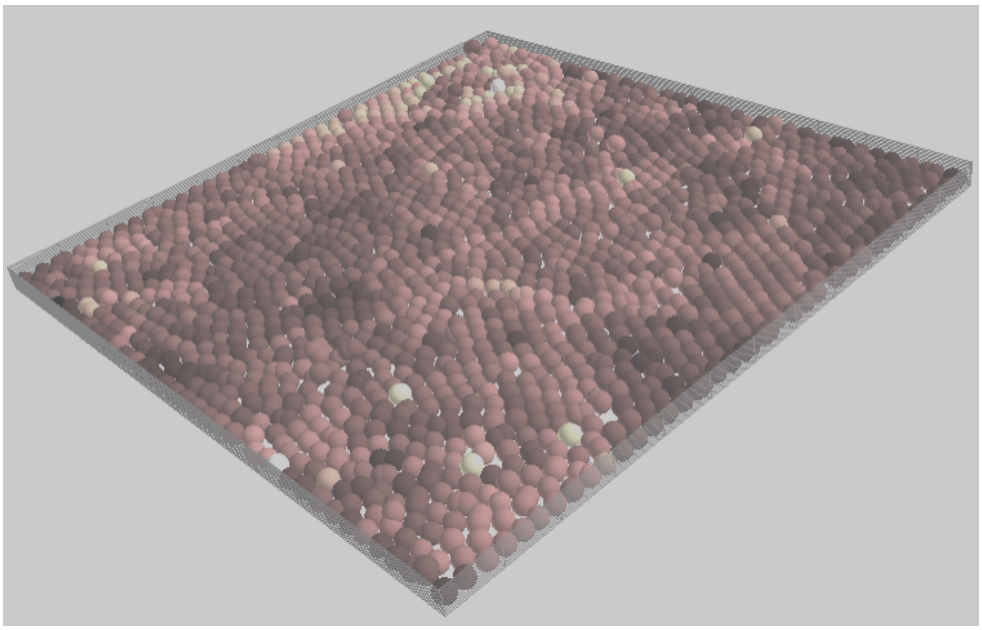
L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Mémoire d'

Habilitation à Diriger les Recherches

présenté par

Robert Peyroux



et intitulé

Changements d'échelle et couplages dans les matériaux et les biomatériaux

Unversité Grenoble 1

Jury :	Jacques DERUES	Président
	Pierre GILORMINI	Rapporteur
	Jean-Philippe PONTHOT	Rapporteur
	Pascal SOMMER	Rapporteur
	Ahmed BENALLAL	Examinateur

Le 14 octobre 2014

Il en est ici comme de tous les autres arts : le modèle qui réussit le mieux en petit souvent ne peut s'exécuter en grand.

[Georges-Louis Leclerc, Comte de Buffon]

Histoire Naturelle, 1739

Table des matières

I - Activités de recherche **8**
Introduction *8*
Thème 1 : Homogénéisation et couplages thermomécaniques *10*
1-a Phénomènes de localisation en température et en déformation dans les polymères 10
1-b Alliages à mémoire de forme 13
1-c A propos des phénomènes de localisation 16
1-d Identification expérimentale de lois de zones cohésives 16
1.e En guise de conclusion 17
Thème 2 : Mécanique des milieux granulaires *18*
2-a Thèse d'Itthichaï Preechawuttipong : 18
2-b Thèse de Vincent Richefeu : 20
2-c Thèse d'Emilien Azema : 22
2-d En guise de conclusion 23
Thème 3 : Biomécanique de la cellule et des tissus *24*
3.a Thèse de Somchaï Pattana 24
3.b Mécanique de la cellule 25
3-c En guise de conclusion 26

II - Pistes de recherche **28**
Introduction *28*
Thème 1 : Matériaux composites biosourcés *30*
1.a Contexte du projet 30
1.b Compression de poudre d'amidon 31
Thème 2 : Biomécanique de la cellule et des tissus *32*
2.a Brève introduction 32
2.b Mécanique de la cellule 32
2.c Effets mécaniques collectifs 33
2.d Morphogenèse de tissu 34

III - Publications **38**
Revues à comité de lecture *38*
Ouvrages ou chapitres d'ouvrages *39*
Thèses ou habilitations *39*
Colloques avec actes *39*
Colloques sans actes *42*
Thèses et stages post-doctoraux encadrés *43*

IV - Encadrement de doctorants et de post-doctorants **46**

Annexe A Un cadre thermomécanique pour les équations de comportement **50**
Le cadre thermomécanique *50*
Quelques exemples de lois de comportement thermomécaniques *54*
Thermoélasticité (intérêt uniquement pédagogique) 54
Thermoviscoélasticité 56
Alliages à mémoire de forme 57

Annexe B Modèle numérique d'interaction et de division cellulaire **62**
Interaction entre cellules – Modèle JKR modifié *62*
Modélisation de la division cellulaire *63*

Introduction

"Caractéristiques thermo-élastiques de matériaux composites à fibres courtes" est le titre de la thèse que j'ai effectuée (1987-1990) au Laboratoire de Mécanique Générale des Milieux Continus (devenu depuis LMGC) à Montpellier, sous la direction de Pierre Suquet. Cette thèse était financée conjointement par RENAULT et le CNRS et m'a permis de m'investir dans les méthodes d'homogénéisation (homogénéisation périodique, schéma auto-cohérent, décomposition en séries de Fourier). Le contexte industriel de cette thèse m'a également conduit à réaliser un logiciel opérationnel pour RENAULT "SELF", basé sur le schéma auto-cohérent, et fournissant les caractéristiques élastiques et de dilatation thermique d'un composite à fibres courtes, en fonction de la fraction volumique des fibres, de la répartition de leur élancement et de celle de leur orientation.

J'ai ensuite été recruté au **CNRS** en octobre 1990, pour intégrer l'équipe **Mécanique Non Régulière** de Christian LICHT au LMGMC à Montpellier. J'ai enrichi mon travail sur les méthodes d'homogénéisation en y intégrant des couplages thermomécaniques. J'ai développé un logiciel de calcul par éléments finis ("MICMAC") pour prendre en compte les couplages thermoélastiques (résolution simultanée de l'équation de comportement mécanique et de l'équation de la chaleur). Ce logiciel permet de réaliser l'homogénéisation d'un v.e.r. maillé et a été étendu pour réaliser des calculs couplés sur une structure 2D quelconque. Dans la thèse de Franck Meissonnier (1996), nous avons élargi les possibilités offertes pour ce dernier type de calcul au cadre d'un comportement thermoviscoélastique de type Kelvin-Voigt.

Cette activité de modélisation et de simulation numérique des couplages thermomécaniques m'a conduit à me rapprocher puis à intégrer en 1996 **l'équipe Thermomécanique des Matériaux** (ThM2) d'André Chrysochoos. Je me suis alors appuyé sur les expériences réalisées dans l'équipe pour conduire différentes modélisations, notamment concernant des problèmes de localisation des déformations dans des matériaux thermoviscoélastiques à coefficients dépendant de la température, et le comportement thermomécanique des alliages à mémoire de forme. Les thèses de Xavier Balandraud (2000) et de Silvère Vigneron (2009) relèvent de cette dernière thématique.

Des collaborations suivies avec l'IRSN de Cadarache se sont montées sur les thématiques de changement d'échelle et de modélisation multiphysiques, tant du point de vue expérimental que numérique. Pour les doter d'un cadre structurel plus performant, j'ai créé en 2007, avec Yann Monerie (LEC – IRSN Cadarache), le **laboratoire MIST (Micromécanique et Intégrité des Structures)**, laboratoire "sans mur" commun au CNRS, à l'IRSN. Il a associé les moyens de recherche des deux organismes dans le domaine des comportements des matériaux et des structures soumis à des ambiances nocives : ceux de la Direction de prévention des accidents majeurs (DPAM) à Cadarache pour l'IRSN, et ceux du Laboratoire de mécanique et génie civil (LMGC) à Montpellier pour le CNRS et l'université de Montpellier 2.

Parallèlement, j'ai aussi bénéficié de la présence au LMGC de Michel Jean et Jean-Jacques Moreau pour m'intéresser aux matériaux granulaires et à leur simulation numérique par éléments discrets. J'ai notamment développé avec Michel Jean une

modélisation permettant de tenir compte de phénomènes d'adhésion dans les matériaux granulaires. En 2001, j'ai créé, avec Saïd El Youssoufi et Farhang Radjaï, **l'action transversale Solides Granulaires du LMGC**, qui rassemblait des compétences numériques, expérimentales et de modélisation sur ce thème. Les thèses d'Itthichaï Preechawuttipong (2002), de Vincent Richefeu (2005) et d'Emilien Azéma (2007) ont été réalisées dans ce cadre.

J'ai ensuite proposé d'utiliser ce savoir-faire numérique pour lancer un thème de recherche sur la **biomécanique des cellules**. La thèse de Somchaï Pattana (2006) en a été la première étape, en se focalisant sur la modélisation de la division et de la croissance cellulaire pour mieux expliquer la morphogenèse de tissus. Puis, en 2007 et 2008, les relations nouées grâce à un Projet Exploratoire Pluridisciplinaire du CNRS, notamment avec l'Institut Albert Bonniot à Grenoble, m'ont permis de m'intéresser à la **mécanique du cytosquelette** et aux processus d'adhérence cellulaire.

Depuis 2009, j'ai intégré le **laboratoire 3SR à Grenoble** où j'ai été accueilli dans l'**équipe CoMHet**, équipe dont j'ai pris la responsabilité de 2011 à 2013. J'y développe principalement la partie biomécanique de mon activité, tout en essayant d'apporter ma contribution sur la prise en compte des couplages et dans les thématiques liées aux milieux fibreux et composites, notamment avec le démarrage d'une activité sur les matériaux biosourcés.

La suite de ce document expose tout d'abord les différentes thématiques abordées durant ces années, puis présente les pistes de recherche que je souhaite développer dans les années qui viennent.

Les publications citées dans le texte par un simple chiffre renvoient aux publications personnelles regroupées en fin de document, les autres références sont listées en fin de chaque chapitre (publications personnelles disponibles sur le site BoB@3SR)* [*]

Ce document se termine par un résumé des thèses et stages post-doctoraux que j'ai encadrés, des enseignements que j'ai dispensés et des responsabilités administratives que j'ai assumées.

---

[*] http://perso.3sr-grenoble.fr/users/rpeyroux

Thème 1 : Homogénéisation et couplages thermomécaniques

Les expérimentations menées dans l'équipe ThM2 du LMGC ont permis de montrer le rôle important joué par les couplages thermomécaniques accompagnant les processus de déformation, couplages dont la conséquence est l'existence de termes source de chaleur, et dont la trace "visible" est la modification du champ de température [15]. Que ces évolutions en température soient considérées comme des pistes intéressantes pour remonter aux termes sources, ou qu'elles viennent modifier le comportement du matériau, elles représentent, à l'échelle macroscopique, la trace des évolutions microstructurales que le matériau est en train de subir. A ce titre, il est utile de les quantifier pour avoir des informations sur les mécanismes responsables des états de déformation, des éventuelles irréversibilités, …

La simulation numérique de ces problèmes de couplage est intéressante à au moins deux titres. Premièrement, il s'agit d'apporter une aide à l'expérimentation dans l'évaluation des champs thermomécaniques (problèmes de non homogénéité des champs, méconnaissance des champs 3D à partir d'images de surface, …), et de fournir des validations simples des lois de comportement supposées. Deuxièmement, et c'est ici qu'intervient l'utilisation des passages micro-macro, l'intuition phénoménologique que l'on peut avoir au niveau expérimental des phénomènes responsables des processus de déformation du matériau peut être testée (et même paramétrée) par des calculs sur des volumes élémentaires représentatifs et par la déduction du comportement macroscopique correspondant.

Deux axes de recherche ont pu ainsi être développés. Ils concernent tous deux la prise en compte des couplages thermomécaniques, premièrement dans le comportement des matériaux polymères et deuxièmement dans le cas des alliages à mémoire de forme. Dans ces deux études, il apparaît nécessaire de se confronter aux problèmes dits de localisation. Cette problématique est devenue ces dernières années une thématique à part entière dans l'équipe ThM2, tant au niveau expérimental, qu'à ceux de la modélisation et de la simulation numérique.

Le cadre de modélisation thermomécanique est rappelé en annexe A.

1-a Phénomènes de localisation en température et en déformation dans les polymères

Certains comportements "atypiques" des matériaux polymères peuvent, et c'est notre credo, trouver leur origine dans des couplages entre effets mécaniques et thermiques. On cite quelquefois une expérience facilement réalisable à partir d'un pot de yaourt. Cet "objet industriel" a été thermoformé pour lui donner une déformation qualifiable de permanente ou au moins de bloquée. Si l'on place le pot de yaourt dans un four à une température d'environ 70°C, on assiste en quelques minutes à une restauration complète de la déformation de thermoformage. On récupère ainsi une pastille d'épaisseur constante qui est identique au matériau de départ (fig. 1.a).

Fig. 1.a Restauration, par chauffage à 70 °C d'un pot de yaourt, de la forme initiale de la pastille.

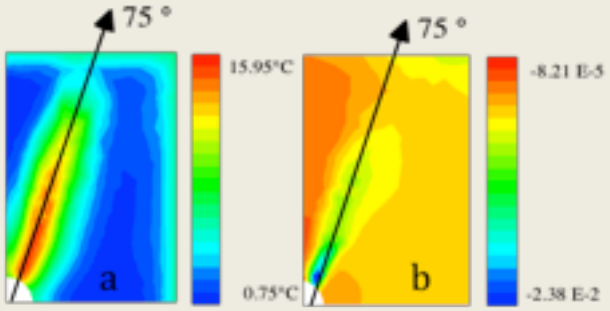


Fig. 1.b Bandes de localisation en température (a) et en déformation verticale (b) dans une plaque de PVC trouée en compression. Résultats de simulation numérique.

Moins banal au sens de plus scientifique (au moins en apparence), est l'expérience de compression que l'on peut réaliser sur une plaque de PVC (50 mm de hauteur, 32 mm de largeur et 5 mm d'épaisseur) trouée en son centre (trou de 5 mm de diamètre). Lors de la compression, une localisation de la déformation se produit au bord du trou et des bandes se propagent (sous forme d'une croix) au travers de l'éprouvette. On note une déformation importante dans les bandes, formant des bourrelets dans l'épaisseur du matériau. Après décharge de l'effort imposé, ces bandes persistent, et là aussi elles se résorbent complètement après passage au four. L'explication avancée, au moins pour la restauration de la déformation, par les "familiers" des polymères réside dans le passage de températures de transition (vitreuse ou autre). En dessous de telles températures, le comportement viscoélastique du matériau est régi par un temps de relaxation très long, conduisant à un quasi-blocage des déformations, alors qu'au delà de ces températures les temps de relaxation deviennent courts et autorisent une restauration rapide de la déformation bloquée. C'est à ce genre de phénomènes, et en premier lieu à la création puis à la propagation de bandes de localisation que nous avons souhaité nous intéresser.
L'approche choisie est de considérer un matériau de type Kelvin-Voigt dont les coefficients mécaniques vont dépendre fortement de la température. Classiquement un matériau comme le PVC voit sa rigidité décroître de plusieurs décades au passage d'une bande d'une dizaine de degrés autour de la température de transition vitreuse. Dans le cas d'un matériau de type Kelvin-Voigt où les coefficients ne dépendent pas de la température, on sait classiquement trouver une forme d'énergie libre et de potentiel de dissipation qui donne par dérivation une contrainte avec une partie visqueuse et, dans l'équation de la chaleur, deux termes de couplages, l'un isentropique dépendant du taux de déformation et l'autre dissipatif lié au carré de ce même taux. Dans le cas où les coefficients dépendent de la température, il faut rajouter à cette dernière non linéarité, celle qui proviennent des dérivées de ces coefficients par rapport à la température, et qui interviennent notamment dans l'expression de la chaleur spécifique du matériau.
En introduisant de telles lois de comportement dans un code de calcul "maison", l'intérêt est alors de pouvoir étudier les évolutions respectives des termes de couplage isentropique et de dissipation à différentes vitesses de sollicitations. C'est encore là un rapprochement tout à fait naturel avec les préoccupations expérimentales de l'équipe ThM2, qui permet de sortir du cadre purement élastique et de comparer les bilans énergétiques expérimentaux et simulés. Le problème est alors de simuler numériquement un phénomène de localisation de la température et de la déformation.

Ce phénomène est, dans la littérature, souvent appelé emballement thermique ou "cycle autocatalytique" (notamment pour les matériaux de type polymères), et fréquemment relié aux problèmes de bandes de cisaillement et (/ou) d'instabilité. L'approche que nous avons choisie consiste à décrire l'emballement thermique par l'intermédiaire des couplages thermomécaniques. Reprenons l'exemple de la plaque trouée en son centre et soumise à un essai de compression. Les concentrations de champs élastiques autour du trou vont produire des variations de température dues aux couplages thermomécaniques, et notamment des élévations de température dans certaines zones. Si l'on suppose maintenant que les caractéristiques du matériau évoluent avec la température (chute autour d'une température de transition), les déformations subies par le matériau vont s'accroître localement et ceci d'autant plus que la température aura évolué. Les variations de température vont alors être amplifiées par les couplages thermomécaniques et le cycle autocatalytique débute. On voit alors tout l'intérêt que peut représenter une prise en compte des couplages thermomécaniques pour traduire de tels phénomènes. Les résultats obtenus [T1, 27, 68] lors de la simulation numérique de la plaque trouée soumise à un essai de compression ont été très positifs et ceci pour deux raisons :

* le phénomène de localisation en température et en déformation a pu être simulé numériquement et retrace bien les étapes d'initiation puis de propagation des bandes (fig. 1.b).
* les zones affectées par cette localisation sont géométriquement tout à fait comparables à celles relevées expérimentalement dans le cas de la plaque trouée en compression, ceci pour un choix de coefficients matériel le plus réaliste possible. Par ailleurs les élévations de température et les valeurs de déformation obtenues sont elles aussi tout à fait réalistes.

Dans une autre étape, j'ai proposé d'écrire le terme de dissipation visqueuse comme une combinaison linéaire d'un terme reprenant les composantes hydrostatiques du tenseur de vitesse de déformation et d'un terme propre aux effets de cisaillement. Suivant le coefficient de pondération choisi, les bandes ne naissent pas au même endroit du trou, ne se propagent pas suivant la même direction, et ne sont pas accompagnées des mêmes élévations en température. C'est là un effet qui se retrouve expérimentalement et au moins qualitativement lorsque l'on considère d'autres matériaux que le PVC comme le PMMA ou le PC (Polycarbonate).

Enfin, la méthode numérique et la loi de comportement (Kelvin-Voigt) que j'avais retenues à cette époque ne sont sûrement pas les meilleures pour ce genre de simulation, et nous disposons aujourd'hui d'outils numériques plus performants (les limitations étaient surtout liées à l'hypothèse de petites déformations et à la pauvreté d'une loi de comportement de type KV).

Ces améliorations dans le domaine numérique ont été possibles grâce à la collaboration avec Frédéric Dubois (IR au LMGC) et Laurent Stainier (alors chargé de recherche au LTAS, Université de Liège, maintenant professeur à l'Ecole Centrale de Nantes), et ceci dans le cadre du PICS CNRS "Locather" qui a débuté en 2005. Le but de ce travail commun était d'aboutir à la mise en place d'une plateforme de calcul (basée sur le Logiciel LMGC90 et la bibliothèque Matlib) pour le traitement en grandes déformations de problèmes thermomécaniques couplés. Cette association de logiciels est maintenant

pleinement opérationnelle et a été plutôt utilisée jusqu'à présent pour la modélisation des fronts de changement de phase dans les alliages à mémoire de forme.

