

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche
Scientifique



Université de Batna 2
Faculté de Technologie
Département de Génie Mécanique



THÈSE

Présentée pour l'obtention du diplôme de
DOCTORAT en SCIENCES
Spécialité : Mécanique
Option : Construction Mécanique

Par

FEDAOUI KAMEL

Thème

**Application des approches statistiques et numériques
de l'homogénéisation des milieux hétérogènes
aléatoires sur des composites triphasiques et
généralisation pour les milieux à N-phases**

Soutenue le 15/05/2017 devant le jury :

BRIOUA Mourad	Prof.	Université de Batna 2	Président
MADANI Salah	Prof.	Université de Batna 2	Encadreur
KANIT Toufik	HDR.	Université de Lille 1 -France	Co-encadreur
ZIDANI Mosbah	Prof.	Université de Biskra	Examineur
DJEBAILI Hamid	Prof.	Université de Khenchela	Examineur
BENBOUTA Rachid	Prof.	Université de Batna 2	Examineur

Dédicace

A la mémoire de mon cher père

A ma très chère maman Que dieu la garde

A toute ma famille

Kamel

Remerciements

Ce travail de thèse a été effectué au niveau du Laboratoire de Mécanique des Structures et Matériaux (LaMSM) du département de Mécanique, Faculté de Technologie de l'Université de Batna 2.

J'adresse mes remerciements à mes directeurs de thèse le **Pr. MADANI Salah** de l'université de Batna 2 et le **Dr. KANIT Toufik** de l'Université Sciences et Technologies de Lille 1, France, pour leurs contributions très importantes sur tous les plans et pour la disponibilité durant cette période.

J'adresse mes vifs remerciements à monsieur le Pr. **Mourad BRIOUA** qui a accepté d'examiner et de présider mon jury de thèse.

Mes vifs remerciements sont également adressés à messieurs **Rachid BENBOUTA**, **Hamid DJEBAILI** et **Mosbah ZIDANI** d'avoir accepté de juger ce travail.

Mes remerciements s'adressent également à tous les enseignants et doctorants du département de mécanique et du laboratoire qui ont contribué à la réalisation de ce travail. Je remercie notamment **Mohamed Said BOUTAANI** surtout pour la génération des microstructures et **Wahid KADDOURI**, spécialement, pour les discussions techniques sur l'homogénéisation. Sans oublier **Nassim, Hicham, Lahcen, Youcef, Toufik, belkacem et les autres**.

Enfin, je remercie mes amis et collègues du travail, pour leur soutien. Un grand remerciement pour tous ceux qui ont contribué de près ou de loin à la réalisation de ce travail.

Table des matières

Introduction générale.....	1
Démarche scientifique.....	1
Plan de thèse.....	2
Chapitre 1 : Aperçu sur les méthodes d’homogénéisation	4
1.1 Généralités sur les techniques d’homogénéisation.....	4
1.2 Homogénéisation numérique.....	7
1.3 Les calculs numériques mécanique/thermique.....	12
1.4 Bornes et modèles analytiques	12
1.5 Conclusion.....	12
1.6 Bibliographie.....	13
Chapitre 2 : Homogénéisation des matériaux hétérogènes élastiques à N-phases	15
2.1 Introduction	15
2.2 Matériaux et Méthodes.....	18
2.3 Concept de la morphologie équivalente	35
2.4 Conclusion.....	37
2.5 Bibliographie.....	38
Chapitre 3 : Conductivité thermique des matériaux hétérogènes à N-phases.....	42
3.6 Introduction	42
3.7 Matériaux et Méthodes.....	43
3.8 Résultats et discussion.....	48
3.9 Conclusion.....	52
3.10 Bibliographie.....	53
Chapitre 4 : Homogénéisation des matériaux hétérogènes élasto-plastiques à N-phases.....	54
4.1 Introduction	55
4.2 Matériaux et méthodes	56
4.3 Résultats et discussion.....	61
4.4 Conclusion.....	71
4.5 Bibliographie.....	72
Conclusion générale	74

Annexe 1	75
Propriétés élastiques en 2D	75
Modèle Self-consistent	75
Bornes de Hashin et Shtrikman	75
Annexe 2	78
Le modèle cohérent de Bruggeman	78
Estimation de Maxwell et Garnett	78