1-b Alliages à mémoire de forme

A partir des résultats expérimentaux proposés par André Chrysochoos et Mireille Löbel, j'avais proposé dès 1996 avec Christian Licht un modèle [3, 5] s'inscrivant dans le formalisme des Matériaux Standards Généralisés, et décrivant un comportement anisotherme et non dissipatif des alliages à mémoire de forme. Ce modèle prévoit l'existence potentielle de deux variantes de martensite auto-accommodantes et une transformation de phase isovolumique. Les couplages thermomécaniques autres que la dilatation thermique et le couplage isentropique interviennent cette fois par les valeurs des proportions volumiques de martensite formée (déformation associée à la transformation de phase dans l'équation donnant les contraintes et chaleur latente de changement de phase dans l'équation de la chaleur). A chaque instant et pour chaque élément, les valeurs de proportions volumiques de martensite sont déterminées dans un domaine de transition fonction des valeurs des contraintes et de la température, domaine qui se déduit naturellement de l'expression de l'énergie libre et du potentiel de dissipation choisis. De la même manière que pour les bandes de localisation de la déformation dans les polymères, ce modèle ne prétend pas rendre compte du comportement réel complet (au sens de la cristallographie) de ces matériaux, mais est surtout destiné à mieux cerner l'importance des couplages thermomécaniques dans ce type de comportement. Les résultats obtenus étaient cependant satisfaisants car traduisant correctement les effets de pseudoélasticité ainsi que les évolutions en température. Une série "d'essais numériques" sur une éprouvette de CuZnAl avait également été réalisée en se plaçant le plus près possible des conditions réelles des essais expérimentaux, surtout en ce qui concerne les conditions d'échange avec les mors de la machine de traction et avec l'extérieur. Les résultats obtenus attestaient de la bonne homogénéité des champs de température, de contraintes et des fractions volumiques de phase transformée, ce qui en soit est un résultat rassurant pour les expérimentateurs qui ne disposent que de mesures en surface (température) ou moyenne (effort ou contrainte). D'autres essais avaient été effectués visant plus à utiliser l'outil de simulation numérique pour prévoir le comportement de structures en alliages à mémoire de forme. Le comportement d'un anneau de serrage avait pu être simulé, qui présentait une contraction radiale importante lors d'un réchauffement.
En dépit des résultats obtenus avec ce modèle, résultats somme toute satisfaisants par rapport aux objectifs fixés, nous avons cherché à obtenir une meilleure description du comportement de ces alliages. La notion même de fraction volumique de martensite est liée à l'échelle cristallographique et le modèle précédent l'utilise à l'échelle macroscopique, ce qui est une contradiction en soi.
Une première analyse avait été effectuée durant la thèse de Xavier Balandraud [T2] en suivant une démarche d'homogénéisation à partir d'un v.e.r. d'un polycristal composé de différents grains, chaque grain étant considéré comme un monocristal et possédant une orientation cristallographique donnée. (A cette échelle, la notion de variante de martensite peut avoir un sens). Le modèle introduit dans chaque grain était globalement issu de la même démarche que le précédent, mais avait bénéficié de l'apport de travaux

plus mathématiques sur la transformation de phase. En particulier, l'énergie considérée était une fonction convexe de la déformation, mais non strictement convexe, ce qui permettait de traduire aussi bien les phénomènes de pseudoélasticité que ceux de réorientation. L'étape d'homogénéisation proprement dite se faisait numériquement (par élément finis), en venant évaluer lors de chargements thermomécaniques du v.e.r., les évolutions des variables macroscopiques.

En plus de l'utilisation de cette démarche pour déduire les caractéristiques macroscopiques du polycristal d'AMF à partir de la connaissance du comportement des grains (monocristallins) et de leurs répartition et orientation, une deuxième piste était apparue en réalisant les essais sur une éprouvette monocristalline (aimablement fournie par Christian Lexcellent du LMA de Besançon). Les essais de traction réalisés sur cette éprouvette sont apparus comme fortement hétérogènes et l'utilisation d'une caméra infrarouge a permis de mettre en évidence la propagation de front de changement de phase, phénomène observé au LMGC dans les thèses de Xavier Balandraud et de Sylvain Leclercq, et cité par d'autres auteurs, mais qui est pour nous intimement lié aux échanges thermiques entre l'éprouvette et son environnement. (On avait pu en effet piloter la vitesse de propagation du front et même son sens en jouant uniquement sur les échanges thermiques avec l'extérieur). Ici aussi, des expérimentations utilisant de façon synchronisée une caméra infrarouge pour la mesure des cartes de température et une caméra CCD pour la mesure des champs de déplacement ont été réalisées dans le cadre de la thèse de Silvère Vigneron [T7] (soutenue en décembre 2009) pour disposer de données expérimentales plus précises sur ce problème particulier. Dans cette même thèse, nous avons également tenté de préciser, par dynamique moléculaire et à l'échelle du réseau cristallographique, les passages entre milieux discrets et milieux continus.

Quelques résultats obtenus au cours de la thèse de Silvère Vigneron :

Dans cette thèse, le problème de la localisation du changement de phase dans les AMF a été visité sous deux éclairages différents.

• Une analyse expérimentale utilisant au mieux les compétences de l'équipe ThM2 en matière de mesures de champs, avec une utilisation simultanée et synchronisée d'une caméra infra rouge et d'une caméra CCD (dispositif Synchrocam). L'acquisition des données cinématiques (déplacements) permet en effet d'actualiser les positions des points matériels où sont mesurées les températures, ce qui autorise l'écriture de bilans d'énergie locaux. Nous avons ainsi pu avoir des informations sur les conditions de propagation d'un front de changement de phase dans une éprouvette de CuAlBe sollicitée en traction et réaliser une analyse des champs thermomécaniques à la fois à l'échelle de l'éprouvette (échelle macroscopique fig. 2.a) et à celle d'un point matériel (échelle locale fig. 2.b). L'analyse des diagrammes de transition (espace contrainte température) locaux et globaux force à s'interroger sur la validité des températures de transition déterminées macroscopiquement. En effet, les diagrammes locaux présentent tous des largeurs de domaines plus faibles qu'au niveau macroscopique, la largeur du domaine macroscopique pouvant alors s'expliquer par l'hétérogénéité de la transformation et la diffusion de la chaleur au sein de l'éprouvette. De nombreux essais ont été réalisés avec différentes conditions de chargement (par exemple plusieurs cycles de charge décharge fig. 2.c) pour valider le modèle aussi largement que possible. Enfin, des séries de simulations numériques ont été effectuées en implémentant ce modèle

dans la plateforme LMGC90+MatLib ou dans le logiciel Comsol. Les résultats des simulations sont en très bon accord avec les observations expérimentales.

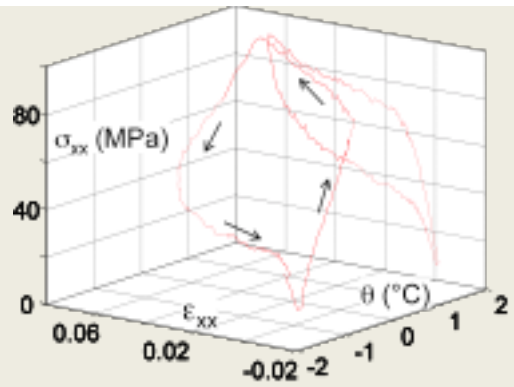


Fig. 2.a Evolution des grandeurs moyennes mesurées sur l'éprouvette et tracées dans l'espace contrainte longitudinale, déformation longitudinale et température. [Vigneron, 2009]

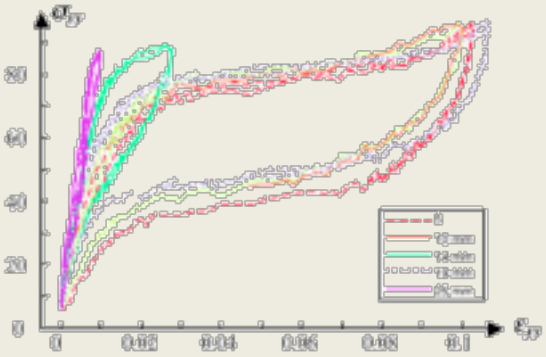


Fig. 2.b Evolution des grandeurs locales mesurées en différents points de l'éprouvette et tracées dans l'espace contrainte longitudinale, déformation longitudinale. [Vigneron, 2009]

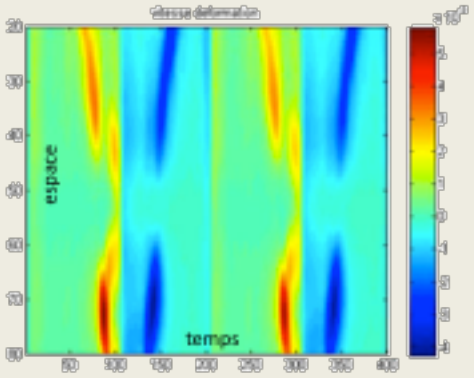


Fig. 2.c Tracé espace temps des vitesses de déformation longitudinales expérimentales lors de la propagation du front (2 cycles de chargement).

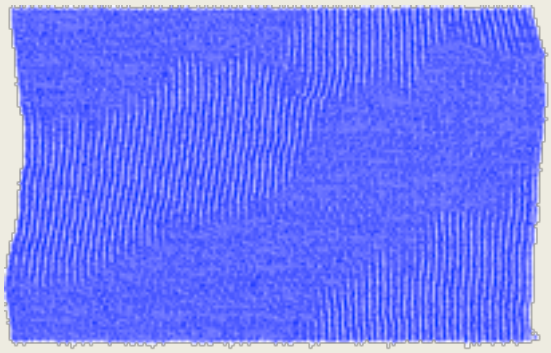


Fig. 2.d Obtention de zones de martensite lors d'un essai de traction par dynamique moléculaire. [Vigneron, 2009]

• Une approche de type Dynamique Moléculaire a également été utilisée à l'échelle cristallographique avec pour but de construire un potentiel d'énergie libre macroscopique cohérent avec une description des interactions au niveau du réseau cristallin. Nous utilisons pour cela des simulations numériques par dynamique moléculaire, en enrichissant la dynamique moléculaire classique par une description thermomécanique au niveau cristallin. La température est définie par une température cinétique (de type granulaire) et tout a été mis en œuvre pour pouvoir imposer des chargements thermomécaniques à l'échantillon choisi. On peut alors voir apparaître dans un essai de traction des variantes de martensite (fig. 2.d), et en calculant des valeurs moyennes sur l'échantillon, évaluer l'énergie libre du matériau au cours du chargement. On a ainsi montré qu'en partant d'une énergie d'interaction atomique non convexe, et en prenant des échantillons contenant quelques centaines d'atomes à quelques milliers, l'énergie libre de l'ensemble se convexifiait.

1-c A propos des phénomènes de localisation

Nous avons donc étudié, pour deux classes de matériaux différentes des phénomènes de localisation dont le trait commun est qu'ils nécessitent tous deux la prise en compte précise des couplages thermomécaniques pour être correctement modélisés. Cette vision de la localisation des champs est devenu un axe de recherche transversal dans l'équipe ThM2 car intéressant bon nombre de matériaux que l'équipe étudie. Il devient en effet systématiquement nécessaire de savoir découpler le comportement intrinsèque du matériau des effets de champs induits par les conditions aux limites et l'environnement.
Cette démarche a trouvé une extension naturelle dans les collaborations menées depuis plusieurs années entre l'équipe ThM2 et la DPAM (Direction de Prévention des Accidents Majeurs) de l'IRSN (Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire). Il s'agit de l'utilisation de méthodes de zones cohésives dans les simulations numériques, et surtout de l'identification expérimentale de ces lois de zone cohésive. Dans les applications intéressant l'IRSN, il s'agit par exemple d'utiliser cet outil pour simuler le comportement à la fissuration d'une gaine de combustible, en prenant en considération la microstructure du matériau constitutif, les couplages thermomécaniques intervenant ainsi que les effets d'environnement et d'évolution dans le temps. Cette collaboration s'est fortement structurée en 2007 par la création d'un Laboratoire Commun CNRS/IRSN nommé MIST (Micromécanique et Intégrité des Structures), laboratoire que j'ai dirigé avec Yann Monerie de 2007 à 2009 (cf. partie VI).

1-d Identification expérimentale de lois de zones cohésives

Utiliser des zones cohésives dans un calcul par éléments finis est une facilité numérique permettant de gérer des phénomènes localisés ou de surface dans un calcul volumique. Mais au-delà de cette astuce numérique se pose le problème de la modélisation et de la validité des lois utilisées dans ces zones cohésives pour relier un effort au saut de déplacement. C'est cette dernière question qui a retenu mon attention à partir de discussions avec Yann Monerie (IRSN), et au travers des différentes collaborations que nous avons eues avec la DPAM de l'IRSN à Cadarache (thèse de Frédéric Perales, stage de master de Marc Charnoz, post-doc de Vincent Richefeu [P2]). Nous avons donc cherché depuis à asseoir l'écriture de ces lois dans un cadre thermomécanique et à trouver des méthodologies expérimentales pour identifier ces lois. Bien évidemment, cette problématique est fortement liée à celle de la localisation mais est en même temps plus générale. On cherche par exemple ici à déduire d'un essai de traction sur une éprouvette d'acier pour emboutissage le comportement intrinsèque du matériau (sous forme d'une loi élastoplastique), les effets de champ ou de structure qui vont donner naissance à un phénomène localisé (ici la striction), tout en isolant les effets d'endommagement de type croissance de cavités qui devront être résumés dans la loi de zone cohésive. Pour ce faire les essais mécaniques avec caméra CCD dans un premier temps, (et bientôt avec caméra infrarouge), fournissent des champs cinématiques (et bientôt thermiques ou énergétiques) dont la richesse a permis d'effectuer des premières tentatives de séparation du comportement volumique (élastoplastique) du matériau et du comportement surfacique (endommagement). Nous avons ainsi retrouvé

expérimentalement les formes de fonctions classiquement utilisées (porte ou triangle) par les numériciens dans les simulations numériques [16]. Il a alors été envisagé de varier les types de comportement et d'aller vers des matériaux plus fragiles, cette extension étant possible grâce à l'acquisition d'une caméra rapide en 2009.

1.e En guise de conclusion

Les études menées dans cette partie relèvent toutes d'une thématique couplages et changements d'échelles, ceci au sens classique de la mécanique des matériaux. Le cadre thermomécanique à partir duquel ces modélisations ont été menées est un outil indispensable pour écrire correctement l'établissement des couplages entre la mécanique et d'autres phénomènes. Une fois ce cadre admis, l'utilisation, à l'échelle dite de la microstructure et (/ou) à l'échelle macroscopique, des lois de comportement qui en découlent permet de mieux appréhender les résultats expérimentaux de plus en plus riches obtenus et d'apporter un éclairage différent sur un certain nombre de phénomènes observés ou de propriétés constatées.

Thème 2 : Mécanique des milieux granulaires

Cette activité s'inscrit dans le cadre d'une action transversale au LMGC sur le thème des *Solides Granulaires*, opération transversale que j'ai animée avec Farhang Radjaï et Saïd El Youssoufi. J'ai participé à la direction de trois thèses sur ce thème :

- Itthichaï Preechawuttipong [T3] (allocation gouvernement thaïlandais) sur le thème modélisation du comportement mécanique de matériaux granulaires cohésifs, soutenue en mai 2002,

- Vincent Richefeu [T4] (Bourse DGA) sur le thème approche par éléments discrets 3D du comportement de matériaux granulaires cohésifs faiblement contraints, soutenue en décembre 2005,

- Emilien Azema [T6] (Bourse SNCF Région Languedoc Roussillon) sur le thème de l'étude numérique de milieux granulaires à grains polyédriques : rhéologie quasi-statique, dynamique vibratoire et application au procédé de bourrage, soutenue en octobre 2007.

Le point commun à ces travaux, et le lien avec ce qui précède, concerne l'utilisation de la simulation numérique pour "ausculter" le comportement mécanique d'un ensemble de particules (ensemble au sens d'un grand nombre) avec comme seule donnée du problème la loi d'interaction entre deux particules. On recherche alors ce que certains nomment comportement collectif mais qui s'apparente tout à fait à un comportement macroscopique ou à des effets de localisation. Cette façon de procéder a connu, notamment sur les matériaux granulaires secs, un grand succès car elle permet de pallier les difficultés d'observation expérimentale directe dans un massif granulaire 3D. On a donc accès via la simulation numérique vitesses et aux efforts pour chaque particule, aux réseaux d'efforts et de contact entre particules, ainsi qu'à leur évolution dans le temps et sous sollicitation. La difficulté réside alors dans le calage des modèles d'interaction entre particules à la petite échelle, et à la comparaison des effets observés macroscopiquement.

Les apports dans cette thématique ont consisté à introduire des phénomènes d'adhésion entre grains, à caractériser la "physique" du comportement des matériaux granulaires cohésifs en comparaison aux secs, à traduire correctement l'adhésion capillaire ainsi que les couplages entre redistribution d'eau aux contacts et mouvement des particules, puis à envisager des calculs 3D prenant en compte des grains polyédriques dont la forme était issue d'une campagne d'imagerie sur grains réels (cas du ballast ferroviaire). Ci-dessous sont listés sous forme de résumés les travaux effectués et les principaux résultats de ces trois thèses.

2-a Thèse d'Itthichaï Preechawuttipong :

Cette thèse s'est focalisée sur l'étude numérique des milieux granulaires cohésifs dans une géométrie bidimensionnelle. Deux modèles d'adhésion ont été implantés, le cadre numérique général étant celui de la méthode de dynamique moléculaire. Le premier modèle est un modèle de type JKR (Johnson, Kendall, Roberts) et le second un modèle simplifié déduit du précédant et nommé modèle d'adhésion géométrique. Dans ce dernier modèle, l'interpénétration δ entre deux particules de rayon r est un indicateur à

la fois du niveau de répulsion et du niveau d'adhésion et la force normale F entre particules est donnée par :

$$F = k\delta + \alpha\dot{\delta} - \gamma\sqrt{r\delta}$$

où k est un coefficient de répulsion (rigidité de répulsion), γ un coefficient d'attraction (énergie d'adhésion) et α un coefficient de viscosité dont l'existence est plutôt liée à des considérations numériques. Ce modèle présente une position d'équilibre δ_{eq} entre deux particules en l'absence d'effort extérieur donnée par : $\delta_{eq} = r(k/\gamma)^2$

L'influence de la cohésion sur les propriétés mécaniques des milieux granulaires a été quantifiée sur des assemblages polydisperses 2D de 4000 particules circulaires, soumis à des chargements mécaniques classiques de compression, de cisaillement ou de traction. Les résultats obtenus montrent que l'adhésion ne modifie pas fondamentalement le caractère inhomogène de la transmission des efforts dans un système granulaire, mais que pour de fortes valeurs de l'énergie d'adhésion, on assiste à un effet de cristallisation du réseau de contacts et d'efforts et à l'apparition de directions de contact particulières. Par ailleurs, l'existence de forces d'adhésion augmente le nombre de coordination et donc la compacité du milieu. Il est à noter que la structuration des réseaux des contacts et des efforts est assez liée au mode de préparation de l'échantillon et à la polydispersité des particules.

Des simulations d'essai de traction sur un milieu cohésif ont été conduites pour caractériser le seuil de rupture de ces matériaux. La valeur du seuil est en fait liée à la valeur d'auto-contrainte générée dans le système au repos. Lors du chargement proprement dit, des fissures se développent et se propagent avec des faciès différents suivant la valeur de l'énergie de cohésion. Ainsi, pour des valeurs fortes, les fissures apparaissent au centre de l'échantillon puis se propagent vers les bords, alors que pour des valeurs faibles, l'échantillon se dégrade progressivement par des fissures apparaissant sur les bords. Dans la majorité des cas les fissures naissent dans les zones de forts cisaillements.

Un autre type d'essai essai, fendage sur un agglomérat rond, a été simulé numériquement pour caractériser les facies de rupture d'un milieu granulaire cohésif. La préparation de l'échantillon conduit à la formation d'agrégats plus ou moins cristallisés à l'intérieur de l'échantillon. Lors de l'essai de fendage les fissures naissent aux interfaces entre agrégats et se propagent parallèlement à la direction de compression (Fig. 4a).

Une comparaison entre une expérience réelle de compression d'un assemblage collé de rouleaux de bois et la simulation numérique a aussi été effectuée. Le calage des différents paramètres du modèle retenu permet de retrouver qualitativement l'évolution de la force moyenne exercée en fonction de la déformation globale de l'échantillon. Le facies de rupture est aussi qualitativement comparable, mais le modèle simple utilisé montre quand même un certain nombre de limitations.

Les différentes études ont porté sur la caractérisation des états d'équilibre et de l'évolution du milieu soumis à divers types de sollicitation. Les résultats intéressants de la thèse sont les suivants :

- mise en évidence de trois régimes d'équilibre caractérisés par l'influence du degré d'adhésion particulaire sur le nombre de coordination, la proportion des contacts de traction et de compression, la pression négative et l'organisation des forces,
- augmentation sensible de la compacité en fonction de l'adhésion avec l'apparition des auto-contraintes dans le régime fortement cohésif,

• faible influence de l'adhésion sur la contrainte de cisaillement lorsque les contraintes sont compressives dans toutes les directions, sauf dans les cas très fortement cohésifs,

• dépendance en loi de puissance du seuil de rupture macroscopique en traction par rapport au seuil d'adhésion entre deux particules,

• initiation et propagation des fissures dans les zones de faible compacité.

2-b Thèse de Vincent Richefeu :

Les travaux réalisés dans cette thèse ont été orientés sur la modélisation du comportement mécanique de matériaux granulaires cohésifs faiblement contraints. L'approche retenue est de type éléments discrets (DEM) en configuration tridimensionnelle. L'objectif final était double ; d'une part, il s'agissait d'aboutir à un outil de simulation numérique qui permet en particulier :

• de prendre en compte différentes lois d'interaction de contact, de frottement et de cohésion (Fig. 3.a),

• de prendre en compte la polydispersité du matériau, mais surtout une distribution inhomogène de la cohésion et notamment de la distribution de l'eau lorsqu'il s'agit de cohésion capillaire,

• de prendre en compte des sollicitations réellement tridimensionnelles, ce qui implique en particulier la prise en compte d'interactions avec des parois de différentes formes,

• de prédire le comportement macroscopique en terme de relations contraintes déformations, mais également les ruptures, leur initiation et leur propagation,

• une préparation aisée des données de simulations à la fois en ce qui concerne les échantillons, les interactions et les sollicitations extérieures, avec des modules de prétraitement appropriés,

• un traitement efficace de l'information en sortie, à la fois à l'échelle macroscopique et à l'échelle de la microstructure, avec des modules de post-traitement appropriés,

• une visualisation claire, à la fois en temps réel et lors du post-traitement, des résultats des simulations en fonction du type de résultat attendu (Fig. 3.b).

D'autre part, cet outil n'étant évidemment pas une fin en soi, le deuxième objectif était d'apporter une contribution à la compréhension du comportement de matériaux granulaires cohésifs. Ceci s'est fait au travers de la validation des outils numériques réalisés durant cette thèse : tapio-K (code de calcul proprement dit) et mgpost (post-traitement et visualisation)

Cette validation a été réalisée sur l'exemple de l'essai de cisaillement direct à la boîte de Casagrande. Elle a porté, d'une part, sur les aspects purement numériques du code de calcul réalisé et, d'autre part, sur la pertinence des lois d'interaction et plus particulièrement de la loi capillaire. Une première investigation expérimentale, à partir de l'essai de cisaillement normalisé, a permis de mettre en évidence la nécessité d'effectuer des essais de cisaillement sous faibles contraintes afin de laisser paraître l'effet de la cohésion capillaire sur des grains de taille relativement importante. Un nouveau dispositif de cisaillement direct faiblement contraint a donc été mis au point en s'inspirant du dispositif normalisé de Casagrande. Une confrontation entre les résultats expérimentaux issus de ce nouveau dispositif et les résultats de simulations a montré une bonne adéquation qualitative et quantitative à l'échelle macroscopique. Par ailleurs, elle a permis la conduite d'une analyse micro-macro en se basant sur une approche théorique. Cette analyse a montré l'importance prépondérante de la densité de ponts liquides dans le matériau et donc de la distribution du liquide.

Les premières applications du code de calcul tapio-K ont été menées de façon prospective. Bien qu'elles n'aient pas toutes été très détaillées, elles ont permis de se rendre compte des possibilités du code de calcul, et plus généralement, d'une approche en éléments discrets intégrant des lois de cohésion pour l'étude des comportements de la matière en grains (en particulier des sols). Les principaux résultats obtenus sont :

Essai de compression simple : cette application a permis d'améliorer les simulations effectuées dans une thèse précédente et de montrer l'importance de la distribution de l'eau à la fois en terme de répartition et de densité des ponts liquides. Elle a montré nettement que le paramètre densité des ponts liquides influence de façon significative les résultats et que son ajustement permet d'approcher les résultats expérimentaux. On a montré que les comparaisons avec l'expérience nécessitent que ces dernières soient réalisées avec une bonne homogénéité de la teneur en eau, plus particulièrement pour les teneurs en eau faibles.

Ecoulement et angle de repos : cette application a permis d'analyser l'influence de la force locale de cohésion et de la distance de rupture sur l'angle de repos. Elle a été menée sur un système de particules, soumis à un écoulement à travers une trappe, en utilisant les lois de cohésion uniforme et capillaire. On a montré que l'indice de cohésion apparaît comme un paramètre pertinent pour l'étude de l'angle de repos d'un matériau granulaire cohésif. Par ailleurs, une analyse qualitative des résultats, sur le débit de matière à travers la trappe, a fait ressortir trois régimes d'écoulement pour les matériaux granulaires cohésifs : les régimes d'écoulements granulaire, aggloméré et plastique. Cette application a montré, encore une fois, que l'introduction de la cohésion entre les grains, et en particulier d'une cohésion capillaire, induit des comportements non triviaux à l'échelle globale. Elle a permis de souligner la différence nette entre le cas sec et le cas humide. Elle a également montré, qu'au delà d'une teneur en eau proche de 0, les propriétés du matériau se stabilisent.

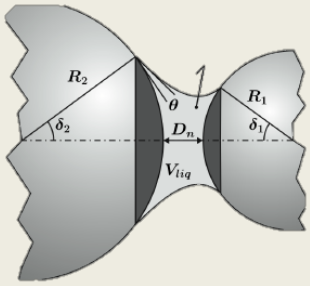


Fig. 3.a Paramètres de description d'un pont liquide. [Richefeu, 2005]

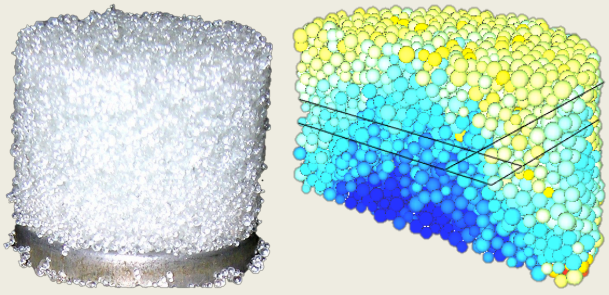


Fig. 3.b Compression verticale d'un échantillon de billes de verre de diamètres compris entre 0,8 mm et 1,3 mm à une teneur en eau w = 3% (couleurs pour les vitesses). [Richefeu, 2005]

Traficabilité d'un engin chenillé : cette application a permis d'étudier la résistance d'un sol à un déplacement horizontal imposé à la chenille. On a montré que cette résistance augmente proportionnellement à la force de cohésion entre les grains. Ce résultat est important car il permet de relier directement la résistance horizontale à la force locale de cohésion. Cette application a également permis d'analyser l'influence de la hauteur de l'échantillon (ou encore de l'épaisseur de la couche de sol) sur les efforts développés dans le milieu et sur la dilatance. Les efforts ne semblent pas affectés par la hauteur de l'échantillon. Par contre, la dilatance semble très liée à cette hauteur.

2-c Thèse d'Emilien Azema :

Ce travail de thèse porte sur la modélisation numérique et l'analyse des mécanismes physiques en jeu lors du procédé de bourrage du ballast ferroviaire. Ce procédé consiste à remettre à niveau la voie suite aux tassements différentiels induits par les circulations des trains. Avec l'augmentation de la vitesse sur rails, la dégradation des voies s'accentue, imposant alors des cycles de maintenance de plus en plus rapprochés. Les moyens techniques et humains mis en jeux lors de ces opérations demandent une logistique élaborée ainsi que de très gros moyens financiers. Dans ce contexte, et dans le but de mettre en place un "procédé de bourrage virtuel", nous avons développé un modèle en éléments discrets par la méthode de dynamique des contacts dans la plateforme LMGC90, modèle qui permet de simuler un cycle complet du procédé composé de l'enfoncement des bras mécaniques, le serrage du ballast sous la traverse et le retrait des bras. Ces simulations prennent notamment en compte la forme polyédrique des grains, ce qui constitue un élément important pour une simulation réaliste de la dynamique du ballast. Une étude détaillée de la rhéologie quasi-statique des matériaux granulaires à grains polyédriques a été ainsi effectuée permettant de mettre en évidence l'origine de la résistance mécanique de ces matériaux liée à la forme facettée des grains (fig. 4.b). La dynamique vibratoire des grains a été explorée en interaction avec un outil vibrant et sous l'effet des vibrations horizontales. Ces études ont permis de proposer une mise à l'échelle de la dynamique en fonction des paramètres de chargement et de mettre en évidence une fréquence caractéristique pour une compaction optimale du milieu granulaire. Ces analyses et des études paramétriques ont permis de proposer des recommandations précises au partenaire SNCF pour améliorer les performances du procédé de bourrage.

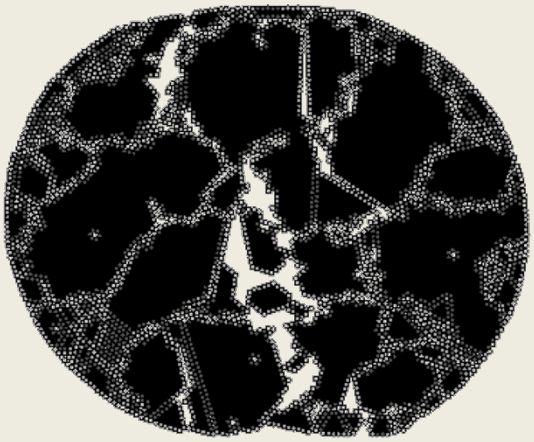


Fig. 4.a Fragmentation d'un milieu granulaire cohésif dans un essai de type brésilien. [Preechawuttipong, 2002]

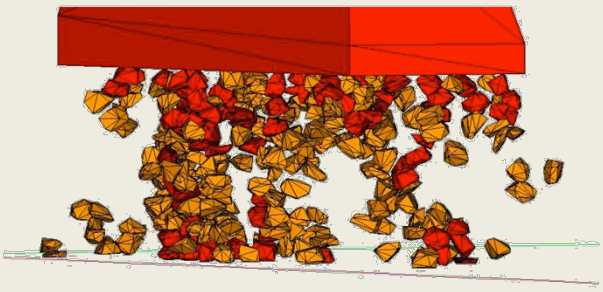


Fig. 4.b Réseau d'efforts dans un ballast ferroviaire au droit d'un blochet (seuls les efforts les plus importants sont représentés). [Azéma, 2007]

Les avancées scientifiques associées à cette recherche partenariale concernent plus généralement la rhéologie des milieux granulaires. D'une part, l'utilisation de solides facettés permet de se rapprocher de la géométrie naturelle des milieux granulaires et de décrire des interactions fines entre grains. D'autre part, la phase d'enfoncement des bourroirs soulève la question du déplacement d'un objet dans un milieu granulaire. Nous avons donc réalisé une série d'étude avec un objet de géométrie plus simple que les bourroirs (un pieu) soumis à une vibration horizontale. Nous avons montré que le

déplacement du pieu se réalise en une première phase de déplacement balistique suivie d'un mouvement diffusif. La phase de serrage a, quant à elle, posé le problème de la dynamique d'un milieu granulaire confiné sous sollicitation harmonique, avec des résultats probants sur les mécanismes de compaction et de blocage (jamming). Enfin, comme la résistance au cisaillement trouve son origine dans l'organisation des grains, nous avons également analysé la microstructure et son évolution. Un résultat important est que la résistance au cisaillement est due à une forte anisotropie des forces aux contacts, induites par la présence de contacts face-face alors que l'anisotropie géométrique (souvent désignée comme responsable de la résistance) se trouve être faible. Cet effet de forme résume bien la différence entre les assemblages de polyèdres et de sphères.

2-d En guise de conclusion

Les travaux développés dans cette thématique ont permis de développer plusieurs "expériences" numériques de mécanique discrète ayant toutes ouvert des pistes de modélisation sur le comportement des matériaux granulaires : compréhension du comportement collectif des milieux granulaires cohésifs (arrangement, texturation, faciès de fissuration), application particulière au cas de la cohésion capillaire, prise en considération de la forme 3D polyédrique des grains de ballast ferroviaire dans les applications de vibration du ballast. Plus généralement, pour les matériaux granulaires ou particulaires et les milieux cellulaires, la simulation numérique de type mécanique discrète a été un formidable accélérateur dans la compréhension de leur comportement mécanique, car elle permet d'aller là où l'expérience réelle ne peut que difficilement donner de résultats à l'échelle de la particule. La confrontation avec la réalité expérimentale reste évidemment indispensable, que ce soit pour calibrer les modèles d'interaction, ou pour valider le comportement dit collectif d'un ensemble de particules.

Thème 3 : Biomécanique de la cellule et des tissus

J'ai initié cette thématique dans les dernières années passées au LMGC et ce à partir de l'expérience acquise dans la thématique matériaux granulaires cohésifs.
Le premier sous-thème concerne une thèse que j'ai encadrée (avec l'agrément du Conseil Scientifique de l'Université Montpellier II) :

- Somchaï Pattana [T5] (allocation gouvernement thaïlandais) sur le thème Division d'un milieu cellulaire sous contraintes mécaniques ; utilisation de la mécanique des matériaux granulaires, soutenue en décembre 2006.

3.a Thèse de Somchaï Pattana

Ce sous-thème concerne la simulation numérique des effets mécaniques liés à la division et à la croissance cellulaires. Il prend sa source dans les travaux réalisés lors de la thèse d'Itthichaï Preechawuttipong (2002), dans laquelle nous avions étudié le comportement mécanique de matériaux granulaires cohésifs par une méthode de dynamique moléculaire. Cette même méthode, avec un modèle d'interaction entre particules de type JKR (Johnson-Kendall-Roberts), a permis dans la thèse de Somchaï Pattana de simuler la division et la croissance cellulaires.
Ces phénomènes ont ici été étudiés en ne retenant qu'une description très partielle et somme toute très peu biologique. Nous avons considéré la cellule comme l'entité de base de la modélisation en reportant dans la définition des interactions tous les phénomènes devant rentrer en jeu. En particulier tout ce qui a trait à la mécanique du cytosquelette est ici absent, car intervenant à une échelle en dessous de celle de l'étude.
La division est donc traitée de façon purement géométrique. Des cinétiques de croissance et de division (traduisant le cycle mitotique) ont été introduites pour mimer le mieux possible les phénomènes biologiques réels (cf. annexe B pour plus de détails).

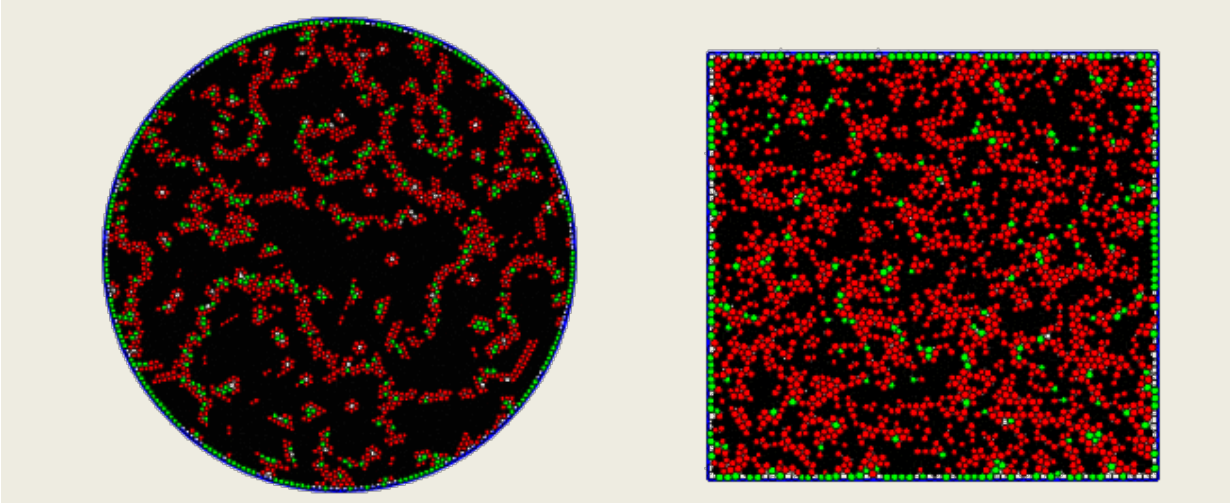


Fig 5 Processus numérique de génération d'un tissu par croissance et division cellulaire, dans une boîte circulaire (gauche) et carrée (droite). Les couleurs représentent le nombre de voisins d'une cellule. Noir : 6 voisins, zone fortement texturée, rouge : 5 voisins, et vert : 4 voisins. [Pattana, 2006]

La génération d'un tissu a ainsi pu être reproduite à partir d'une seule cellule déposée sur un substrat. Une application intéressante a pu être étudiée concernant la croissance de peau en culture. En effet, un certain nombre de publications de biologistes rapporte que, suivant la forme de la boite de culture, la peau obtenue présente des textures différentes. Nous avons donc simulé la croissance d'un tissu dans une boite ronde, puis dans une boite carrée et mis en évidence des arrangements cellulaire effectivement dépendants des conditions aux limites (fig4). Les arrangements diffèrent notamment en termes d'orientation de contact, mais aussi par l'apparition de zone de compacité maximale de taille très différente suivant les formes de boite.

3.b Mécanique de la cellule

Le thème précédent m'a conduit à acquérir un "début de culture" en biologie cellulaire et à participer activement aux recherches menées dans l'opération transversale Mécanique du Vivant du LMGC en collaboration avec Patrick Cañadas (Maître de Conférences au LMGC). Si l'étude des interactions entre cellules permet d'aller vers la formation et le comportement des tissus biologiques, les aspects mécaniques à l'intérieur d'une cellule ne peuvent pas être négligés et offrent de séduisants problèmes de mécanique dès lors qu'il s'agit de modéliser le comportement du cytosquelette, d'en déduire les conditions d'équilibre ou de déséquilibre de la cellule, et de relier tout ceci aux conditions d'adhérence ou de migration d'une cellule sur un substrat ou sur une autre cellule.

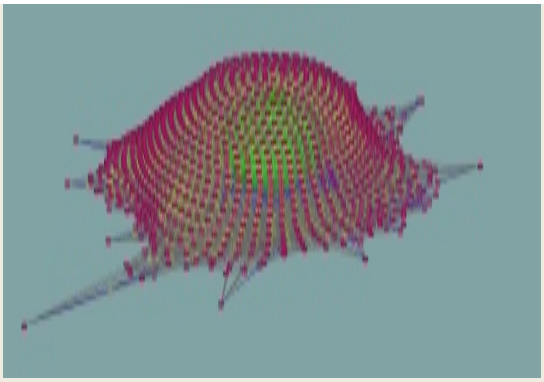


Fig 5.a Etalement "numérique" d'une cellule sur un substrat

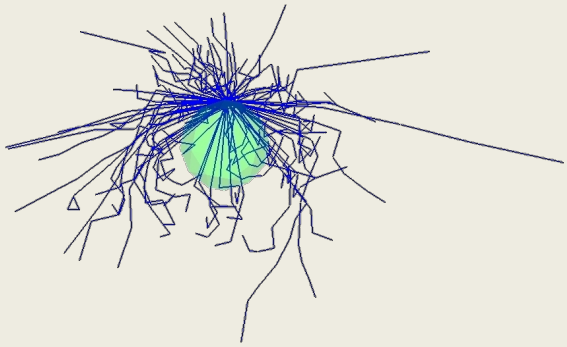


Fig 5.b Réseau de microtubules du cytosquelette

Le Programme Exploratoire PluridiSciplinaire (PEPS) du département ST2I qui nous avait été accordé en 2007* sur ce dernier sujet nous a permis de commencer à travailler avec des biologistes cellulaires de renom (équipe DySAD, Institut Albert Bonniot - INSERM-UJF U823, Grenoble), biologistes qui butent à l'heure actuelle sur la modélisation mécanique de la cellule. La complémentarité des savoir-faire et des compétences est excellente dans ce groupe, et cette première expérience nous a déjà permis d'enrichir considérablement les modèles mécaniques que nous proposions, en précisant les rôles joués par différents constituants, en décrivant la dynamique du processus de réorganisation du cytosquelette, et en formalisant un certain nombre de mécanismes de signalisation biochimiques qui sont des liens essentiels entre effort mécanique ressenti par la cellule et

* Ce PEPS regroupe des personnes du LMGC Montpellier, de l'IAB Grenoble, du LABM Marseille et du LCVN Montpellier

réaction de son cytosquelette. L'étalement d'une cellule a ainsi pu être modélisé numériquement et nous avons pu produire une simulation réaliste pour ce qui concerne les aspects géométrique et mécanique au moins (fig 5.a et 5.b).

Nous avons également sélectionné un petit nombre d'expériences réalisées à l'IAB, expériences d'étalement de cellule sur des supports "patternés", pour lesquelles les biologistes grenoblois sont à même de décrire les modifications du cytosquelette au cours du changement de forme de la cellule et de son étalement sur le substrat. Ce sont ces expériences qui nous ont servi de support pour développer les aspects simulation numérique.

3-c En guise de conclusion

L'étude des influences réciproques entre les efforts mécaniques et les comportement biologiques constitue depuis une dizaine d'années un formidable terrain de jeu pour le mécanicien. Ces études se situent à différentes échelle, des propriétés des filaments d'actine dans le cytosquelette jusqu'aux caractéristiques mécaniques des tissus, voire des organes. La prédiction du caractère évolutif (morphogenèse de tissus en particulier) ainsi que l'évolution (au sens dégradation des cellules ou des tissus) sous contraintes mécaniques sont des enjeux importants, et le mécanicien peut apporter son tribut au sein d'une communauté forcément multidisciplinaire. C'est ce qui a été très modestement tenté dans les travaux mentionnés ci-dessus, en apportant une modélisation mécanique essentiellement par la simulation discrète.