Liste des tableaux

Tableau 1. Propriétés élastiques du matériau à 3 et 4-phases considérée.	19
Tableau 2. Propriétés élastiques effectives du matériau à 3-phases.....	24
Tableau 3. Propriétés élastiques effectives du matériau à 4-phases.....	24
Tableau 4. Portée intégrale A obtenue par fittage et VERD, pour un matériau à 3-phases avec et un composite à 4-phases.....	33
Tableau 5. Nombre de réalisations n utilisé pour tous les domaines considérés classe V ou M. ...	34
Tableau 6. Propriétés élastiques effectives obtenues pour le composite à 3-phases.....	36
Tableau 7. Propriétés élastiques effectives, obtenues pour le composite à 4-phases.....	36
Tableau 8. Propriétés thermique de chaque phase.	44
Tableau 9. Cas des composites utilisés dans les simulations numériques.	45
Tableau 10. Taille du VER obtenue par simulations numériques.....	50
Tableau 11. Propriétés mécaniques des phases.	57
Tableau 12. Caractéristiques des réalisations considérées pour le composite à 3-phases.....	59
Tableau 13. Caractéristiques des réalisations considérées pour le composite à 4-phases.....	59
Tableau 14. Erreur pour chaque groupe de réalisations pour le composite à 3-phases.....	70
Tableau 15. Erreur pour chaque groupe de réalisations pour le composite à 4-phases.....	70

Liste des figures

Figure 1. Principe de l'approche d'homogénéisation des matériaux hétérogènes.	5
Figure 2. Approche et principe de l'homogénéisation numérique.....	5
Figure 3. Exemple de VER d'une microstructure hétérogène.	7
Figure 4. Organigramme de Poisson.	8
Figure 5. Microstructure générée par RSA, (a) image virtuelle. (b) maillage des particules et (c) maillage du composite.....	9
Figure 6. Mosaïque de Voronoï généré par le processus de Poisson : (a) microstructure avec 8000 grains et (b) maillage de la microstructure.....	9
Figure 7. Microstructure virtuelle d'un élastomère chargé de particules, générée par le processus de Poisson et son maillage.	10
Figure 8. Maillage de la microstructure.	11
Figure 9. Exemples de matériau, (a) 3-phases avec différents diamètres des inclusions, (b) 3-phases avec des diamètres identiques des inclusions et (c) 4-phases avec des diamètres identiques des inclusions.	19
Figure 10. Exemples de microstructures étudiées par élément finis, (a) composite à 3-phases avec des CAL KUBC, (b) composite à 4-phases avec des CAL périodiques.	22
Figure 11. Évolution du module apparent de cisaillement en fonction du nombre d'éléments finis pour le composite à 3-phases.	23
Figure 12. Valeurs et intervalles de confiance des, (a) modules de compressibilité (b) modules de cisaillement, en fonction de la taille de volume du matériaux à 3-phases avec les CAL périodiques et $P_1 = P_2 = 5\%$, $D_1 = D_2$	25
Figure 13. Valeurs et intervalles de confiance des, (a) modules de compressibilité (b) modules de cisaillement, en fonction de la taille de volume du matériaux à 3-phases avec les CAL périodiques et $P_1 = P_2 = 15\%$, $D_1 = D_2$	27
Figure 14. Valeurs et intervalles de confiance des, (a) modules de compressibilité (b) modules de cisaillement, en fonction de la taille de volume du matériaux à 3-phases avec les CAL périodiques et $P_1 = P_2 = 25\%$, $D_1 = D_2$	28

Figure 15. Valeurs et intervalles de confiance des, (a) modules de compressibilité (b) modules de cisaillement, en fonction de la taille de volume du matériaux à 3-phases avec les CAL périodiques et $P_1 = 20\%$, $P_2 = 10\%$, $D_1 \neq D_2$	29
Figure 16. Valeurs et intervalles de confiance des, (a) modules de compressibilité (b) modules de cisaillement, en fonction de la taille de volume du matériau à 4-phases avec les CAL périodiques et $P_1 = P_2 = P_3 = 10\%$, $D_1 = D_2 = D_3$	31
Figure 17. Concept de la morphologie équivalente.....	37
Figure 18. Processus de génération des microstructures.....	44
Figure 19. Exemple de matériau utilisé dans cette investigation, (a) matériau à 4-phases, (b) matériau à 3-phases, (c) variation de la température pour le matériau à 3-phases avec 10 inclusions.....	45
Figure 20. Variation de la conductivité thermique λ^{app} en fonction de la taille du volume, matériau à 3-phases, cas 1.....	48
Figure 21. Variation de la conductivité thermique λ^{app} en fonction de la taille du volume, matériau à 3-phases, cas 2.....	48
Figure 22. Variation de la conductivité thermique λ^{app} en fonction de la taille du volume, matériau à 3-phases, cas 3.....	49
Figure 23. Variation de la conductivité thermique λ^{app} en fonction de la taille du volume, matériau à 3-phases, cas 4.....	49
Figure 24. Variation de la conductivité thermique λ^{app} en fonction de la taille du volume, matériau à 4-phases, cas 5.....	50
Figure 25. Variation de la conductivité thermique λ^{app} en fonction de la fraction volumique, matériau à 3-phases.....	51
Figure 26. Exemples de composites étudiés.....	57
Figure 27. Description des conditions aux limites.....	58
Figure 28. Courbes contraintes-déformations apparentes (lignes minces) et comparaison avec la courbe moyenne (ligne épaisse) pour les différentes configurations du composite à 3-phases, $P = 70\%$: (a) ($p = 9, n = 24$), (b) ($p = 4, n = 76$).....	62