Introduction

Depuis mon arrivée à Grenoble, je me suis engagé dans des collaborations avec des physiciens et des biologistes pour développer les modélisations de biomécanique à l'échelle de la cellule ou du cytosquelette, et disposer d'expériences modèles pouvant être simulées numériquement.
J'ai pu bénéficié d'un environnement propice, tant par des contacts directs (IAB et LiPhy pour l'étalement, la motilité cellulaire, l'Institut Néel, et le LTM pour les problèmes sur les axones des neurones, le LRP pour la constitution du caillot sanguin), qu'au travers de structures comme le Labex Tec21 (www.tec21.eu). J'espère et je souhaite que ces contacts se concrétisent bientôt sous forme d'un véritable travail en collaboration, notamment sur **la motilité cellulaire** et sur **la morphogenèse de tissus**.

D'autre part, les relations qui existent de longue date entre le laboratoire 3SR et le laboratoire LGP2 (Génie des Procédés Papetiers) ont permis de lancer un nouveau projet sur **les matériaux composite biosourcés**. C'est un thème qui nécessite une réflexion autour des couplages, des changements d'échelles, de caractérisation expérimentale et de simulation numérique.

Thème 1 : Matériaux composites biosourcés

1.a Contexte du projet

L'utilisation de polymères issus de ressources renouvelables pour la fabrication de pièces de structure constitue un axe de recherche pertinent dans le contexte actuel du développement durable et de la valorisation des ressources issues du végétal. Les matériaux à matrices thermoplastiques biosourcées font l'objet d'un nombre de travaux croissant. L'enjeu majeur est de mettre en œuvre des matériaux composites à matrice biosourcée (cellulosique ou à base d'amidon) et fibres ligno-cellulosées, dont les propriétés mécaniques sont équivalentes ou supérieures à celles des composites utilisés traditionnellement. Plusieurs verrous scientifiques, principalement liés aux procédés de mise en œuvre, sont associés à cet enjeu :

- Les procédés usuels de mise en forme des polymères ne garantissent pas l'utilisation optimale des performances des matrices biosourcées parce qu'ils ne permettent pas de préserver les propriétés intrinsèques des polymères naturels natifs, comme la cristallinité.
- Les procédés d'élaboration et de mise en forme par voie liquide de type ("Liquid Composite Molding"), garantissent un bon contrôle de l'architecture fibreuse des composites mais ne permettent pas l'utilisation de matrices polymères thermoplastiques offrant de bonnes propriétés mécaniques, comme les polymères semi-cristallins, à cause de leur viscosité bien trop élevée en dessous de la température de fusion des cristallites.

Un levier envisageable pour s'affranchir de ces verrous est d'utiliser le polymère thermoplastique sous forme pulvérulente lors des opérations de mise en forme. Cette voie présente plusieurs avantages. L'utilisation de thermoplastiques sous forme de poudres associées à des procédés de type compaction-frittage particuliers et adaptés peut permettre de conserver les propriétés du polymère natif, notamment sa cristallinité. En outre, dans le cas des composites, la voie pulvérulente, associée une mise en œuvre par compression des poudres peut assurer un placement optimisé des fibres au sein de la poudre lorsqu'elles sont courtes ou bien encore une bonne imprégnation "par voie sèche" de mats ou de tissus.

Les technologies de compression des poudres sont appliqués à de nombreux secteurs tels que les industries mécaniques (poudres métalliques, céramiques), la santé (poudres pharmaceutiques) ou le secteur alimentaire (poudres issues de l'agro-alimentaire). Il s'agit d'agglomérer, par effet de pression, des milieux pulvérulents de sorte à activer le phénomène de cohésion inter-particulaires, soit par adhésion (par contact ou par diffusion ou frittage), soit par enchevêtrement.
Ce projet étudie un procédé de mise en forme par compression-frittage. Ce type de procédé, couramment utilisé en métallurgie des poudres, permet à la fois de contrôler l'architecture fibreuse et de minimiser la température nécessaire à la mise en forme, en conservant ainsi au mieux la structure initiale des constituants.

1.b Compression de poudre d'amidon

Dans le cadre de ce projet, l'amidon a été choisi pour constituer la matrice d'un matériau composite. C'est un matériau très abondant, peu cher et disponible sous forme pulvérulente. Il est couramment utilisé et mis en forme par compression-frittage pour l'industrie pharmaceutique, sans que la résistance mécanique du produit fini soit recherchée.
L'amidon est particulièrement intéressant de par la possibilité de le plastifier en augmentant sa température et sa teneur en eau. Ces propriétés permettent d'envisager un processus de soudage des interfaces entre grains dans le cadre d'une mise en forme par frittage, mais aussi d'obtenir des semi-produits sous forme de plaques, qui seraient appropriés pour une mise en forme de type estampage, moyennant un chauffage léger qui rendrait le matériau mou et plastique sans pour autant perdre la cristallinité.
Un stage de Master (Tanguy Laurencin), en collaboration entre les laboratoires LGP2 et 3SR, a permis de prouver la faisabilité du projet. Avec un procédé de compression en matrice à chaud, une fenêtre de paramètres permettant l'obtention de plaques cohésives à base de poudre d'amidon de maïs a été identifiée. Les échantillons obtenus par ce procédé atteignent des modules élastiques de l'ordre de 2 à 3 GPa, et des résistances à la rupture de l'ordre de 7 à 30 MPa. Ces propriétés sont bien supérieures à celles des films d'amidon obtenus par les procédés ordinaires. Néanmoins, il a été observé que la porosité résiduelle dans les échantillons était de l'ordre de 5 %, et qu'un certain nombre de défauts (microfissures) étaient présents dans les échantillons, ce qui laisse une marge d'amélioration importante.
D'autre part, le laboratoire 3SR vient d'acquérir une machine de soudage par ultrasons, qui permettra, en plus des moyens déjà disponibles actuellement, d'expérimenter l'effet de la compression ultrasonore sur le frittage de la poudre d'amidon. L'excitation, sous charge mécanique, d'un massif de poudre par propagation d'ondes ultrasonores produit un auto-échauffement concentré aux interfaces entre grains, ce qui permet d'une part, de minimiser l'apport d'énergie, et d'autre part, de préserver la structure cristalline au cœur du grain.
Un ingénieur de recherche a également été recruté au début de l'année 2014 dans le cadre d'un projet financé par l'institut Carnot Polynat. Il est chargé, sur une mission de 12 mois, de développer les procédés expérimentaux d'obtention d'échantillons à base de poudres d'amidon. Des échantillons obtenus en compression à chaud et en compression par ultrasons vont être testés par des essais mécaniques en sollicitations cycliques afin de caractériser précisément leur comportement. Des investigations microstructurales par microscopie, microtomographie à rayons X et DSC seront également effectuées afin d'obtenir une base de données expérimentale aussi riche que possible sur les mécanismes de déformation inter-grains et d'évolution structurale intra-grains de ces matériaux.

Thème 2 : Biomécanique de la cellule et des tissus

2.a Brève introduction

Les cellules vivantes, en raison de leur environnement externe et de l'évolution des paramètres physiologiques internes, sont soumises à des stimulations mécaniques fréquentes. De plus, les fonctions cellulaires comme la motilité, la différentiation, l'expression des gènes ou même l'apoptose* dépendent de ces stimuli mécaniques ainsi que des propriétés mécaniques de la cellule et de sa forme géométrique [Lim-2006]. Par exemple, le cisaillement d'un fluide sur les cellules endothéliales active leur rigidification par une réorganisation de leur cytosquelette, elle-même induite par une cascade d'évènements biochimiques [Jen-2000]. Si l'enchainement de ces évènements biochimiques, si complexe qu'il soit, est aujourd'hui bien décrit par les biologistes, la perception du stimuli mécanique par la cellule et la liaison entre les échelles sub-cellulaires et l'échelle de la cellule sont encore des sujets ouverts. Un autre exemple est celui concernant la rigidité du substrat sur lequel adhérent les cellules, rigidité qui peut également complètement modifier leur différentiation [Engler-2006]. On parle ici d'efforts de l'ordre du nanoNewton pour une cellule sur un substrat, voire d'un dixième de nanoNewton pour un contact adhésif individuel, ceci pour des déplacements microniques. L'enjeu pour le mécanicien consiste alors à comprendre comment la cellule, en s'auto-adaptant à son support, peut en "mesurer" sa rigidité [Saez-2007].
Une fois la mécanique de la cellule maitrisée, l'étape suivante consiste à étudier le comportement collectif (au niveau des tissus et des organes) en fonction de l'organisation individuelle des cellules.
On devine bien sûr tout l'intérêt d'une modélisation mécanique, à la fois à l'échelle sub-cellulaire, à l'échelle cellulaire mais aussi à celle du tissu. Ce sont ces différents aspects qui m'attirent dans ce thème.
Par manque de moyens humains et de temps les aspects modélisation du cytosquelette et notamment de l'étalement cellulaire, que j'avais abordés à Montpellier, sont restés jusqu'ici en sommeil.

2.b Mécanique de la cellule

La thèse de Sylvie Jauvert (débutée en 2011) s'attache à obtenir une modélisation des interactions d'une cellule avec son substrat ou avec une autre cellule, en vue de permettre dans un premier temps, la description de la motilité cellulaire, puis en ajoutant les phénomènes de croissance et de division de s'intéresser, à l'échelle du tissu, aux arrangements cellulaires et aux propriétés du tissu, ce qui peut se définir comme la morphogenèse du tissu.

* *Mort cellulaire programmée*

Le modèle d'interaction cellule-substrat déjà utilisé dans la thèse de Somchaï Pattana a donc été repris ici et fortement modifié pour aller jusqu'à une description des liens existants entre la cellule et son substrat (schématisation d'un lamellipode (fig. 6)).

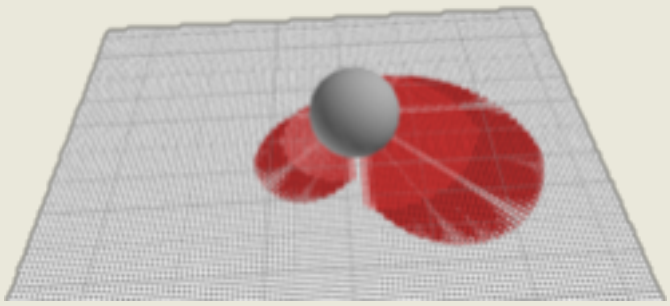


Fig. 6 : Schéma des efforts induits par une cellule migrant sur un substrat (Sylvie Jauvert [17])

Ce modèle permet donc de simuler des marches de cellules, aléatoires ou dirigées. L'intérêt du modèle est aussi de fournir l'évolution de la carte des efforts exercés par la cellule sur le substrat lors de son déplacement, et de la comparer aux résultats expérimentaux disponibles aujourd'hui par des méthodes comme la Microscopie à Force de Traction développée au LiPhy [Peschetola-2013].

2.c Effets mécaniques collectifs

Ces résultats constituent la première étape vers la modélisation d'un comportement collectif de cellules issues de divisions successives. Toujours dans la thèse de Sylvie Jauvert, nous nous intéressons à l'évolution des forces durant une migration collective. Nous nous appuyons en cela sur les travaux expérimentaux de Xavier Trépat [Trépat-2009] qui observe une colonne de cellules en train de migrer (fig. 7).

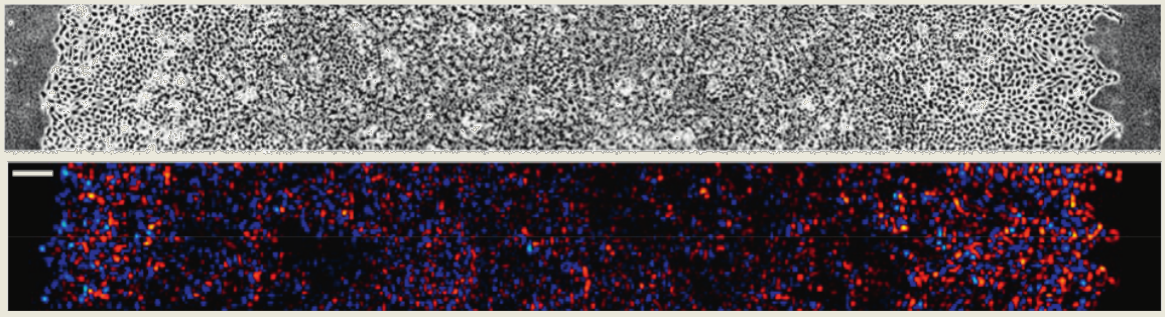


Fig. 7 : Migration collective de cellules et carte d'efforts sur le substrat [Trepat-2009]

Ici aussi, une comparaison des efforts sur le substrat mesurés expérimentalement et issus de la simulation numérique sera effectuée. Cela permettra de mieux comprendre le rôle des cellules "leaders" ou des cellules suiveuses, et de relever les corrélations entre niveaux d'efforts au sein du tissu et présence de division cellulaire. On pense pouvoir donner, avec la simulation numérique (fig. 8) des informations sur les aspects 3D des efforts appliqués ainsi qu'une description précise des efforts attachés à telle ou telle

cellule. Dans l'expérience réelle rien ne permet en effet d'attribuer une valeur d'effort mesurée sur le substrat à une cellule plutôt qu'à ses voisines.

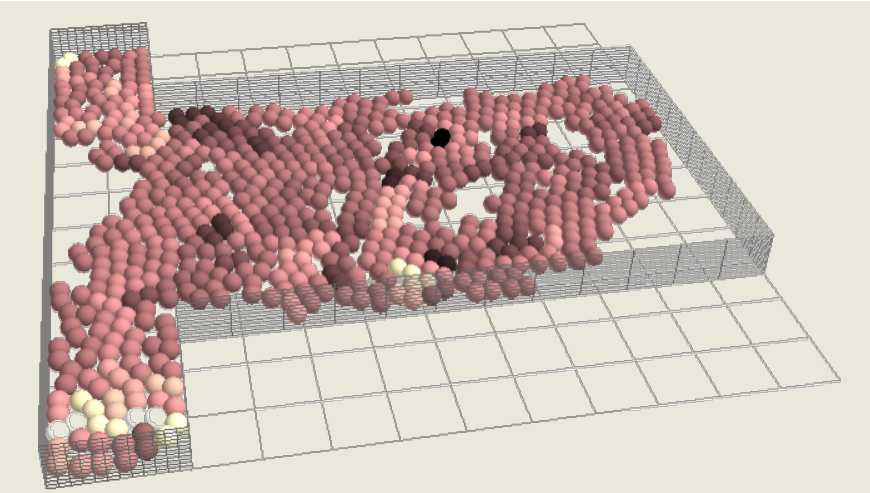


Fig. 8 : Migration collective de cellules sur un substrat (Sylvie Jauvert [17])

2.d Morphogenèse de tissu

Cet axe de recherche concerne de manière générale la définition des interactions entre cellules dans le but de modéliser les mécanismes de croissance, de division cellulaire et d'organisation tissulaire. Tous ces éléments rejoignent la question plus large de la morphogénèse où les aspects mécaniques, sans jouer le rôle essentiel, sont présentés aujourd'hui par les biologistes comme importants. Aux mécanismes de croissance et de division cellulaire déjà présents de façon minimale dans le modèle numérique que j'ai développé, mon projet consiste à rajouter les phénomènes de polarisation (déformation) de la cellule (fig. 9), de sa migration, de ses propriétés d'adhérence et d'agrégation (fig. 10), mais aussi du phénomène d'apoptose, essentiel pour les effets de régulation de population cellulaire et qui font défaut dans les croissances tumorales.

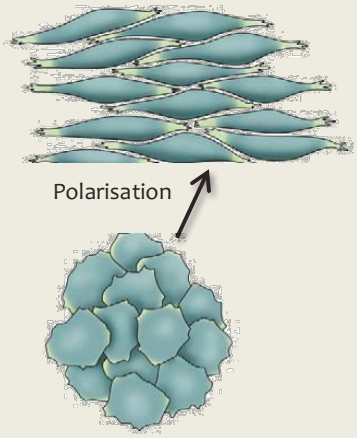


Fig. 9 : Polarisation de cellules [Hardin-2004]

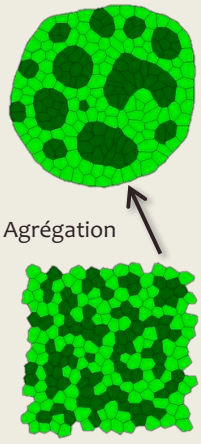


Fig. 10 : Agrégation par affinité [Brodland-2002]

Tous ces mécanismes ont évidement des causes ou (et) des conséquences biologiques qu'il convient d'appréhender. Dans la mesure du possible, en fonction de la nature des phénomènes et de l'échelle à laquelle ils interviennent, il faut les intégrer dans la modélisation soit sous forme de couplages directs, soit par une superposition d'équations de champ, le couplage se faisant alors par une réactualisation numérique des variables concernées. Je pense par exemple à tout ce qui concerne certaines protéines qui vont jouer le rôle de messagers pour activer ou inhiber une action dans des cellules voisines, et plus généralement à tout ce qui concerne la signalisation biochimique.

Une dimension également absente à l'heure actuelle dans le modèle développé concerne les nutriments, dont le flux joue un rôle essentiel pour la croissance et la division des cellules au cœur du tissu, ou en cours de développement.

Toutes ces améliorations vont dans le sens de pouvoir modéliser davantage de couplages entre les effets biologiques et les effets mécaniques. Elles permettront d'aller vers des applications liées à la morphogénèse de tissus ou ayant trait à la cicatrisation ou la formation de tumeurs, et de relier les propriétés mécaniques macroscopiques des tissus à l'agencement mesoscopique cellulaire et aux propriétés biologiques, comme on a pu le faire dans un autre domaine qui est celui des matériaux granulaires.

Quelques premiers résultats montrent par exemple des simulation d'amas cellulaires obtenus par croissance et division de cellules "souches", et permettent d'obtenir des agrégats cellulaires lâches à denses en fonction du choix des paramètres d'interaction entre les cellules (fig. 11). L'intérêt majeur est de pouvoir suivre la constitution du milieu cellulaire à la lumière de l'évolution des réseaux des efforts et de contacts entre cellules. C'est notamment dans ces situations que l'ajout des couplages mécano-biologiques mentionnés plus haut permettra d'avoir une véritable "valeur ajoutée" de la simulation numérique.

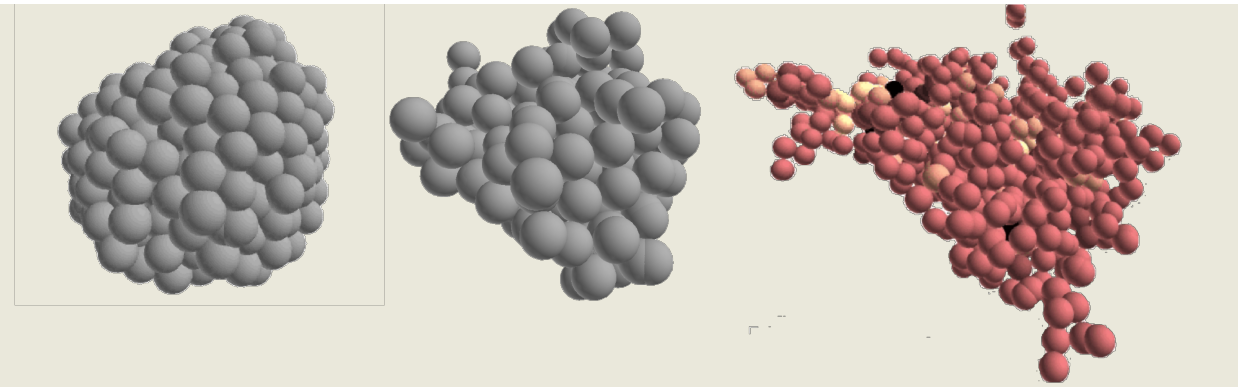


Fig. 11 : Agrégats numériques de différentes densités

On peut également s'intéresser à la croissance de tissu en milieu géométriquement contraint comme ici (fig. 12) un amas cellulaire dans un réseau de fils élastiques. On ouvre là une porte vers la compréhension ou la prédiction de la colonisation par des cellules de milieux support.

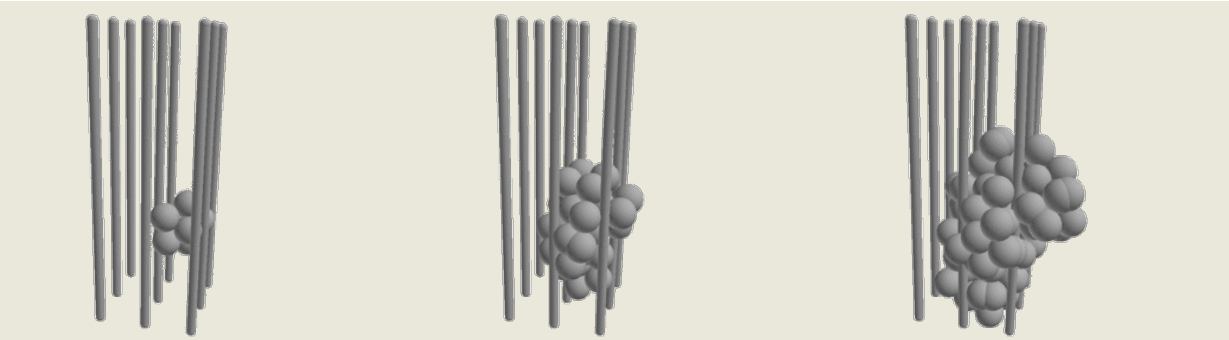


Fig. 12 : Croissance d'un agrégat cellulaire dans un réseau de fils élastiques

Enfin, et toujours concernant le thème morphogenèse des tissus, je souhaiterais aussi aller vers les thématiques liées à la différentiation cellulaire dans les végétaux pour modéliser la croissance d'apex ou la création des nervures ou des "veinages" des feuilles (fig. 13), tout ceci en relation avec la stabilité et les fonctions mécaniques des arbres, des tiges ou des feuilles.