Figure 29. Courbes contraintes-déformations apparentes (lignes minces) et comparaison avec la courbe moyenne (ligne épaisse) pour les différentes configurations du composite à 3-phases, $P = 70\%$: (a) ($p = 4, n = 100$) , (b) ($p = 1, n = 200$).....	63
Figure 30. Courbes contraintes-déformations apparentes pour le matériau à 4-phases : (a) VER($p = 1, n = 300$), $P = 70\%$ (b) pour petit-volume ($p = 36, n = 3$) en traction suivant x.....	64
Figure 31. Courbes contraintes-déformations apparentes pour le matériau à 4-phases : $P = 70\%$, pour petit-volume ($p = 36, n = 3$), (a) en traction suivant y et (b) comparaison des courbes moyennes dans les deux directions x et y.	65
Figure 32. Courbes de contraintes-déformations apparentes (lignes minces) et comparaison avec la courbe moyenne (ligne épaisse) pour les différentes configurations du composite à 3-phases, $P = 70\%$: (a) ($p = 9, n = 24$) , (b) ($p = 4, n = 76$).....	66
Figure 33. Courbes de contraintes-déformations apparentes (lignes minces) et comparaison avec la courbe moyenne (ligne épaisse) pour les différentes configurations du composite à 3-phases, $P = 70\%$: (a) ($p = 4, n = 100$) , (b) ($p = 1, n = 200$).....	67
Figure 34. Courbes contraintes-déformations apparentes (lignes minces) et comparaison avec la courbe moyenne (ligne épaisse) pour les différentes configurations du composite à 4-phases, $P = 70\%$: (a)($p = 36, n = 3$) , (b)($p = 4, n = 99$).....	68
Figure 35. Courbes contraintes-déformations apparentes (lignes minces) et comparaison avec la courbe moyenne (ligne épaisse) pour les différentes configurations du composite à 4-phases, $P = 70\%$: (a)($p = 4, n = 150$) , (b)($p = 1, n = 300$).....	69

Introduction générale

Ce travail de thèse a été réalisé au niveau du laboratoire de Mécanique des Structures et matériaux (LaMSM) de l'université de Batna 2, en collaboration avec le Laboratoire de Mécanique de Lille - France. Cette étude est une continuité des travaux menés au Laboratoire (LaMSM) sur la modélisation par changement d'échelles en mécanique des milieux continus.

Du point de vue scientifique, cette thèse s'inscrit dans le cadre de la modélisation des milieux hétérogènes aléatoires et du calcul des microstructures. Le comportement des matériaux à l'échelle d'une structure est fortement dépendant des phénomènes physiques intervenant à l'échelle de leur microstructure. Les techniques de modélisation par changement d'échelles, ou d'homogénéisation, ont pour objectif de prendre en compte des informations sur la microstructure des matériaux, notamment des informations morphologiques, dans leurs modèles de comportement. Par ailleurs, les progrès constants des moyens de calcul permettent de simuler le comportement de volumes élémentaires de plus en plus représentatifs des microstructures étudiées. Enfin, les calculs des microstructures constituent le seul moyen d'évaluer le comportement de matériaux qui ne sont pas encore développés.

L'objectif de cette thèse est de modéliser le comportement mécanique et thermique des matériaux hétérogènes multi-phases par une approche multi-échelles. Les modèles analytiques actuels permettent d'estimer de façon satisfaisante leurs propriétés effectives, ainsi que les valeurs moyennes des contraintes et déformations dans chaque constituant. L'objectif de la thèse est de donner une définition plus compacte de la notion de la portée intégrale et de définir la notion de morphologie équivalente d'un matériau hétérogène multi-phases.

Démarche scientifique

La démarche scientifique adoptée dans ce travail se décompose en deux étapes :

Générer des échantillons numériques du milieu hétérogène considéré. Tout d'abord, il s'agit de développer une méthode permettant de générer des échantillons numériques de microstructures aléatoires constituées d'inclusions séparées dans une matrice, distribuées

aléatoirement. Plusieurs échantillons seront générés afin de caractériser statistiquement la morphologie du milieu réalisé. Il s'agit, enfin, de mailler ces microstructures afin de caractériser leur comportement mécanique par simulation numérique (éléments finis).

Analyser le comportement mécanique et thermique de ces échantillons. Les échantillons numériques seront soumis à diverses sollicitations mécaniques et thermiques afin d'analyser leur comportement apparent, ainsi que la distribution des contraintes locales.

Plan de thèse

Le premier chapitre propose un aperçu bibliographique sur l'homogénéisation des matériaux hétérogènes aléatoires, que ce soit sur les modèles analytiques classiques développés dans ce cadre ou sur un certain nombre de résultats sur le comportement mécanique de milieux de type inclusions-matrice, leur caractérisation morphologique et mécanique. Ce chapitre est consacré aussi à la modélisation de la microstructure. Il présente les techniques utilisées pour la génération des échantillons numériques et la méthode de maillage d'une telle géométrie.

Le second chapitre présente les résultats obtenus pour les matériaux élastiques à n -phases séparées. Plusieurs cas de matériaux avec différents nombres de phases sont analysés et les propriétés effectives mécaniques de compressibilité et de cisaillement sont évaluées. Des expressions de la portée intégrale comme paramètre statistique définissant la microstructure est donnée pour les cas étudiés. Le principe ou la notion de la morphologie équivalente est généralisé pour le cas des matériaux à n -phase élastique. Cette modélisation est réalisée grâce au code de calcul ZéBulon. Nous présentons la notion de morphologie équivalente et le développement d'une formule analytique pour la détermination des caractéristiques mécaniques de cette morphologie.

Le troisième chapitre traite de la caractérisation du comportement thermique des échantillons numériques. Nous présentons les simulations numériques réalisées. Puis, nous étudions l'influence de différents paramètres de la modélisation (maillage, conditions aux limites, etc.) sur les résultats de la caractérisation. Cette modélisation est réalisée grâce au code de calcul Comsol ainsi que les logiciels Matlab et Mathematica.

Dans le quatrième chapitre, la technique d'homogénéisation basée sur la notion de volume élémentaire représentatif VER est utilisée pour prédire la réponse mécanique des microstructures et arriver à prédire avec un nombre de réalisation minimale le comportement mécanique macroscopique sans passer par des échantillons de grande taille. Nous avons noté que plusieurs réalisations du matériau composite à N-phases donnent presque le même résultat qu'un VER de grande taille. Cette modélisation est réalisée grâce au code de calcul ZéBulon.

Enfin la thèse s'achève par les conclusions tirées de ce travail et propose différentes perspectives de recherche.

Chapitre 1 : Aperçu sur les méthodes d'homogénéisation

Le but de ce chapitre est de décrire la méthodologie de l'homogénéisation des matériaux hétérogènes, les techniques de génération et de maillage des microstructures 2D/3D.

1.1 Généralités sur les techniques d'homogénéisation

L'approche d'homogénéisation consiste à définir le comportement d'un matériau hétérogène à partir de la connaissance des comportements (thermique, mécanique, électrique et autres) de ses différents composants élémentaires.

Le matériau hétérogène peut être remplacé par un milieu homogène équivalent qui a les mêmes propriétés effectives calculées. Le calcul des contraintes moyennes ou effectives ainsi que les déformations moyennes ou effectives du milieu homogène équivalent est l'analyse de niveau globale. Le terme « homogénéisation » est le processus dont lequel sont calculées les propriétés effectives, Chaboche [1]. Un autre terme utilisé est la « localisation » pour déterminer la déformation et la contrainte locale ; ils peuvent être calculés en employant le rapport entre la contrainte moyenne et locale obtenue de l'analyse locale, Gitman [2].

Les figures 1 et 2, montrent la description de l'approche d'homogénéisation et les éléments nécessaires pour le passage Micro-Macro et pour l'analyse multi-échelle. On note bien que la méthode d'homogénéisation consiste à substituer un matériau hétérogène par un matériau homogène, dit matériau homogène équivalent (MHE), qui répond globalement à un chargement quelconque de la même façon. Bien sûr, ces méthodes s'appliquent à de nombreux problèmes de la physique et de mécanique tels que la conduction thermique, l'élasticité linéaire, la plasticité, la visco-plasticité, l'électromagnétisme, etc.