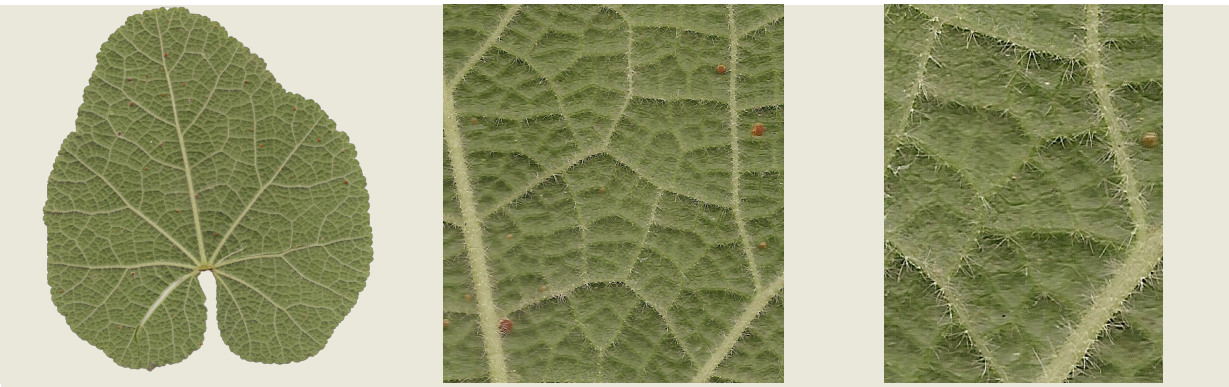


Fig. 13 : Feuille de rose trémière (Alcea Rosea) et réseau hiérarchique des nervures

Il existe un certain nombre de travaux de biologistes et de physiciens sur la question mais qui ne font peut-être pas assez de lien entre effets mécaniques et développement du tissu.

Références extérieures de la partie "Pistes de Recherches"

Thème 2 : Biomécanique de la cellule et des tissus

[Brodland-2002] Brodland, W., Veldhuis, J. *Computer simulations of mitosis and interdependencies between mitosis orientation, cell shape and epithelia reshaping*. J. of Biomechanics, 2002, 35, 673-681.

[Engler-2006] A. J. Engler, S. Sen, H. L. Sweeney, and D. E. Discher. *Matrix elasticity directs stem cell lineage specification*. Cell, 2006, 126(4) : 677–689.

[Hardin-2004] Hardin, J., Walston, T. *Models of morphogenesis: the mechanisms and mechanics of cell rearrangement*. *Current Opinion in Genetics & Development*, 2004, 14, 399-406.

[Jen-2000] Jen, C., Jhiang, S.-J., and Chen, H.-I. *Cellular responses to mechanical stress: invited review: effects of flow on vascular endothelial intracellular calcium signaling of rat aortas ex vivo*. J. App. Physiol., 2000, (4):1657-1662.

[Lim-2006] Lim, C., Zhoua, E., and Quek, S. *Mechanical models for living cells - a review*. J. Biomechanics, 2006, 39 : 195-216.

[Peschetola-2013] V. Peschetola, V. M. Laurent, A. Duperray, R. Michel, D. Ambrosi, L. Preziosi, and C. Verdier. *Time-dependent traction force microscopy for cancer cells as a measure of invasiveness*. Cytoskeleton, 2013, 70(4) : 201–214.

[Saez-2006] Saez, A., Ghibaudo, M., Buguin, A., Silberzan, P. and Ladoux, B. *Rigidity-driven growth and migration of epithelial cells on microstructured anisotropic substrates*. PNAS, 2006, 104, 8281-8286.

[Trépat-2009] Trepat, X.; Wasserman, M.; Angelini, T.; Millet, E.; Weitz, D.; Butler, J. and Fredberg, J. *Physical forces during collective cell migration*, 2009, Nat Phys 5, 426–430.

Revues à comité de lecture

1 R. Peyroux (1992) Modélisation du comportement élastique de matériaux composites à fibres courtes, Revue des composites et des matériaux avancés, vol. 2 (n° 1), 55-78

2 R. Peyroux, C. Licht (1993) Homogenization in Thermoelasticity – Application to composite materials, Journal de Physique IV, Vol. 3-C7, 1623-1626.

3 R. Peyroux, A. Chrysochoos, C. Licht, M. Löbel (1996) Phenomenological Constitutive Equations for Numerical Simulations of SMA's Structures. Effects of Thermomechanical Couplings, Journal de Physique IV, Vol. 6-C1, 347-356.

4 A. Chrysochoos, R. Peyroux (1997) Modélisation numérique des couplages en thermomécaniques des solides, Revue Européenne des éléments finis, vol. 6 (5-6), 673-724

5 A. Chrysochoos, R. Peyroux (1998) Analyse expérimentale et modélisation numérique des couplages thermomécaniques dans les milieux solides, Revue Générale de Thermique, vol. 37 (7), 582-606

6 R. Peyroux, A. Chrysochoos, C. Licht, M. Löbel (1998) Thermomechanical couplings and pseudoelasticity of shape memory alloys, International Journal of Engineering Science, vol. 36 (4), 489-509

7 X. Balandraud, A. Chrysochoos, S. Leclercq, R. Peyroux (2001) Effet du couplage thermomécanique sur la propagation d'un front de changement de phase (Influence of the thermomechanical coupling on the propagation of a phase change front), Comptes Rendus de l'Académie des Sciences - Séries IIB - Mechanics, vol. 329 (8), 621-626

8 A. Chrysochoos, C. Licht, R. Peyroux (2003) Une modélisation thermomécanique unidimensionnelle de la propagation d'un front de changement de phase dans un monocristal d'AMF (A one-dimensional thermomechanical modelling of phase change front propagation in a SMA monocrystal), Comptes Rendus de l'Académie des Sciences - Series IIB - Mechanics, vol. 331 (1), 25-32

9 E. Azéma, F. Radjai, R. Peyroux, F. Dubois, G. Saussine (2006) Vibrational dynamics of confined granular materials, Physical Review E, vol. 74.3, 1-10

10 I. Preechawuttipong, P. Ingsuwan, R. Peyroux (2006) Crack nucleation and propagation in rounded cohesive granular media, Strength, Fracture and Complexity, vol. 4 (3), 161-168

11 I. Preechawuttipong, R. Peyroux, F. Radjai, W. Rangsri (2007) Static states of cohesive granular materials, Journal of Mechanical Science and Technology, vol. 21.12, 1957-1963.

12 E. Azéma, F. Radjai, R. Peyroux, G. Saussine, (2007) Force transmission in a packing of pentagonal particles, Physical Review E, vol. 76.1, 1-13

13 E. Azéma, F. Radjai, R. Peyroux, V. Richefeu, G. Saussine (2008) Short-time dynamics of a packing of polyhedral grains under horizontal vibrations, Eur. Phys. J. E 26.3, 327–335

14 V. Richefeu, M.S. El Youssoufi, R. Peyroux, F. Radjai (2008) A model of capillary cohesion for numerical simulations of 3D polydisperse granular media, Int. J. Numer. Anal. Meth. Geomech., vol. 32 (11), 1365-1383.

15 A. Chrysochoos, V. Huon, F. Jourdan, J.M. Muracciole, R. Peyroux, B. Wattrisse (2010) Use of Full-Field Digital Image Correlation and Infrared Thermography Measurements for the Thermomechanical Analysis of Material Behavior, Strain, 46-1, pp. 117-130.

16 V. Richefeu, A. Chrysochoos, V. Huon, Y. Monerie, R. Peyroux, B. Wattrisse, (2012) Towards local identification of cohesive zone models using digital image correlation, European Journal of Mechanics A/Solids 34, pp.38-51.

17 S. Jauvert, R. Peyroux, V. Richefeu (2013) A mechanical model for cell motility and tissue morphogenesis, Computer Methods in Biomechanics and Biomedical Engineering, vol. 16.

Ouvrages ou chapitres d'ouvrages

18 P. Alart, X. Balandraud, A. Chrysochoos, C. Licht, O. Maisonneuve, S. Pagano, R. Peyroux, B. Wattrisse (2000) Multiscale thermomechanical Approaches to SMA Behaviour, in: Continuum Thermomechanics dedicated to Paul Germain's Anniversary, G. Maugin, Drouot, F. Sidoroff Ed(s), Kluwer, 247-264

19 F. Radjai, I. Preechawuttipong, R. Peyroux (2001) Cohesive granular texture, in: Lecture Notes in Physics, Volume 568, Continuous and discontinuous modelling of cohesive-frictional materials, P.A. Vermeer, S. Diebles, W. Ehlers, H.J. Hermann, S. Luding, E. Ramm Ed(s), Springer, Berlin, 149-162

20 R. Peyroux, C. Mabru (2004) Thermomechanical couplings and scale transitions in Mechanics of Materials, in: Novel approaches in civil engineering, M. Frémond, F. Maceri Ed(s), vol. 14, Springer-Verlag, 233-243

21 A. Chrysochoos, C. Licht, R. Peyroux (2005) Propagation of phase change front in monocrystalline SMAs, in: Mechanical modelling and computational issues in civil engineering, M. Frémond, F. Maceri Ed(s), vol. 23, Springer, Berlin, 369-378

22 R. Peyroux, U. Stefanelli (2006) Analysis of a 1D thermoviscoelastic model with temperature dependant viscosity, in: Dissipative phase transitions, P. Colli, N. Kenmochi, J. Sprekels Ed(s), vol. 71, Series on Advances in Mathematics for Applied Sciences, World Science Publishing.

Thèses ou habilitations

23 R. Peyroux (1990) Caractéristiques thermoélastiques de matériaux composites à fibres courtes, Thèse de l'Université Montpellier 2, dir. P. Suquet.

Colloques avec actes

24 R. Peyroux, P. Suquet (1989) Caractéristiques thermoélastiques d'un composite à fibres courtes, 9ème Congrès Français de Mécanique, Metz, 5-8.9.89 Association Universitaire de Mécanique Ed(s), 394-395

25 R. Peyroux, C. Licht (1993) Homogenization in Thermoelasticity – Application to composite materials, 3rd European Conference on Advanced Materials and Processes, Paris, 08-10/06/93.

26 A. Chrysochoos, R. Peyroux (1996) conférence invitée : Modélisation numérique des couplages en thermomécaniques des solides, 3ème Ecole d'été GUT-CET, Porquerolles, 1-6/07/96

27 F. Meissonnier, R. Peyroux (1996) Passage micro-macro en thermoélasticité ; application à la prédiction des contraintes d'origine thermique et de l'endommagement dans les matériaux composites, Colloque Mecamat'96, Aussois, 29/01-01/02/1996 G. Cailletaud Ed(s), 174-178

28 F. Meissonnier, R. Peyroux, A. Chrysochoos (1996) Finite element analysis of strain localization induced by thermomechanical couplings in a Kelvin-Voigt behaviour model, ESDA'96, ASME International Conference, Montpellier, 1-4.7.96 R. Ohayon, A. Faghri, A. Chrysochoos, (pub.), 207-213

29 R. Peyroux, A. Chrysochoos, C. Licht, M. Löbel (1995) Phenomenological Constitutive Equations for Numerical Simulations of SMA's Structures. Effects of Thermomechanical Couplings, International Seminar on Mechanics and Mechanisms of Solid-Solid Phase Transformations (MECAMAT 95), La Bresse, 16-19/04/1996.

30 A. Chrysochoos, R. Peyroux (1997) conférence invitée : Couplages thermomécaniques dans les matériaux solides. Partie I : cadre thermodynamique, outils expérimentaux, essais et résultats, journée GUT-SFT, 28.5.97 15 pages

31 R. Peyroux, A. Chrysochoos (1997) conférence invitée : Partie II : Couplages thermomécaniques et homogénéisation; quelques applications, journée GUT-SFT, 28.5.97 18 pages

32 X. Balandraud, A. Chrysochoos, C. Licht, R. Peyroux (1998) Poster : Homogénéisation numérique des alliages à mémoire de forme, Ecole d'Eté "Méthodes d'homogénéisation en Mécanique des Matériaux", La Londe les Maures, 23.8-4.9.1998

33 X. Balandraud, A. Chrysochoos, R. Peyroux (1998) Homogénéisation numérique des alliages à mémoire de forme, Colloque National MECAMAT 98, Aussois, 26-29.1.98 C. Prioul, P. Bompard Ed(s), 129-132

34 A. Chrysochoos, R. Peyroux (1998) Conférence invitée : Modélisation numérique des couplages en thermomécanique des solides, 4ème Ecole d'Eté GUT-CET, Porquerolles, 25-30.5.98 1-50

35 X. Balandraud, A. Chrysochoos, C. Licht, R. Peyroux (1999) Poster : Etude thermomécanique d'un monocristal d'alliage à mémoire de forme en vue de l'homogénéisation d'un polycristal, Colloque national MECAMAT, Aussois, 25-28.1.99 210-213

36 A. Chrysochoos, R. Peyroux (2000) Conférence invitée : Modélisation numérique des couplages thermiques, mécaniques et chimiques dans les écoulements industriels, 5ème Ecole d'Eté GUT-CET, Porquerolles, 25-30.6.00 1-45

37 I. Preechawuttipong, R. Peyroux, F. Radjai (2000) Etude numérique de l'influence de la cohésion sur la texture de milieux granulaires, Colloque Physique et Mécanique des Matériaux Granulaires, Champ sur Marne, 5-7.09.00 Ecole Nationale des Ponts et Chaussées Ed(s), 273-278

38 I. Preechawuttipong, R. Peyroux, F. Radjai (2001) Microscopic features of cohesive granular media in "Powders and Grains", 4th International Conference on Micromechanics of Granular Media, Powders and Grains 2001, Sendai, Japon, 21-25.05.01 Y. Kishino Ed(s), Balkema, Lisse, (pub.), 43-46

39 I. Preechawuttipong, R. Peyroux, F. Radjai (2001) Poster : Etude numérique de l'influence de l'adhésion sur la texture des milieux granulaires, Colloque MECAMAT, Aussois, 29.1-1.2.01 C. Licht, C. Mabru, R. Peyroux Ed(s), 251-254

40 L. Stainier, F. Dubois, R. Peyroux (2003) Une bibliothèque portable de modèles constitutifs pour la mécanique non-linéaire des solides: concepts et implémentation, 6ème Colloque national de l'association Calcul des Structures et Modélisation, Giens, 05.03

41 L. Stainier, F. Dubois, R. Peyroux (2005) Algorithmic strategies for the numerical simulation of thermomechanical coupled behaviour in viscoelastic materials, Int. Conf. on Computational Methods for Coupled Problems, Barcelona.

42 R. Peyroux, V. Richefeu, M.S. El Youssoufi, C. Bohatier (2005) CD-Rom : Analyse micro-macro d'essais de cisaillement à la boîte de Casagrande. Expérimentation et simulation par éléments discrets 3D, 17ème Congrès Français de Mécanique, Troyes, 29.08-02.09.05 6p

43 V. Richefeu, M.S. El Youssoufi, R. Peyroux, C. Bohatier (2005) Frictional contact and cohesion laws for Casagrande's shear test on granular materials - Comparison with experiments, Powders and Grains 2005, Stuttgart, 18-22.07.05 Garcia-Rojo, et al. Ed(s), Balkema, Rotterdam, (pub.), 509-512

44 V. Richefeu, M.S. El Youssoufi, R. Peyroux, C. Bohatier (2005) Poster : Résistance au cisaillement de matériaux granulaires humides. Expérimentations et simulations numériques 3D-DEM, Colloque Lagrange "Modélisation des interactions multi-corps", Montpellier, 6-7.06.05

45 I. Preechawuttipong, P. Ingsuwan, R. Peyroux, S. Jacque (2005) Crack propagation mechanisms in rounded cohesive granular media, Int. Cong. Fracture, Turin, pp 88-93

46 S. Pattana, R. Peyroux (2006) Modélisation des effets mécaniques accompagnant la division et la croissance cellulaire, Matériaux 2006, Dijon, 13-17.11.06

47 E. Azéma, F. Radjai, R. Peyroux, G. Saussine (2007) Dynamique d'un milieu granulaire soumis à des vibrations horizontales - Simulations numériques 3D, 18ème Congrès Français de Mécanique, Grenoble, 27-31.08.07, CD-Rom

48 E. Azéma, F. Radjai, R. Peyroux, G. Saussine (2007) Transmission des efforts dans un milieu composé de grains sphériques, Science et technologie des poudres et poudres et matériaux frittes, Albi, 23.25.05.07, CD-Rom

49 E. Azéma, F. Radjai, R. Peyroux, G. Saussine (2007) Influence of particle shape on shear stress in granular media, Traffic and Granular Flow 2007, Orsay, 20-22.06.07 9 p

50 R. Peyroux, S. Pattana (2007) Modelling the mechanical effects accompanying growth and division of cells, 2nd European Meeting on Cell Mechanics (CellMech 2007), Barcelone, Espagne, 26-28.09.07

51 G. Saussine, E. Azéma, P.E. Gautier, R. Peyroux, F. Radjai (2008) Numerical modeling of the tamping operation by Discrete Element Approach, World congress on rail research 08, Corée, 08

52 E. Azéma, F. Radjai, R. Peyroux, F. Dubois, G. Saussine (2008) Vibrational dynamics of 3D granular media composed with polyhedral grains, IX Congreso de Geotecnia, Sociedad Colombiana de Geotecnia, Bogota, Colombie, 08

53 V. Richefeu, A. Chrysochoos, V. Huon, Y. Monerie, R. Peyroux, B. Wattrisse, (2008) Cohesive-zone model identification using digital image corrélation, Photomechanics 2008, Loughborough, UK, 14

54 S. Vigneron, A. Chrysochoos, R. Peyroux, B. Wattrisse (2009) Poster : Approche par dynamique moléculaire du changement de phase dans les alliages à mémoire de forme, Colloque National Mecamat 2009, Aussois, 26-30.01.09

55 S. Vigneron, A. Chrysochoos, R. Peyroux, B. Wattrisse (2009) Analyse énergétique de la localisation du changement de phase dans un AMF monocristallin, 19ème Congrès Français de Mécanique, Marseille, 24-28.08.09, CD-Rom

56 A. Chrysochoos, S. Vigneron, R. Peyroux, B. Wattrisse (2010) Multiscale energy analysis of phase change localization in monocrystalline shape memory alloys, ICEM14, Poitiers, 4-9.07.10, CD-Rom

57 Peyroux R. (2010) Numerical simulation of mechanical effects accompanying division and growth of cells, in: CD, ECCM2010, European Conference on Computational Mechanics, Paris, 16-21.05.10

58 S. Jauvert, R. Peyroux, V. Richefeu : Un modèle mécanique pour la motilité cellulaire et la morphogenèse de tissus, 38ème congrès de la Société Française de Mécanique, Marseille, 4-6.9.2013.

Colloques sans actes

59 R. Peyroux, C. Licht (1993) Numerical simulation and homogenization in thermoelasticity, from microscopic to macroscopic in mechanics of materials (First Forum of Young European Researchers), Liège, Belgique, 18-23.7.93

60 M. Löbel, A. Chrysochoos, R. Peyroux (1996) Analyse expérimentale des couplages thermomécaniques dans les AMF, Colloque CARMA, Sophia Antipolis, 10.96

61 P. Alart, X. Balandraud, A. Chrysochoos, F. Lebon, C. Licht, O. Maisonneuve, F. Meissonnier, S. Pagano, R. Peyroux (1997) Modélisation numérique des AMF au LMGC, Journée thématique CSMA "Modélisation numérique des alliages à mémoire de forme", Montpellier, 25.9.97

62 R. Peyroux (2000) Thermomecanical couplings and scale transitions, Colloquium Lagrangianum, Taormina, Italie, 7-9.12.00

63 A. Chrysochoos, C. Licht, R. Peyroux (2001) Propagation of phase change front in monocrystaline SMA'A, Colloquium Lagrangianum 2001, Le Mont Saint Michel, 8-10.11.01

64 A. Chrysochoos, C. Licht, R. Peyroux (2001) Propagation de fronts de changement de phase dans un monocristal d'alliage à mémoire de forme, Colloquium Lagrangianum 2001, Le Mont-Saint-Michel, 8-10.11.01

65 A. Chrysochoos, R. Peyroux (2002) A simple thermomecanical modelling of phase change front propagation in SMA, Colloquium Lagrangianum Materiali a funzioni multiple, Castel del Monte e Castello Svevo di Trani, Italie, 9-11.06.02

66 R. Peyroux (2002) Cohesive granular materials, Colloquium Lagrangianum, Ravello, Italie, 7-9.11.02

67 R. Peyroux, A. Chrysochoos, C. Licht (2002) Thermomechanical approach to phase change front propagation in SMA monocristals, Nato Conference New Trends in Phase transformations and applications to smart structures, Metz, 23-26.04.02

68 F. Auricchio, L. Petrini, R. Peyroux (2003) Modeling shape memory alloys: dissipative and non-dissipative behaviors, AIMETA03, XVI Congresso AIMETA di Meccanica Teorica e applicata, Ferrara, Italie, 9-12.09.03

69 V. Richefeu, M.S. El Youssoufi, R. Peyroux, C. Bohatier (2004) Simulation 3D du cisaillement d'un milieu granulaire cohésif, GdR - MIDI, ESPCI, Paris, 09.01.04

70 R. Peyroux, A. Chrysochoos, B. Wattrisse (2005) Invitation : Thermomechanical couplings and localization phenomena in polymers and shape memory alloys, Euromech 474, Material instability in coupled problems, Troyes, 2005

71 E. Azéma, F. Radjai, R. Peyroux, G. Saussine (2006) Transmission des forces dans des assemblages polygones, Réunion du Gdr Midi, Carry le Rouet, 29-31.05.07

72 E. Azéma, F. Radjai, R. Peyroux, G. Saussine (2006) Compaction of confined granular materials under horizontal vibration - Application to ballast, DYGRAM, Rennes

73 E. Azéma, F. Radjai, R. Peyroux, G. Saussine (2006) Simulations numériques du bourrage du ballast ferroviaire, Colloque Laboratoire Lagrange, Montpellier

74 E. Azéma, F. Radjai, R. Peyroux, G. Saussine (2006) Distribution des efforts dans un milieu granulaire composé de grains non sphériques, Réunion du Gdr Midi, Carry le Rouet

75 E. Azéma, F. Radjai, R. Peyroux, G. Saussine (2007) Compaction d'un milieu granulaire par vibration, Réunion du Gdr Midi, Paris

76 E. Azéma, F. Radjai, R. Peyroux, G. Saussine (2007) Simulations numériques 2D-3D de milieux granulaires. Grains non sphériques et applications au Ballast, Doctiss07, Journées Ecole Doctorale I2S, Montpellier

77 E. Azéma, F. Radjai, R. Peyroux, G. Saussine (2007) CDrom : Transmission des forces dans un milieu composé de grains non sphériques, Symposium Science et Technoloqie des Poudres, Albi, 23-25.05.07

78 G. Frasca, F. Gazeau, R. Peyroux, C. Wilhelm (2007) Living cells organization under magnetic constraint: an approach to cell-to-cell interactions, Réunion du GdR Physique de la cellule au tissu, Arles, 22-24 novembre 2007

79 R. Peyroux, V. Richefeu, A. Chrysochoos, F. Dubois, V. Huon, Y. Monerie, B. Wattrisse (2007) Vers une identification par mesure de champs de lois de zones cohésives, Journée Scientifique Lagrange, Marseille, 30.03.07

80 R. Peyroux (2007) Expérimentation, modélisation et simulations numériques autour des matériaux granulaires, Séminaire du Laboratoire TREFLE, Bordeaux.

81 P. Cañadas, B. Maurin, R. Peyroux (2009) *Modélisation cellulaire par systèmes précontraints*, Journée du GDR Mécanotransduction : déterminants et implications, Marseille, 11-12.06.09

82 Peyroux R. (2010) Numerical simulations of mechanical effects accompanying division and growth of cells, DySCo Workshop 2010, Sautet Lake, France, 27-28.09.10

Thèses et stages post-doctoraux encadrés

T1 - F. Meissonnier (1996) Couplages thermomécaniques et homogénéisation, Thèse de l'Université Montpellier II, dir. C. Licht, R. Peyroux

T2 - X. Balandraud (2000) Changement de phase et changement d'échelle dans les alliages à mémoire de forme, Thèse de Doctorat de l'Université Montpellier II, dir. A. Chrysochoos, C. Licht, R. Peyroux.

T3 - I. Preechawuttipong (2002) Modélisation du comportement mécanique de matériaux granulaires cohésifs, Thèse de Doctorat de l'Université Montpellier II, dir. F. Radjai, R. Peyroux

T4 - V. Richefeu (2005) Approche par éléments discrets 3D du comportement de matériaux granulaires cohésifs faiblement contraints, Thèse de doctorat de l'Université Montpellier II, dir. M.S. El Youssoufi, C. Bohatier, R. Peyroux

T5 - S. Pattana (2006) Division d'un milieu cellulaire sous contraintes mécaniques. Utilisation de la mécanique des matériaux granulaires, Thèse de doctorat de l'Université Montpellier II, dir. R. Peyroux

T6 - E. Azéma (2007) Simulations Numériques de Milieux Granulaires Composés de Grains Polyédriques : Caractérisation, Vibration & Compaction. Application au ballast, Thèse de doctorat de l'Université Montpellier II, dir. F. Radjaï, R. Peyroux

T7 - S. Vigneron (2009) Analyse thermomécanique multiéchelle de la transformation de phase dans les alliages à mémoire de forme, dir. A. Chrysochoos, R. Peyroux, B. Wattrisse

T8 – S. Jauvert (2011->) Aspects mécaniques du comportement de tissus biologiques. Application à la morphogénèse de tissus et à leur évolution sous chargement mécanique, dir. R. Peyroux.

P1 - G. Rambert : post-doc financé par ALCAN sur la modélisation numérique de murs maçonnés. (2003-2005)

P2 – V. Richefeu : post-doc financé par l'IRSN sur l'identification expérimentale de modèles de zones cohésives. (2006-2008)

P3 – A. Regazzi : post-doc financé par l'Institut Carnot Polynat sur la mise en forme de matériaux composites biosourcés. (2014-2015)

IV - Encadrement de doctorants et de post-doctorants

Encadrement de thèses

Thème Couplages Thermomécaniques

Franck Meissonnier (1996) Couplages thermomécaniques et homogénéisation, dir. C. Licht (50%), R. Peyroux (50%). Bourse Ministère.

Résumé : Nous étudions le comportement thermomécanique des milieux hétérogènes à l'aide d'une méthode d'homogénéisation. La modélisation du comportement thermomécanique de chacun des constituants du milieu hétérogène est obtenue en utilisant le formalisme des matériaux standard généralisés. Les problèmes issus de l'homogénéisation sont résolus par des techniques numériques que l'on présente en détail. Notre contribution touche plusieurs domaines et aspects de la thermomécanique: thermoélasticité linéaire couplée, thermoviscoélasticité linéaire couplée de type Kelvin-Voigt et thermoélasticité non linéaire. Trois applications sont présentées: 1. Analyse multi-échelles des contraintes d'origine thermique dans un matériau composite soumis à un refroidissement. Deux types de composite sont étudiés: fibres nues, puis fibres enrobées, noyées dans une matrice. Nous proposons un modèle de décohésion entre les hétérogénéités et la matrice. 2. Contribution à l'étude du phénomène de localisation observé au cours du processus de déformation de matériaux thermosensibles, par la prise en compte des couplages thermomécaniques. Cette étude est menée à l'échelle macroscopique. 3. Etude multi-échelles du comportement d'alliages à mémoire de forme polycristallins. Dans les deux dernières applications, nous comparons les résultats des simulations numériques à des résultats expérimentaux

Situation actuelle : Ingénieur R&D EDF Clamart

Xavier Balandraud (2000) Changement de phase et changement d'échelle dans les alliages à mémoire de forme, dir. A. Chrysochoos (40%), C. Licht (20%), R. Peyroux (40%). Bourse Ministère.

Résumé : La modélisation multi-échelles du comportement thermomécanique des alliages à mémoire de forme constitue le cadre de la thèse. Trois échelles de description sont définies (micro, méso et macroscopique) et illustrées par des observations. L'objectif est de fournir des lois de comportement macroscopiques à l'Ingénieur. Dans une partie bibliographique, nous rapportons des résultats de quasiconvexification, réalisant le passage de l'échelle du réseau cristallin (microscopique) à celle d'un élément de volume monocristallin (mesoscopique). De manière alternative, nous réalisons des expériences thermomécaniques sur une éprouvette monocristalline : le calcul des sources de chaleur, à partir des mesures de température par caméra infrarouge, montre la propagation d'un front de changement de phase (localisation). Un modèle méso-thermomécanique du comportement monocristallin, prenant en compte le type de symétrie de la martensite considérée, est proposé dans le cadre des Matériaux Standards Généralisés. Le modèle décrit la pseudoélasticité (à haute température) et l'apparition de déformations résiduelles par réorientation de variantes de martensite (à basse température). L'évolution du polycristal est observée au travers d'expériences et de simulations numériques par éléments finis (en thermomécanique couplée, avec changement de phase) sur un volume élémentaire représentatif du matériau. Les couplages thermomécaniques (chaleur latente) et les irréversibilités mécaniques sont pris en compte dans les simulations numériques. La définition exacte de l'état thermodynamique d'un point macroscopique nécessite la connaissance du champ de fractions volumiques de martensite dans le VER situé «sous» ce point. Les résultats numériques sont alors utilisés pour proposer un modèle phénoménologique du comportement macroscopique polycristallin.

Situation actuelle : Maître de Conférences (HDR) IFMA Clermont-Ferrand

Silvère Vigneron (2009) Analyse thermomécanique multiéchelle de la transformation de phase dans les AMF, dir. A. Chrysochoos (20%), R. Peyroux (40%), B. Wattrisse (40%). Bourse Ministère.

Résumé : Cette étude est consacrée à l'analyse thermomécanique de la transformation martensitique prenant place dans les Alliages à Mémoire de Forme (AMF). Cette analyse est effectuée à différentes échelles et s'appuie sur des champs de mesures thermomécaniques, des simulations numériques 3D par éléments finis et des simulations utilisant la dynamique moléculaire. L'étude est restreinte au comportement pseudoélastique d'un monocristal de CuAlBe, soumis à des chargements de traction. Les observations par imagerie cinématique et énergétique couplées rendent possible la caractérisation précise et locale du front de changement de phase qui apparait lors d'une sollicitation mécanique d'une éprouvette d'AMF. L'analyse énergétique qui en est faite, permet d'interpréter la transformation de phase comme liée à un couplage thermomécanique fort, et de négliger la dissipation intrinsèque. Conformément à ces résultats, un modèle thermomécanique monovariant est proposé qui rend compte du phénomène d'hystérésis et des effets du temps observés expérimentalement. Le front de changement de phase est ensuite généré numériquement puis

comparé à l'expérience et à la littérature. Dans un second temps, un modèle d'AMF idéal est proposé à l'échelle cristalline. La dynamique moléculaire permet de construire l'énergie libre associée à un ensemble d'atomes et de réaliser des expériences numériques. L'évolution du comportement avec la dimension de l'échantillon est étudiée numériquement puis discutée. Une tendance à la convexification du potentiel énergétique est observée, ainsi que l'apparition d'une microstructure complexe.

Situation actuelle : Consultant MATIS détaché chez PSA.

Thème Milieux Discrets

Itthichaï Preechawuttipong (2002) Modélisation du comportement mécanique de matériaux granulaires cohésifs, dir. R. Peyroux (50%), F. Radjaï (50%). Bourse gouvernement thaïlandais.

Résumé : Cette thèse est consacrée à l'étude numérique des milieux granulaires cohésifs dans une géométrie bi-dimensionnelle. Pour la modélisation numérique, nous avons implémenté deux modèles d'adhésion différents dans le cadre de la méthode de dynamique moléculaire. Les études ont porté sur la caractérisation des états d'équilibre et de l'évolution du milieu soumis à divers types de sollicitation. Certains résultats intéressants de la thèse sont les suivants : 1) Mise en évidence de trois régimes d'équilibre caractérisés par l'influence du degré d'adhésion interparticulaire sur le nombre de coordination, la proportion des contacts de traction et de compression, la pression négative et l'organisation des forces, 2) Augmentation sensible de la compacité en fonction de l'adhésion avec l'apparition des auto-contraintes dans le régime fortement cohésif, 3) Faible influence de l'adhésion sur la contrainte de cisaillement lorsque les contraintes sont compressives dans toutes les directions, sauf dans les cas très fortement cohésifs, 4) Dépendance en loi puissance du seuil de rupture macroscopique en traction par rapport au seuil d'adhésion entre deux particules, 5) Initiation et propagation des fissures dans les zones de faible compacité.

Situation actuelle : Associate Professor, Department of Mechanical Engineering, Chiang Maï University, Thailand

Vincent Richefeu (2005) Approche par éléments discrets 3D du comportement de matériaux granulaires cohésifs, dir. C. Bohatier (30%), S. El Youssoufi (40%), R. Peyroux (30%). Bourse DGA.

Résumé : L'étude porte sur la modélisation du comportement mécanique de matériaux granulaires cohésifs sous faibles niveaux de chargement. Le sujet est abordé par des approches numérique (en éléments discrets), expérimentale et théorique. Un code de calcul tridimensionnel (nommé tapio-K) a été mis au point avec comme spécificité d'intégrer plusieurs lois de cohésion. La confrontation d'essais expérimentaux et numériques de cisaillement direct d'échantillons de billes de verre a permis la validation du code de calcul. En outre, cette confrontation a mis en évidence la nécessité de réaliser des essais faiblement contraints afin de juger de l'influence de la cohésion capillaire. Un nouveau dispositif a été réalisé à cette fin. Les mesures obtenues à l'aide de ce dispositif, les simulations numériques, ainsi qu'une analyse théorique ont permis de mettre en évidence l'importance de la distribution du liquide au sein d'un matériau granulaire humide (phase liquide discontinue) sur la résistance au cisaillement. Enfin, quelques cas tests d'application (compression simple, vidange d'un matériau granulaire humide, traficabilité d'un sol de surface) sont présentés pour montrer les possibilités du code de calcul.

Situation actuelle : Maître de Conférences 3SR Lab Grenoble

Emilien Azema (2007) Etude numérique des matériaux granulaires à grains polyédriques : rhéologie quasi-statique, dynamique vibratoire, application au procédé de bourrage du ballast, dir. R. Peyroux (50%), F. Radjaï (50%). Bourse CIFRE SNCF.

Résumé : Ce travail de thèse porte sur la modélisation numérique et l'analyse des mécanismes physiques en jeu lors du procédé de bourrage du ballast ferroviaire. Celui-ci consiste à remettre à niveau la voie suite aux tassements différentiels induits par les circulations des trains. Nous avons développé un modèle en éléments discrets par la méthode de dynamique des contacts qui permet de simuler un cycle complet du procédé composé de l'enfoncement des bras mécaniques, le serrage du ballast sous la traverse et le retrait des bras. Ces simulations prennent notamment en compte la forme polyédrique des grains, ce qui constitue un élément important pour une simulation réaliste de la dynamique du ballast. Une étude détaillée de la rhéologie quasi-statique des matériaux granulaires à grains polyédriques a été ainsi effectuée permettant de mettre en évidence l'origine de la résistance mécanique de ces matériaux liée à la forme facettée des grains. La dynamique vibratoire des grains a été explorée en interaction avec un outil vibrant et sous l'effet des vibrations horizontales. Ces études ont permis de proposer une mise à l'échelle de la dynamique en fonction des paramètres de chargement et de mettre en évidence une fréquence caractéristique pour une compaction optimale du milieu granulaire. Ces analyses et des études paramétriques ont permis de proposer des recommandations précises pour améliorer les performances du procédé de bourrage.

Situation actuelle : Maître de Conférences LMGC Montpellier

Somchaï Pattana (2006) Division d'un milieu cellulaire sous contraintes mécaniques. Utilisation de la mécanique des matériaux granulaires, dir. R. Peyroux (encadrement total sur dérogation du Conseil Scientifique UMII). Bourse gouvernement thaïlandais.

Résumé : Les tissus biologiques, qu'ils soient animal ou végétal, sont issus d'une opération de division et de croissance cellulaire. L'organisation des cellules, leur forme et leur taille obéissent à des règles biologiques mais aussi mécaniques, et de nombreux travaux de biologistes ont montré ces dernières années une grande mécano-sensibilité. Les efforts s'appliquant sur les cellules conditionnent les processus de croissance et de division, et l'arrangement cellulaire qui en est aussi la conséquence. Ainsi, le travail de simulation numérique rapporté dans ce manuscrit s'attache à modéliser dans un premier temps les interactions mécaniques possibles entre cellules puis dans un second temps à utiliser ce modèle pour simuler la création d'un tissu. Le modèle d'interaction cellulaire ainsi proposé permet de prendre en compte des efforts de traction-compression au contact entre deux cellules traduisant respectivement les effets de déformation et d'adhérence. Du frottement et du frottement de roulement peuvent également être présents dans le modèle. Sur le plan numérique nous utilisons une méthode de Dynamique Moléculaire. Les résultats obtenus concernent la génération de tissu à partir de cellules souches dans des boîtes de forme carrée ou ronde. Les textures des tissus ainsi obtenus sont analysés en terme de réseau des contacts et d'effort et présentent des anisotropies différentes suivant les formes de boîtes, ce qui rappellent les phénomènes observés par exemple lors de culture de peau.

Situation actuelle : Lecturer, Department of Mechanical Engineering, Chiang Maï University, Thailand

Sylvie Jauvert (thèse débutée en octobre 2011) Aspects mécaniques du comportement de tissus biologiques, dir. R. Peyroux (100%, agrément Ecole doctorale IMEP2 obtenu). Bourse Ministère.

Encadrement de post-doctorants

Gaëlle Rambert (2003-2005) Modélisation numérique 3D discrètes de murs maçonnés, LMGC, Montpellier, financé par ALCAN. (comportement d'un mur de four de grandes dimensions constitué de briques réfractaires – le mur est soumis à des cycles thermiques de grandes amplitudes qui conduisent à des mouvements relatifs de briques pouvant créer des zones de fissuration dans le mur).

Vincent Richefeu (2006-2008) Détermination expérimentale de lois de zones cohésives, LMGC, Montpellier, financé par l'IRSN. (mise au point d'un dispositif expérimental et d'une modélisation adaptée pour pouvoir identifier des lois de zones cohésives sur différents matériaux)

Arnaud Regazzi (2014-2015) Mise en forme de Matériaux Composites Biosourcés, 3SR, Grenoble, financé par l'Institut Carnot Polynat. (Sélection de matières biosourcées et travail sur le procédés de mise en forme pour comprendre le rôle des différents paramètres matériaux et processus sur les caractéristiques mécaniques du matériaux obtenu – matériau poudre d'amidon ou poudre polymère et processus de type compaction des poudres et soudage ultrason).

Annexe A
Un cadre thermomécanique pour les équations de comportement

Le cadre thermomécanique

Système thermodynamique, variables d'état, potentiels :

Tout milieu continu est considéré comme un système thermodynamique. A toute particule de ce système, on associe un élément de volume que l'on suppose homogène et qui est considéré comme un sous-système thermodynamique. Pour décrire l'évolution d'un système, on introduit la notion de processus. Un processus thermodynamique est une suite continue d'états par lesquels passe ce système. Si un système est globalement hors équilibre, il est considéré comme une réunion de sous-systèmes en état d'équilibre ; les évolutions de ces sous-systèmes seront qualifiées de quasi-statiques c'est à dire, constitués d'une succession d'états d'équilibre.

A l'équilibre, un sous-système thermodynamique est décrit par $n+1$ variables indépendantes, scalaires ou tensorielles, appelées *variables d'état.* Parmi les $n+1$ variables d'état certaines sont observables (par exemple la température T, la déformation ϵ). Il est souvent nécessaire d'introduire d'autres variables d'état pour caractériser complètement l'équilibre thermodynamique. Ces variables sont souvent appelées paramètres internes. Elles récapitulent l'histoire du système jusqu'à l'instant t. Pour les matériaux solides, cette histoire est associée aux évènements microstructuraux : accroissement de la densité de dislocations, changement de phase, endommagement, microfissuration, etc. Comme variables internes, on utilise fréquemment des tenseurs comme celui des déformations élastiques ϵ_e ou plastiques ϵ_p ; lors de changements de phase, les proportions de phase des différents constituants sont souvent choisies. On notera (T, α_j) le jeu de variables choisies, la température jouant un rôle particulier, et toutes les autres variables étant rassemblées dans le vecteur α_j.

On appelle potentiel thermodynamique, toute fonction réelle des variables d'état permettant de décrire les phénomènes thermomécaniques. Les principes de la thermodynamique vont introduire deux potentiels fondamentaux : l'*énergie interne* du système (notée E pour l'énergie globale du système et e pour l'énergie spécifique) et l'*entropie* (notée S pour l'entropie globale et s pour l'entropie spécifique).

Premier principe de la thermodynamique :

Ecriture locale de l'équation de conservation de l'énergie sous la forme :

$$\boxed{\rho \dot{e} = -p_i + r - div(\overrightarrow{q})} \qquad (1)$$

(ρ masse volumique, p_i densité volumique de puissance des efforts intérieurs, r densité volumique de source de chaleur d'origine externe échangée avec le milieu extérieur, $\overrightarrow{q}$ vecteur courant de chaleur).