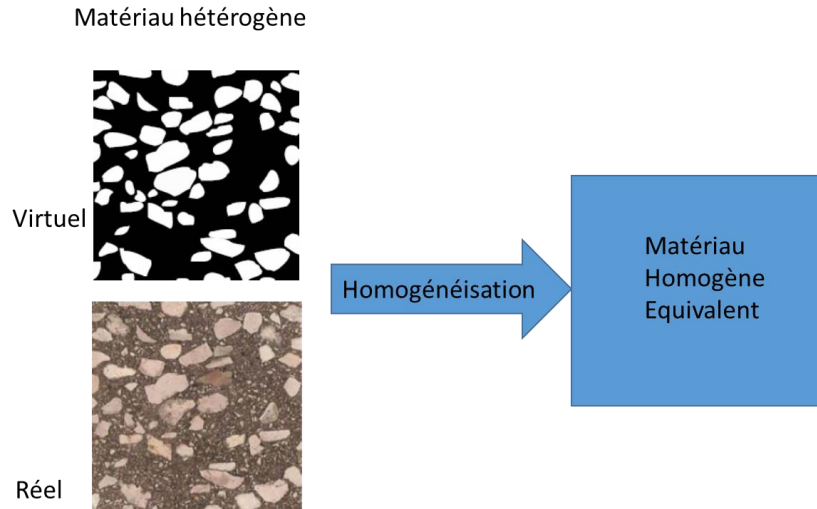


Figure 1. Principe de l'approche d'homogénéisation des matériaux hétérogènes.

L'application de la procédure d'homogénéisation est basée sur le choix d'un plus petit volume élémentaire qui doit être représentatif du comportement macroscopique au niveau microscopique.

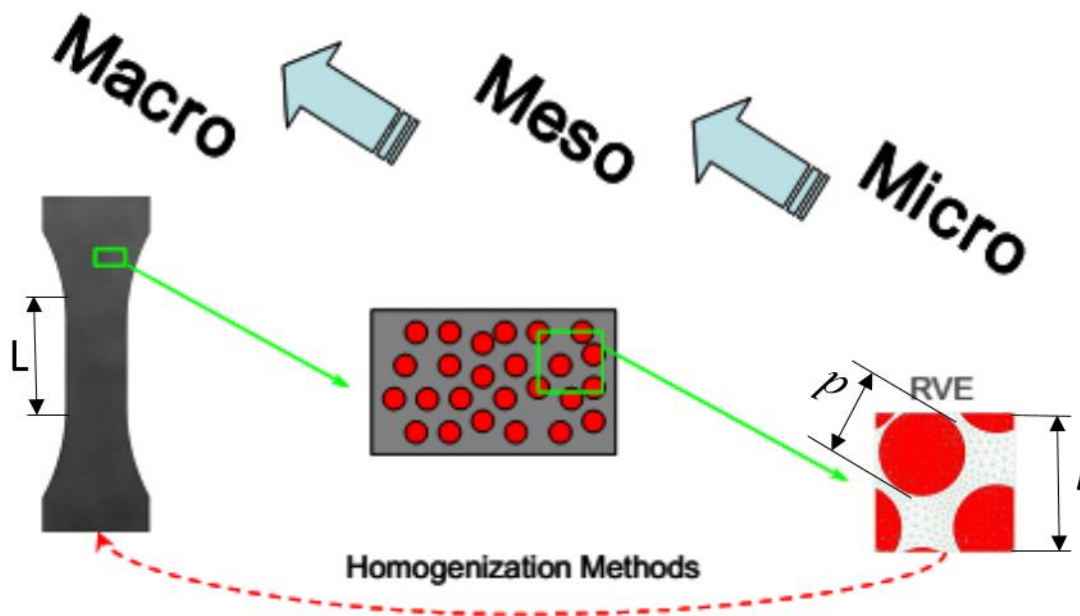


Figure 2. Approche et principe de l'homogénéisation numérique

Ce volume est appelé volume élémentaire représentatif (VER), qui est décrit dans [1] selon les conditions d'échelles suivantes, figure 2 :

Si d est la taille caractéristique des hétérogénéités, et L la taille caractéristique de la structure macroscopique considérée, alors la taille caractéristique l du VER est soumise à deux conditions : $l \ll L$: c'est la condition pour qu'on puisse traiter le matériau comme un milieu continu et y déterminer des champs continus de contraintes et de déformations.

$l \gg d$: c'est la condition nécessaire pour pouvoir affecter au VER un comportement macroscopique homogène malgré son hétérogénéité méso/micro-scopique.

1.1.1 Notion de VER dans un matériau hétérogène

La description d'un matériau doit être suffisamment riche et réaliste pour estimer correctement les comportements macroscopiques. Pour cela, on doit définir une taille optimale pour la description géométrique suffisante de la microstructure représentative pour la propriété que l'on souhaite estimer. On parle ici de volume élémentaire représentatif VER.

Le VER est capital pour l'évaluation de la réponse globale dans un matériau hétérogène. La connaissance de la taille du VER est un élément essentiel lors de la prédiction des propriétés effectives thermiques ou mécaniques. Cette taille dépend de la nature et des constituants du matériau.

Dans la littérature, Plusieurs définitions sont proposées pour le concept VER, il suffit de consulter le travail de Gitman *et all* [2]. La taille du VER doit d'être beaucoup plus grande que la plus grosse des hétérogénéités et en plus négligeable aussi devant la taille de la microstructure. Il faut noter que l'emploi des méthodes d'homogénéisation requière la connaissance de la taille du VER. La figure 3 montre des exemples de VER dans une microstructure à 2-phases. Dans le même exemple de microstructure, on distingue différentes situations, dites réalisations, pour représenter la taille d'un VER. La différence entre ces exemples de réalisations concerne le nombre d'hétérogénéités dans le volume, la morphologie, la disposition des hétérogénéités et finalement leurs distributions et leurs natures.

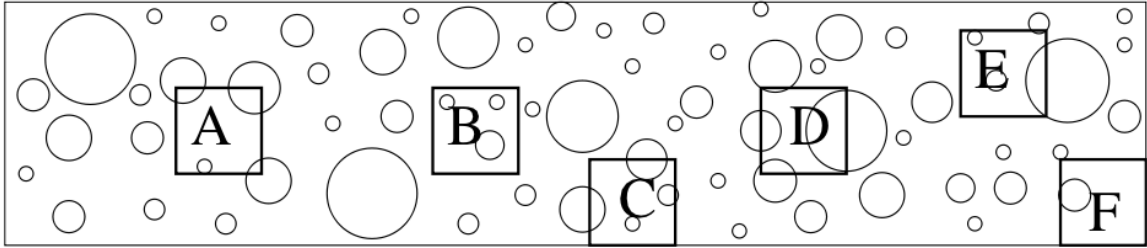


Figure 3. Exemple de VER d'une microstructure hétérogène.

1.2 Homogénéisation numérique

La mécanique des matériaux hétérogènes s'est longtemps limitée aux approches analytiques. Les progrès considérables des capacités en espace de stockage mémoire et puissance des moyens de calcul ont boosté l'utilisation de la simulation numérique. Le principe de l'homogénéisation numérique est basé sur l'utilisation de la notion du VER. On remarque que la première étape consiste au choix du VER puis la définition de la géométrie globale du matériau et finalement vient le maillage et la simulation numérique du comportement thermique ou mécanique.

1.2.1 Outils et méthodologie

Cette partie présente une description de la méthodologie de génération et de maillage des microstructures multi-phases 2D/3D. Ces microstructures multi-phases, contenant une distribution aléatoire d'inclusions de forme circulaire/sphérique.

L'homogénéisation numérique des matériaux hétérogènes passe par trois étapes principales :

- La génération des échantillons numériques du milieu hétérogène considéré 2D/3D ;
- Le maillage des images/volumes ;
- Les calculs numériques mécaniques/thermiques.

1.2.2 Génération des échantillons numériques du milieu hétérogène

Dans ce travail de thèse, les exemples de microstructures 2D/3D sont générés suivant le processus de Poisson. Ce dernier est bien adapté aux microstructures aléatoires et isotropes. C'est le fondement de la majorité des modèles probabilistes de génération des structures. Ce processus

a été utilisé par plusieurs auteurs, Kanit [3] pour la génération des microstructures aléatoires des mosaïques de Voronoï, puis par Jean [4] pour la génération des microstructures des élastomères renforcés par le noir de carbone et par El Moumen [5]. L'intérêt des modèles aléatoires est de permettre facilement la création de nouveaux exemples de matériaux sans passer par les morphologies des matériaux réels, complexes des microscopes ou de la tomographie.

La distribution des particules dans le domaine 2D/3D de la microstructure est générée de la façon suivante : les centres M_i des sphères sont générés aléatoirement dans l'espace 2D selon un processus de Poisson. Pour notre cas d'étude, il n'y a ni contact ni interpénétration entre les particules, une distance de répulsion est imposée afin de satisfaire cette condition. Si la position M_i de l'inclusion ne satisfait pas la distance minimale de répulsion, elle est remplacée de nouveau jusqu'à ce que la condition soit vérifiée dans une autre position du volume. Des nouvelles inclusions sont rajoutées par la même façon jusqu'à ce qu'on obtient la fraction volumique souhaitée, voir figure 4.