Second principe de la thermodynamique :

On suppose qu'à chaque instant t et pour tout élément du système, on peut définir une fonction d'état scalaire s, entropie spécifique, de telle sorte que l'énergie spécifique e soit une fonction monotone croissante de s et que le scalaire non négatif $T = \partial e/\partial s$ représente la température de l'élément.

Ecriture locale de l'équation de conservation de l'énergie sous la forme :

$$\boxed{\rho\dot{s} - \frac{r}{T} + div(\frac{\overrightarrow{q}}{T}) \geqslant 0} \qquad (2)$$

En développant le terme divergence on peut réécrire (2) sous la forme

$$\rho\dot{s} - \frac{r}{T} + \frac{1}{T}div(\overrightarrow{q}) - \frac{1}{T^2}\overrightarrow{q}.\overrightarrow{grad}T \geqslant 0 \qquad (3)$$

D'après (1), $r - div(\overrightarrow{q}) = \rho\dot{e} + p_i$ d'où

$$-p_i - \rho(\dot{e} - T\dot{s}) - \frac{1}{T}\overrightarrow{q}.\overrightarrow{grad}T \geqslant 0 \qquad (4)$$

On définit alors une nouvelle fonction d'état $\psi(s, \alpha)$, appelée énergie libre spécifique (énergie libre de Helmholtz), transformée de Legendre de l'énergie interne spécifique e par rapport à s par : $\psi = e - Ts$, avec $s = -\partial\psi/\partial T$ et $\partial\psi/\partial\alpha = \partial e/\partial\alpha$.

Comme $\dot{\psi} = \frac{\partial\psi}{\partial T}\dot{T} + \frac{\partial\psi}{\partial\alpha}\dot{\alpha}$ il vient $\dot{e} - T\dot{s} = \dot{\psi} + \dot{T}s = \frac{\partial\psi}{\partial\alpha}\dot{\alpha}$ et donc

$$\boxed{d = -p_i - \rho\frac{\partial\psi}{\partial\alpha}\dot{\alpha} - \frac{1}{T}\overrightarrow{q}.\overrightarrow{grad}T \geqslant 0} \qquad (5)$$

qui est **l'inégalité de Clausius-Duhem** et qui traduit que la dissipation totale d est toujours positive. On définit alors la dissipation intrinsèque volumique d_1 et la dissipation thermique volumique d_2 par :

$$d_1 = -p_i - \rho\frac{\partial\psi}{\partial\alpha}\dot{\alpha} \quad \text{et} \quad d_2 = -\frac{1}{T}\overrightarrow{q}.\overrightarrow{grad}T \qquad (6a,6b)$$

Classiquement, on postule que les deux dissipations sont séparément positives.

En combinant (1) et (6a) on aboutit à une autre équation faisant intervenir d_1 :

$$\rho T\dot{s} = d_1 + r - div(\overrightarrow{q}) \qquad (7)$$

Equation de la chaleur :

On introduit la capacité calorifique par : $C = T\left(\frac{\partial s}{\partial T}\right)_\alpha$

Avec $s = -\frac{\partial\psi}{\partial T}$ (équation de Gibbs), il vient :

$$\dot{s} = -\frac{\partial^2\psi}{\partial T^2}\dot{T} - \frac{\partial^2\psi}{\partial T\partial\alpha}\dot{\alpha} = \frac{C}{T}\dot{T} - \frac{\partial^2\psi}{\partial T\partial\alpha}\dot{\alpha}$$

En combinant (1) et $\dot{e} = T\dot{s} + \frac{\partial\psi}{\partial\alpha}\dot{\alpha}$, on obtient :

$$\rho\dot{e} = -p_i + r - div(\overrightarrow{q}) = \rho C\dot{T} - \rho T\frac{\partial^2\psi}{\partial T\partial\alpha}\dot{\alpha} + \rho\frac{\partial\psi}{\partial\alpha}\dot{\alpha}$$

Enfin, en utilisant (6a), l'équation de la chaleur s'écrit :

$$\boxed{\rho C\dot{T} + div(\overrightarrow{q}) = d_1 + \rho T\frac{\partial^2\psi}{\partial T\partial\alpha}\dot{\alpha} + r} \qquad (8)$$

Cette équation exprime que le taux de chaleur créé par les sources (le membre de droite) contribue en partie à l'élévation de la température du point considéré (1er terme du membre de gauche) et diffuse par conduction dans le reste du milieu (2nd terme du membre de gauche).

On fait classiquement appel à une loi de conduction de type Fourier : $\overrightarrow{q} = -k\overrightarrow{grad}T$, où k est le tenseur de conduction du milieu (coefficient de conduction si le milieu est isotrope).

Si, par ailleurs, le système est à l'équilibre et si on note T_0 le champ de température à l'équilibre, on a : $-k\Delta T_0 = r$. En posant $\theta = T - T_0$ on obtient une formulation simplifiée de l'équation de la chaleur pour des évolutions où le terme de sources volumiques externes est constant :

$$\boxed{\rho C\dot{\theta} - k\Delta\theta = d_1 + \rho T\frac{\partial^2\psi}{\partial T\partial\alpha}\dot{\alpha}} \qquad (9)$$

Remarques :

• Au second membre de (9), on retrouve la dissipation intrinsèque d_1 ; cette dissipation représente la partie de la puissance des efforts intérieurs qui se transforme de façon irréversible en chaleur lors du processus. Pour des transformations plastiques ou viscoplastiques, une partie du travail des contraintes sera dissipée. On remarque que contrairement à la dissipation intrinsèque, la dissipation thermique d_2 n'intervient pas dans le bilan thermique.

• Les termes de couplage thermomécanique (dernier terme du membre de droite de (9)) sont aussi homogènes à des sources volumiques de chaleur (W.m^{-3}) ; ils traduisent les interactions entre la température et les autres variables d'état caractérisant le matériau. Par exemple, pour un matériau thermoélastique linéaire isotrope, les termes correspondant aux couplages entre déformation et température $\rho T\partial^2\psi/\partial T\partial\epsilon.\dot{\epsilon}$ sont les termes dits de *couplage thermoélastique*. Ils rendent compte du fait qu'un matériau thermoélastique se réchauffe lorsqu'on le comprime (et se dilate quand on le chauffe), ou qu'il se refroidit lorsqu'on l'étire (et se contracte lorsqu'on le refroidit).

• Le membre de droite de (9) est souvent noté w'_{ch} et symbolise la source volumique globale de chaleur.

Lois d'état :

On a déjà dit que la température jouait un rôle particulier dans le lot des variables d'état. Il en est de même pour la déformation, deuxième variable directement observable et d'importance dès lors que l'on s'intéresse aux milieux déformables. Les variables seront donc (en hypothèses des petites perturbations) l'ensemble (T, ϵ, α_j).

Les lois d'état sont les relations qui permettent de définir les forces thermodynamiques associées aux variables d'état à partir de l'énergie libre.

$$\boxed{A = -\rho\frac{\partial\psi}{\partial\alpha}\,,\ \sigma_{rev} = -\rho\frac{\partial\psi}{\partial\epsilon}\,,\ s = -\frac{\partial\psi}{\partial T}\text{, avec } \psi = \psi\left(T, \epsilon, \alpha\right)} \qquad (10)$$

où σ_{rev} est la partie réversible des contraintes et A la force thermodynamique associée à la variable α.

Lois complémentaires :

Retour sur la dissipation intrinsèque d_1 (6a)

Introduisons $\sigma_{irr} = \sigma - \sigma_{rev}$ la partie irréversible des contraintes. La puissance mécanique des efforts intérieurs vaut ici $p_i = -\sigma : \dot{\epsilon}$. Avec cette écriture et l'utilisation des lois d'état la dissipation d_1 peut se mettre sous la forme :

$$d_1 = \sigma_{irr} : \dot{\epsilon} + A.\dot{\alpha} \geqslant 0$$

où, en appelant de façon généralisée X les forces associées aux variables et Y les vitesses de ces variables :

$$d_1 = X.Y \geqslant 0, \text{ avec } X = (\sigma_{irr}, A)\,, Y = (\dot{\epsilon}, \dot{\alpha}) \qquad (11)$$

A ce stade, il manque des équations pour fermer le problème. *Les lois complémentaires* relient les forces et les vitesses (qualifient la vitesse d'avancement des phénomènes irréversibles) tout en assurant la positivité de la dissipation intrinsèque.

Le cadre des *Matériaux Standard Généralisés*[*] postule l'existence d'un potentiel de dissipation dont dérive la relation entre forces généralisées X et vitesses généralisées Y. De plus si ce potentiel est une fonction convexe de Y et est minimum en $Y = 0$, la positivité de la dissipation intrinsèque est assurée.

$$\boxed{X = \frac{\partial \varphi}{\partial Y}\,,\ \sigma_{irr} = \frac{\partial \varphi}{\partial \dot{\epsilon}}\,,\ A = \frac{\partial \varphi}{\partial \dot{\alpha}}\,,\ \text{avec } \varphi = \varphi\left(\dot{\epsilon}, \dot{\alpha}\right)} \qquad (12)$$

"La" loi de comportement :

La loi de comportement du matériau est d'abord constituée par l'ensemble des lois d'état et des lois complémentaires. On peut en donner une autre présentation, sous forme d'équations différentielles ordinaires, en éliminant les forces thermodynamiques présentes dans les deux expressions (10) et (12):

$$\begin{cases} \sigma = \rho \dfrac{\partial \psi}{\partial \epsilon} + \dfrac{\partial \varphi}{\partial \dot{\epsilon}} \\ 0 = \rho \dfrac{\partial \psi}{\partial \alpha} + \dfrac{\partial \varphi}{\partial \dot{\alpha}} \end{cases} \qquad (13)$$

Ces équations sont couplées aux équations aux dérivées partielles (équilibre, compatibilité) que doivent satisfaire les tenseurs de contraintes et de déformation. Le comportement du matériau est donc complètement déterminé dès lors que son potentiel d'énergie libre te son potentiel de dissipation sont connus.

Enfin, les couplages thermomécaniques, déjà présents dans (13), ont également une trace dans l'équation de la chaleur, qui est le lieu où la dissipation intrinsèque associée aux irréversibilités du comportement influe sur la température. La prise en compte de ces effets est parfois essentielle, notamment dans les cas où les coefficients caractéristiques ont une dépendance forte en la température.

Sur un plan pratique, l'identification expérimentale ne fournit jamais directement les potentiels. Les essais mécaniques permettent le plus souvent d'établir des correspodances contraintes-déformation, et de plus en plus d'y intégrer les évolutions en

[*] Halphen, B., Nguyen, Q.S., Sur les matériaux standard généralisés. J. Mécanique, 14, 39-63, (1975).

température du matériau, évolutions qui conduisent (après un "petit" travail d'inversion de l'équation de la chaleur) aux termes sources (second membre de (9)).

Toutes ces informations sont alors utiles, avec (9) et (13), pour pouvoir construire des potentiels cohérents avec les observations, et obtenir ainsi la totalité des lois comportement du matériau.

Quelques exemples de lois de comportement thermomécaniques

Thermoélasticité (intérêt uniquement pédagogique)

• *Variables choisies :* $\{T, \epsilon\}$ température et tenseur de déformation linéarisé, et $\theta = T - T_0$, écart par rapport à la température de référence T_0. Dans ce qui suit, α est le coefficient (ou le tenseur) de dilatation thermique, k le coefficient (ou le tenseur) de conduction thermique et C la capacité calorifique du matériau.

• *Energie libre choisie :* $\rho\psi(T,\epsilon) = \frac{1}{2}a(\epsilon - \alpha\theta)(\epsilon - \alpha\theta) - \frac{1}{2}(C + a\alpha\alpha)\theta^2$

• *Potentiel de dissipation :* $\varphi(\dot{\epsilon}) = 0$

• *Loi d'état :* $\sigma_{rev} = \rho\frac{\partial\psi}{\partial\epsilon} = a(\epsilon - \alpha\theta)$

• *Loi complémentaire :* $\sigma_{irr} = \frac{\partial\varphi}{\partial\dot{\epsilon}} = 0$

• *Dissipation :* $D_1 = \sigma_{irr} : \dot{\epsilon} = 0$

• *Equation de la chaleur :* $\rho C\dot{\theta} - k\Delta\theta = -Ta\alpha\dot{\epsilon}$

• *Loi de comportement :* $\sigma = a(\epsilon - \alpha\theta)$

• *Un essai de traction simple :*

Utilisons ces équations pour réaliser un essai de traction simple sur un échantillon de matière. On impose un déplacement à un bord de l'échantillon (figure a). L'équation de la chaleur permet d'évaluer la température en tout point de l'échantillon, en prenant en compte les conditions aux limites de type thermique (convection par exemple). On note que le second membre de l'équation de la chaleur étant négatif pour un taux de déformation positif, on refroidit l'échantillon lors d'une traction. Classiquement, pour un acier de construction usuel (E =210GPa, R_e =355MPa, α =1,2.10^{-5}K^{-1}) soumis à une contrainte de traction de 300Mpa, le refroidissement est de l'ordre de 0,3°C (figure b). Ayant les valeurs de déformation et de température, la loi de comportement permet d'avoir la valeur de la contrainte (figure c). A la charge, la courbe contrainte-déformation est donc au dessus de la ligne donnée par la rigidité du matériau, et à la décharge en dessous, avec, dans la réalité, des valeurs pour ces écarts qui sont de l'ordre du pourcent. Dans la réalité toujours, les valeurs de température et du coefficient de dilatation ne permettent que rarement de déceler une différence charge-décharge. Ainsi on ne peut obtenir le graphe de la figure c qu'avec un coefficient de dilatation thermique 1000 fois plus grand que les valeurs habituelles. Il n'en est pas moins vrai que l'on a une boucle d'hystérésis pour un comportement purement réversible.

A l'aide du cadre thermomécanique qui précède, on peut facilement exprimer la valeur A_h de l'aire d'hystérésis.

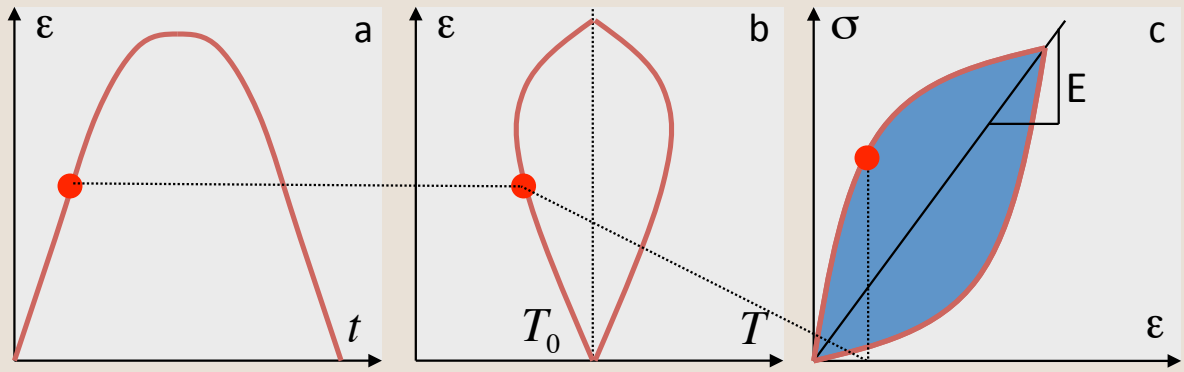


Schéma d'un essai de traction : a) déplacement imposé, b) température mesurée, c) graphe contrainte-déformation

Entracte – détermination de la valeur de l'aire A_h :

Sortons un moment du cadre de la thermoélasticité et considérons à nouveau le jeu générique de variables (T, ϵ, α_j). Considérons également un essai qui soit un cycle thermodynamique C, au sens où toutes les variables reviennent à leur valeur d'origine à la fin du cycle.

En l'absence de densité volumique de source de chaleur r, (1) et (7) deviennent :

$\rho\dot{e} = \sigma : \dot{\epsilon} - div(\overrightarrow{q})$ et $\rho T\dot{s} = d_1 - div(\overrightarrow{q})$.

Or, $A_h = \int_C \sigma : \dot{\epsilon} dt = \int_C div(\overrightarrow{q}) dt$, et donc $A_h = \int_C d_1 dt - \int_C \rho T\dot{s} dt$

Rappelons que $s = -\frac{\partial \psi}{\partial T}$ et que $C = T\frac{\partial s}{\partial T}$, donc $\dot{s} = C\frac{\dot{T}}{T} + \frac{\partial s}{\partial \epsilon}\dot{\epsilon} + \frac{\partial s}{\partial \alpha}\dot{\alpha}$

En intégrant sur C cette dernière équation multipliée par ρT, il vient :

$\int_C \rho T\dot{s} dt = \int_C \rho C\dot{T} dt + \int_C \rho T\frac{\partial s}{\partial \epsilon}\dot{\epsilon} dt + \int_C \rho T\frac{\partial s}{\partial \alpha}\dot{\alpha} dt$, et enfin

$A_h = \int_C d_1 dt + \int_C \rho T\frac{\partial^2 \psi}{\partial T \partial \epsilon}\dot{\epsilon} dt + \int_C \rho T\frac{\partial^2 \psi}{\partial T \partial \alpha}\dot{\alpha} dt$

ou encore avec $T = T_0 + \theta$

$$\boxed{A_h = \int_C d_1 dt + \int_C \rho\theta\frac{\partial^2 \psi}{\partial T \partial \epsilon}\dot{\epsilon} dt + \int_C \rho\theta\frac{\partial^2 \psi}{\partial T \partial \alpha}\dot{\alpha} dt} \qquad (14)$$

Revenons maintenant au comportement thermoélastique. L'expression (14) devient :

$$A_h = \int_C \rho\theta\frac{\partial^2 \psi}{\partial T \partial \epsilon}\dot{\epsilon} dt = \int_C -\rho a\alpha\theta\dot{\epsilon} dt \,,$$

Ceci est cohérent avec le fait que l'aire de l'hystérésis n'est due qu'aux couplages thermoélastiques. Bien évidemment, cette aire va dépendre des conditions aux limites thermiques qui vont réguler la température du point considéré. Insistons également une dernière fois sur le caractère uniquement pédagogique de ce paragraphe, car quantitativement, et pour les matériaux classiquement utilisés, l'aire d'hystérésis en thermoélasticité est à chercher dans l'épaisseur du trait !

Thermoviscoélasticité

On s'intéresse ici au comportement viscoélastique de type Kelvin-Voigt en suivant la même démarche que précédemment, mais en faisant intervenir le taux de déformation au niveau de l'expression du potentiel de dissipation.

- *Variables choisies :* $\{T, \epsilon\}$, et $\theta = T - T_0$
- *Energie libre choisie :* $\rho\psi(T,\epsilon) = \frac{1}{2}a(\epsilon - \alpha\theta)(\epsilon - \alpha\theta) - \frac{1}{2}(C + a\alpha\alpha)\theta^2$
- *Potentiel de dissipation :* $\varphi(\dot{\epsilon}) = \frac{1}{2}b\dot{\epsilon} : \dot{\epsilon}$
- *Loi d'état :* $\sigma_{rev} = \rho\frac{\partial\psi}{\partial\epsilon} = a(\epsilon - \alpha\theta)$
- *Loi complémentaire :* $\sigma_{irr} = \frac{\partial\varphi}{\partial\dot{\epsilon}} = b\dot{\epsilon}$
- *Dissipation :* $D_1 = \sigma_{irr} : \dot{\epsilon} = b\dot{\epsilon} : \dot{\epsilon}$
- *Equation de la chaleur :* $\rho C\dot{\theta} - k\Delta\theta = -Ta\alpha\dot{\epsilon} + b\dot{\epsilon} : \dot{\epsilon}$
- *Loi de comportement :* $\sigma = \sigma_{rev} + \sigma_{irr} = a(\epsilon - \alpha\theta) + b\dot{\epsilon}$

On retrouve bien les équations mécaniques habituelles du modèle de Kelvin-Voigt. L'équation de la chaleur est cette fois-ci complétée par le terme de dissipation mécanique d'origine visqueuse, terme qui au contraire de celui de couplage thermoélastique, ne dépend pas du signe de la sollicitation.

Pour les applications de localisation citées plus haut dans ce document, il est nécessaire de prendre en considération une chute des caractéristiques mécaniques autour de températures de transition. On peut alors écrire à nouveau les équations précédentes en prenant en compte une dépendance des caractéristiques mécaniques en fonction de la température.

L'énergie libre devient :

$$\rho\psi(T,\epsilon) = \frac{1}{2}a(T)(\epsilon - \alpha(T)\theta)(\epsilon - \alpha(T)\theta) - \frac{1}{2}(C(T) + a(T)\alpha(T)\alpha(T))\theta^2$$

Le potentiel de dissipation s'écrit : $\varphi(\dot{\epsilon}) = \frac{1}{2}b(T)\dot{\epsilon} : \dot{\epsilon}$

La dépendance en température des termes précédents induit des modifications, notamment dans les expressions de la capacité calorifique et des termes de couplages.