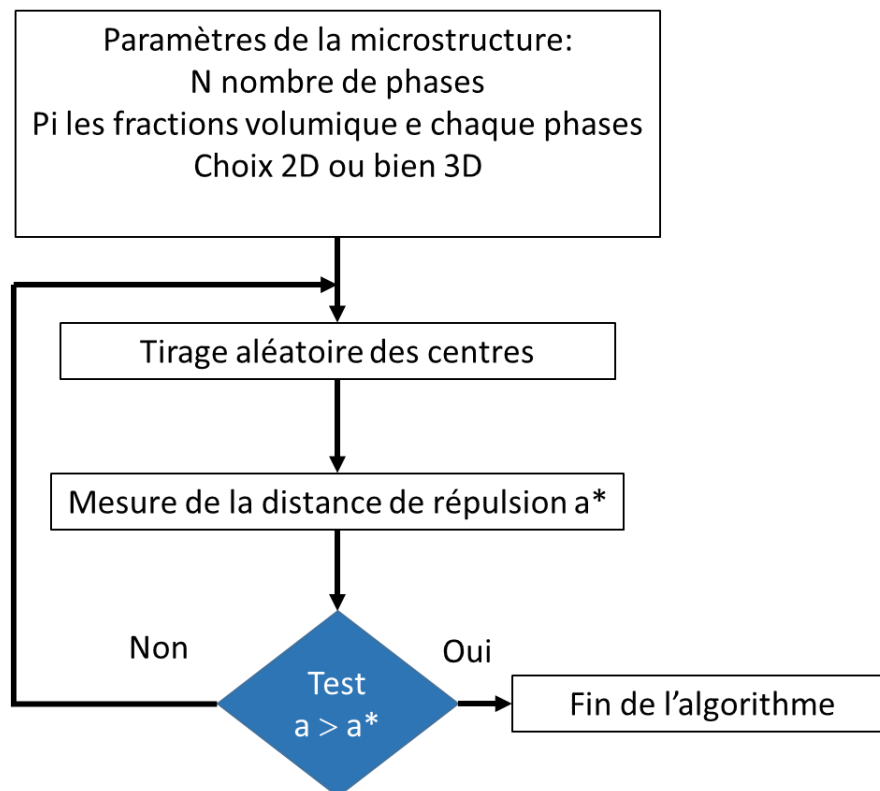


Figure 4. Organigramme de Poisson.

Parmi les algorithmes existant les plus utilisés pour la génération et la simulation des matériaux hétérogènes on cite aussi, le Random Sequential Adsorption (RSA). Celui-ci consiste à générer de façon aléatoire des particules sphériques et identiques d'une manière séquentielle, on peut citer Segurado and Llorca [6], Kari [7] pour les particules sphériques, puis Pierard [8] pour le cas des ellipses.

Les figures 5 et 6 montrent des exemples de microstructures hétérogènes virtuelles générées respectivement par les deux algorithmes de la morphologie mathématique : RSA et le Processus de Poisson.

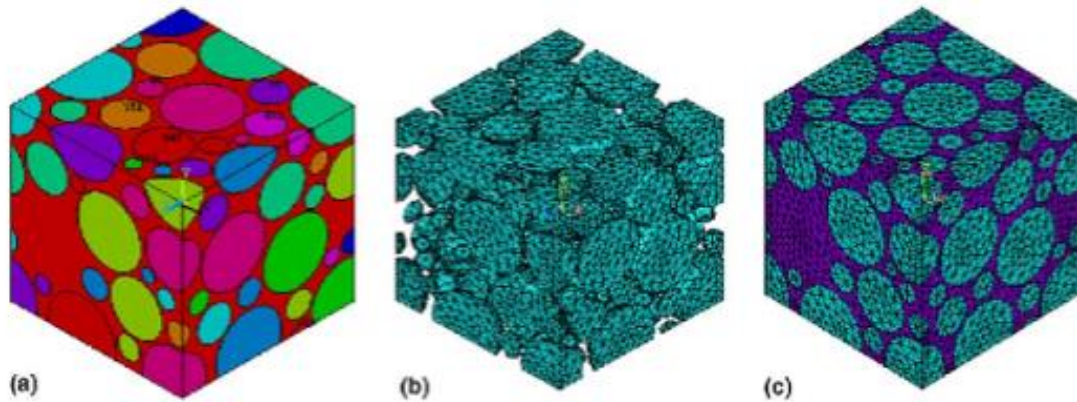


Figure 5. Microstructure générée par RSA, (a) image virtuelle. (b) maillage des particules et (c) maillage du composite.