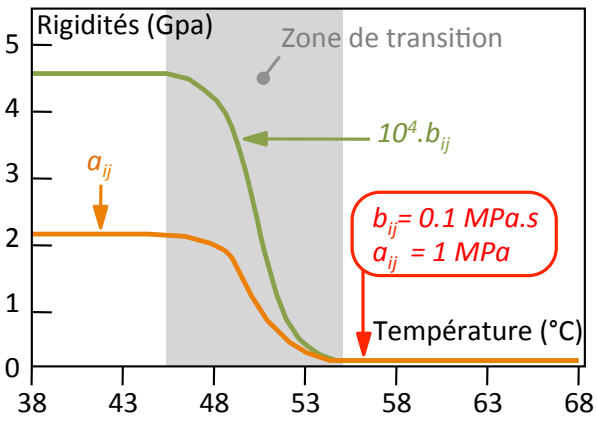
$$C(T) = -T\frac{\partial^2\psi}{\partial T^2} = C + \boldsymbol{F}(T,\epsilon)$$

$$\rho T\frac{\partial^2\psi}{\partial T\partial\epsilon}\dot{\epsilon} = -T\alpha(T)\alpha(T)\dot{\epsilon} + T\boldsymbol{G}(T,\epsilon)\dot{\epsilon}$$

Le système d'équations régissant ce nouveau comportement peut se présenter sous la forme suivante :

$$\begin{cases} div\sigma = \rho\ddot{u} \\ \sigma = a(T)\left(\epsilon - \alpha\theta\right) + b(T)\dot{\epsilon} \\ \rho\left[C + \boldsymbol{F}(T,\epsilon)\right]\dot{T} - k\Delta\theta = \left[-Ta(T)\alpha(T) + T\boldsymbol{G}(T,\epsilon)\right]\dot{\epsilon} + b(T)\dot{\epsilon}\dot{\epsilon} \\ \text{Conditions aux limites thermiques et mécaniques} \\ \text{Conditions initiales} \end{cases}$$

La forme exacte des courbes de dépendance en température conditionne évidemment les non-linéarités qui devront être traitées efficacement sur le plan numérique.



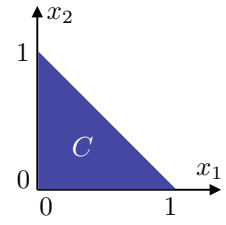
Ci-contre est représenté un exemple de dépendance en température possible, qui traduit de manière schématique ce qui peut advenir au passage d'une température de transition (ou d'une zone de transition). Les modules de rigidité subissent une chute de plusieurs ordres de grandeur lorsque la température évolue sur une dizaine de degrés.

Alliages à mémoire de forme

On s'intéresse ici au comportement dit de pseudoélasticité et de mémoire de forme en suivant la même démarche que précédemment. Cette fois, on rajoute dans le lot de variable une description du changement de phase solide-solide par l'intermédiaire de fraction volumique de phase transformée. On a choisi ici une description à l'aide de deux fractions volumiques représentant deux variantes de martensite. (cf. [6] pour plus de détails). Ces deux fractions volumiques x_1 et x_2 sont associées à deux tenseurs de déformation de transformation β^1 et β^2.

- *Variables choisies :* $\{T, \epsilon, x_1, x_2\}$, avec $\theta = T - T_0$
- *Energie libre :* $\rho\psi(\theta, \epsilon, x) = \rho\psi_{th}(\theta, \epsilon, x) + \rho\psi_{ch}(\theta, x) + I_C(x)$

Cette énergie se décompose en une partie thermoélastique (*th*), une liée au changement de phase (*ch*) et $I_C(x)$ qui est la fonction indicatrice du convexe C, ensemble des valeurs admissibles des fractions volumiques de martensite.



Ensemble C pour deux variantes de martensites

$$I_C(x) = \left\{ \begin{array}{l} 0 \text{ si } x \in C \\ \infty \text{ sinon} \end{array} \right\} \text{ avec } C = \{(x_1, x_2)/x_i \geq 0 \text{ et } x_1 + x_2 \leq 1\}$$

La partie thermoélastique vaut :

$$\rho\psi_{th}(\theta, \epsilon, x) = \tfrac{1}{2}a(\epsilon - \alpha\theta - x_i\beta^i)(\epsilon - \alpha\theta - x_i\beta^i) - \tfrac{1}{2}(C + a\alpha\alpha)\theta^2$$

La partie changement de phase vaut :

$$\rho\psi_{ch}(\theta, x) = D(A - M)(x_1^2 + x_2^2) + D(T_0 + \theta - A)(x_1 + x_2)$$

- *Potentiel de dissipation :* $\varphi(\dot{\epsilon}, \dot{x}) = 0$

• *Lois d'état :* $\sigma_{rev} = \rho\frac{\partial\psi}{\partial\epsilon} = a(\epsilon - \alpha\theta - x_i\beta^i)$

$-A_x = \rho\frac{\partial\psi}{\partial x}$

où A_x est la force thermodynamique associée à x.

• *Lois complémentaires :* $\sigma_{irr} = \frac{\partial\varphi}{\partial\dot{\epsilon}} = 0$

$A_x = \frac{\partial\varphi}{\partial x} = 0$

• *Dissipation :* $D_1 = \sigma_{irr} : \dot{\epsilon} = 0$

• *Equation de la chaleur :* $\rho C\dot{\theta} - k\Delta\theta = -Ta\alpha\dot{\epsilon} + \rho L(\dot{x}_1 + \dot{x}_2)$

où L est la chaleur latente de changement de phase et vaut : $a\alpha : \beta + D$

• *Domaine de transition :* L'exploitation conjointe des lois et des lois complémentaires permet, en fournissant des relations supplémentaires entre variables de définir le domaine d'évolution des fractions volumiques de martensite en fonction des contraintes et de la température.

Les lois d'état ($-A_x = \rho\frac{\partial\psi}{\partial x}$) et des lois complémentaires ($A_x = \frac{\partial\varphi}{\partial x} = 0$) précédentes permettent d'écrire formellement : $\rho\frac{\partial\psi}{\partial x} = 0$.

Du fait de la nature non différentiable de l'énergie libre considérée dans ce cas, cette dernière relation doit s'écrire sous forme d'une inclusion différentielle : $0 \in \partial_x\rho\psi$, où ∂_x désigne le sous différentiel par rapport à la variable x.

D'où $0 \in \partial_x\rho\psi_{th} \mp \partial_x\rho\psi_{ch} \mp \partial_x I_C$, et comme ψ_{th} et ψ_{ch} sont des fonctions régulières, on peut écrire :

$-\rho\frac{\partial(\psi_{th}+\psi_{ch})}{\partial x} = \overline{A_x} \in \partial_x I_C$, où $\overline{A_x}$ est la partie régulière de A_x, avec

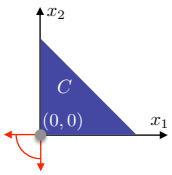
$\overline{A_x} = -\sigma : \beta^i + 2D(A - M)x_i + D(T_0 + \theta - A)$.

Rappelons simplement que $\partial_x I_C(x)$, sous-différentiel de la fonction indicatrice du convexe C se réduit à $\{0\}$ si x est à l'intérieur de V, et si x est sur la frontière de V, $\partial_x I_C(x)$ est le cône normal à V.

Par exemple, au point $x = (0,0)$ de C, on peut écrire :

$\partial_x I_C = \{\gamma = (\gamma_1, \gamma_2)/\gamma_1 \leq 0 \text{ et } \gamma_2 \leq 0\}$

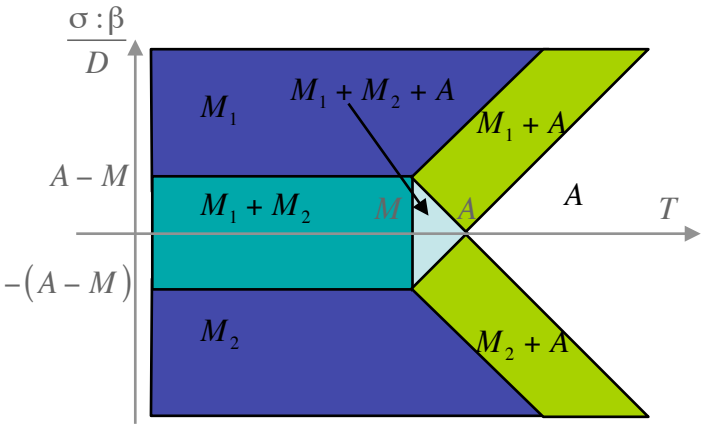
et on obtient les relations suivantes :



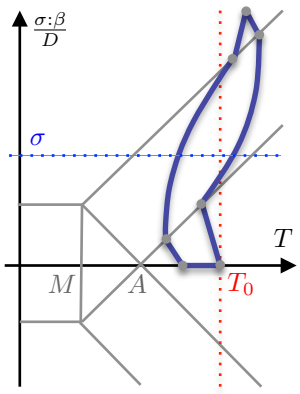
$$\begin{cases} -\sigma : \beta^1 + D(T_0 + \theta - A) \leq 0 \\ -\sigma : \beta^2 + D(T_0 + \theta - A) \leq 0 \end{cases}$$

Le domaine de transition résulte alors de ces inégalités écrites pour tous les couples possibles (x_1, x_2) dans et sur la frontière de C.

Il est représenté ci-dessous dans le cadre d'une hypothèse supplémentaire qui traduit le caractère accommodant des deux variantes $\beta^1 = -\beta^2 = \beta$. Ce diagramme, dans un plan contrainte normalisée – température, définit les différentes zones où existent et coexistent les variantes de martensite et l'austénite. La forme exacte de ce diagramme est bien sûr liée aux hypothèses formulées plus haut (existence de deux variantes auto-accommodantes) mais l'obtention de bandes de transformation revêt un caractère très général pour ce genre de comportement.



Domaine de transition de la transformation martensitique donnant les régions d'existence des variantes de martensite M_1 et M_2 et de la phase austénitique A.



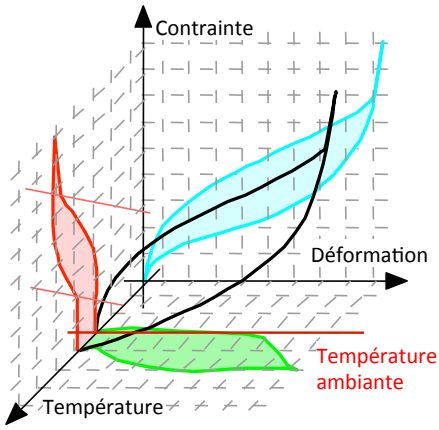
Evolution dans le plan contrainte – température lors d'une essai de charge décharge

Ainsi lors d'un essai de traction sur un volume élémentaire de matériau (modélisation en dimension 0), essai qui se ferait dans un environnement à la température $T_0 > A$, nous aurions le scenario suivant prévu par l'ensemble d'équations précédent. Début de la charge avec une partie de refroidissement due au couplage thermoélastique (ici graphiquement exagérée), début du changement de phase exothermique jusqu'à transformation complète, partie à nouveau thermoélastique, puis décharge (thermoélastique, avec changement de phase, à nouveau thermoélastique), et enfin retour à la température d'équilibre.

Tout au long de cet essai le matériau passe d'un état austénitique à un état 100% martensitique (variante 1) puis revient à un état austénitique. La température du matériau évolue donc de part et d'autre de la température d'ambiance et ces écarts peuvent facilement atteindre quelques degrés.

D'autre part, dans la phase de transformation, on notera que pour une valeur de contrainte donnée, les positions dans le diagramme de transformation à l'aller et au retour sont sensiblement différentes, en terme de température, mais surtout en terme de valeur de fraction volumique transformée (donnée par les isovaleurs de transformation qui sont ici des lignes parallèles aux lignes 0 et 100%). C'est cette différence qui est responsable de l'hystérésis observée dans une courbe contrainte déformation, et qui est caractéristique du comportement superélastique des AMF.

Reprenons maintenant l'équation 14 donnant la valeur de l'aire de l'hystérésis A_h. Dans le cas du modèle pour les AMF, avec un potentiel de dissipation identiquement nul, l'aire d'hystérésis mécanique obtenue est égale à l'intégrale sur le cycle de la source de chaleur liée au changement de phase (celle liée au couplage thermoélastique est faible). Des variations de température de quelques degrés suffisent à produire une hystérésis mécanique de taille significative. Sur le schéma ci-contre les différentes projections permettent de bien se rendre compte des évolutions de variables au cours de l'essai.



Le choix précédent de prendre un potentiel de dissipation identiquement nul était lié aux résultats expérimentaux effectués à Montpellier qui ont tous montré que la valeur de l'énergie dissipée mécaniquement était très faible devant la chaleur latente mise en jeu.

On peut toutefois essayer de quantifier l'influence d'irréversibilités de type mécaniques non nulles. Prenons par exemple un potentiel de dissipation de la forme :

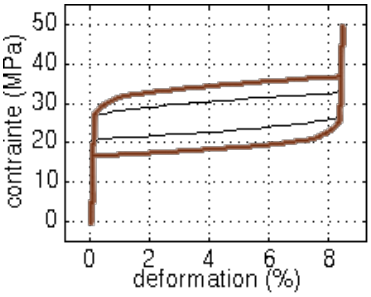
$$\varphi(\dot{\epsilon}, \dot{x}) = \frac{1}{2}\delta(\dot{x}_1^2 + \dot{x}_2^2)$$

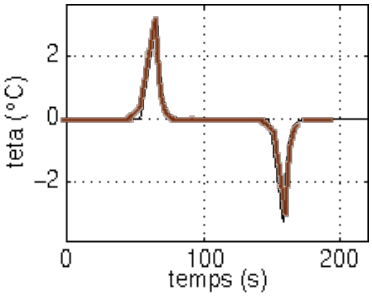
L'évolution de la température sera alors pilotée par l'équation :

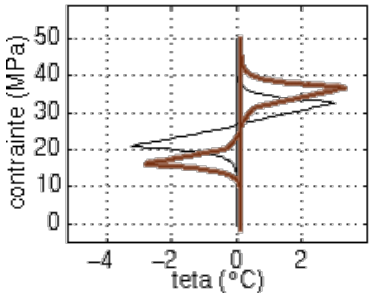
$$\rho C\dot{\theta} - k\Delta\theta = \rho L(\dot{x}_1 + \dot{x}_2) + \delta(\dot{x}_1 + \dot{x}_2)$$

Choisissons la valeur du paramètre δ de façon que la dissipation intrinsèque d_1 soit négligeable devant les termes de chaleur latente. Négligeons également le couplage thermoélastique.

On obtient alors sur les figures ci-dessous, pour un essai de charge-décharge, les évolutions des variables contraintes, déformations et température en couleur marron, à comparer avec les courbes noires qui sont obtenues pour δ valant zéro.





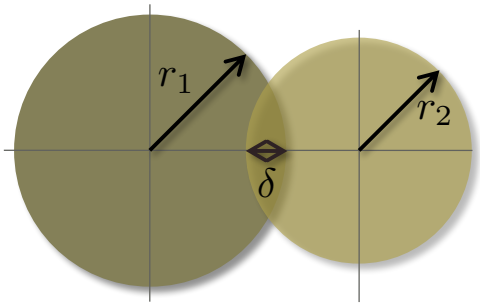


La première courbe montre une aire d'hystérésis augmentée, alors que les variations de températures sont pratiquement inchangées sur la deuxième figure. La troisième figure permet de voir que lorsqu'on rajoute un terme de dissipation intrinsèque, les lignes du domaine de transition sont mobiles avec la transformation.

$-A_x = \frac{\partial\varphi}{\partial\dot{x}} = \frac{\partial\psi}{\partial x}$ qui s'écrit maintenant $\bar{A}_x \in \partial_x I_C - \partial_x\varphi_{\dot{x}}$.

Interaction entre cellules – Modèle JKR modifié

Le modèle d'interaction retenu pour les contacts cellule-cellule ou cellule-substrat est celui déjà utilisé dans les thèses d'Itthichaï Preechawuttipong et de Somchaï Pattana. C'est le modèle dit "d'adhésion géométrique" qui est dérivé des modèles JKR (Johnson, Kendall, Roberts).

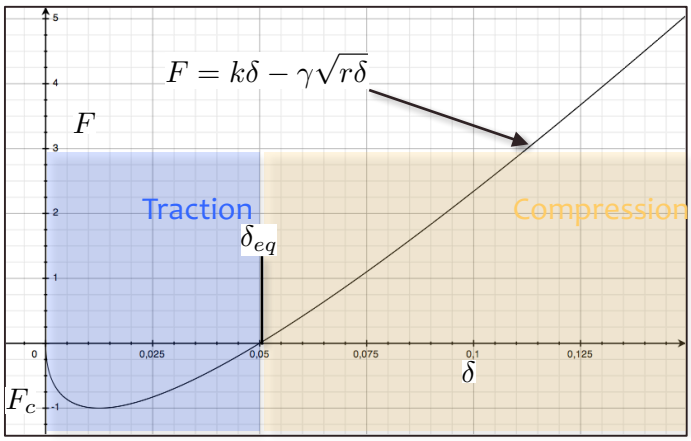


Dans ce modèle, l'interpénétration δ entre deux particules de rayon r est un indicateur à la fois du niveau de répulsion et du niveau d'adhésion. Cette interpénétration pilote les actions mécaniques entre cellules ou entre cellule et substrat. Si les rayons des deux cellules sont différents on utilise alors pour r un rayon réduit.

La force normale F entre particules est donnée par :

$$F = k\delta + \alpha\dot{\delta} - \gamma\sqrt{r\delta} \qquad (1)$$

où k est un coefficient de répulsion (rigidité de répulsion), γ un coefficient d'attraction (énergie d'adhésion) et α un coefficient de viscosité dont l'existence est plutôt liée à des considérations numériques.



Le schéma ci-dessus représente la courbe des interpénétrations à l'équilibre sous une force extérieure appliquée.

La position d'équilibre δ_{eq} entre deux cellules, pour une force extérieure nulle, est donnée par :

$$\delta_{eq} = r(k/\gamma)^2 \qquad (2)$$

Cette valeur δ_{eq} sépare la zone de traction à l'interface de la zone de compression à l'interface.

Si l'interface est mise en traction, la liaison peut supporter un effort valant F_C .

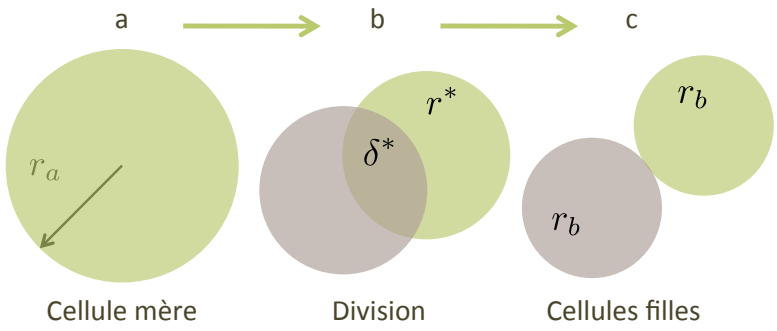
$$F_c = -\frac{r\gamma^2}{4k}$$

Ce modèle permet donc de traiter assez simplement les contacts entre cellules et entre une cellule et un plan (substrat par exemple). Par le choix des paramètres de rigidité de répulsion et d'adhésion, on peut créer une adhésion au contact tout en minimisant l'interpénétration entre corps. L'interpénétration n'a ici rien de physique : elle peut être considérée comme une idéalisation de la déformation au contact des deux corps. On pourra également rajouter des actions de type frottement au contact.

Modélisation de la division cellulaire

La division des cellules est traduite de façon purement géométrique et obéit à des cinétiques en temps qui sont censées reproduire le cycle mitotique dans sa globalité.

Pour modéliser une division cellulaire on commence par "dédoubler" la cellule mère (phase a sur le schéma ci-dessous). On superpose donc à la cellule mère une autre cellule de même rayon en interaction avec la première, et on choisit une rigidité de contact artificielle k_a telle que l'interpénétration entre les deux cellules soit égale au diamètre de la cellule.



Durant la division proprement dite (phase b) la rigidité de répulsion k^* est contrôlée pour amener l'interpénétration à une valeur nulle. A chaque instant, on a $\delta^* = r^*\gamma^2/k^{*2}$.
Dans le même temps le rayon des cellules est également contrôlé pour assurer la conservation du volume total. La division se termine à la phase c où les deux cellules filles deviennent indépendantes. Elles pourront ensuite croitre, puis se diviser à leur tour. Toutes les étapes de croissance de division, voire de maturation sont pilotées en temps suivant des cinétiques choisies pour traduire au mieux les phénomènes décrit par les biologistes.
Tous les paramètres qui interviennent dans les équations traduisant les interactions mécaniques ou les différentes cinétiques peuvent être couplés aux valeurs des efforts, à des aspects plus biologiques ou à des aspects "environnementaux" (nutriments, …).