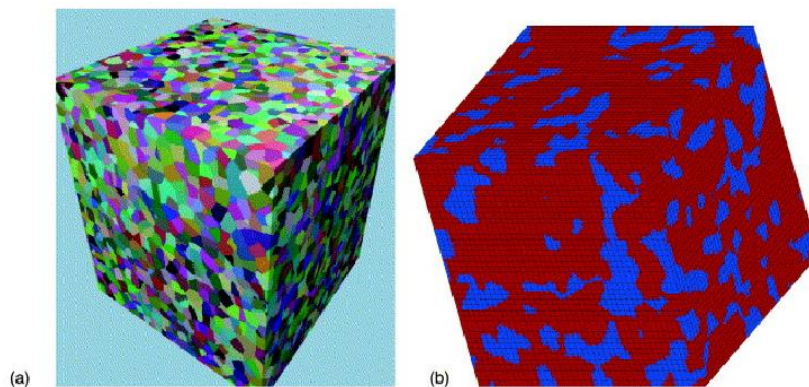


Figure 6. Mosaïque de Voronoï généré par le processus de Poisson : (a) microstructure avec 8000 grains et (b) maillage de la microstructure.

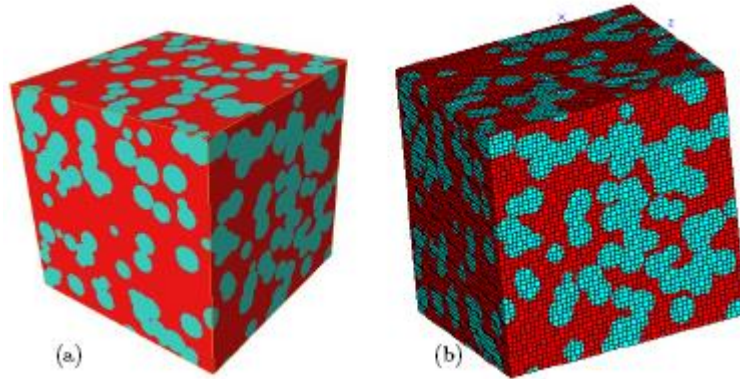


Figure 7. Microstructure virtuelle d'un élastomère chargé de particules, générée par le processus de Poisson et son maillage.

Nous nous intéressons dans notre cas aux microstructures multi-phases aléatoires générées virtuellement par le processus de Poisson. Les microstructures sont de type matrice inclusion. Les microstructures sont générées pour les différentes fractions volumiques prédéfinies.

1.2.3 Maillage des microstructures

Le choix des méthodes numériques pour résoudre le problème de microstructure nous oblige à utiliser la méthode des éléments finis. Cela nécessite la génération d'un maillage discrétisant la géométrie ou bien la microstructure 2D/3D. La technique de création et maillage d'un matériau hétérogène s'appuie sur deux phases : représentation surfacique de matériau ; maillage surfacique.

La première phase est la représentation des microstructures : elle est obtenue en utilisant les outils de conception assistée par ordinateur (CAO). Les microstructures 2D/3D obtenues sont finalement introduites dans des logiciels pour une discrétisation réaliste, voir figure 8.

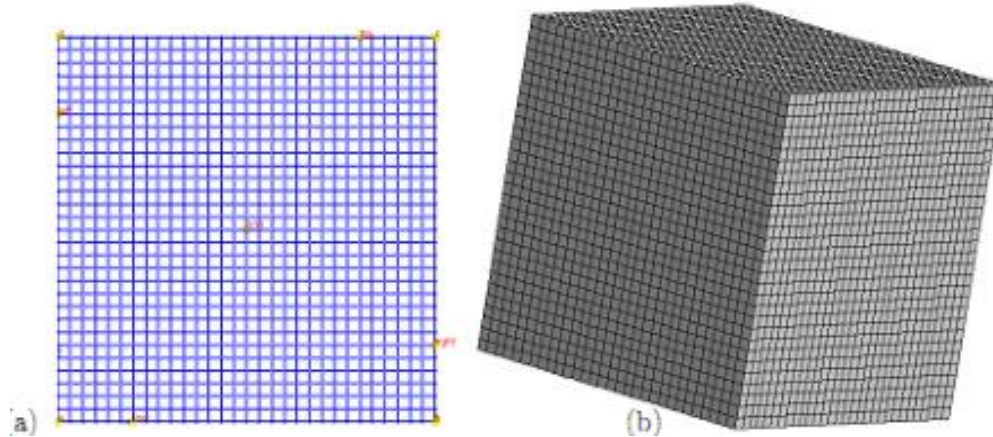


Figure 8. Maillage de la microstructure.

La phase suivante consiste à superposer le maillage sur des images de microstructure 2D/3D générées par le processus de Poisson. Deux méthodes de maillage existent, la technique de maillage multi-phase et la technique de maillage libre. La méthode des éléments multi-phases est déjà utilisée par plusieurs chercheurs, voir Barbe [9] pour une étude élasto-plastique des matériaux hétérogènes, Jean [4], El Moumen [5], Kanit [10], Oumarou [11] et Khdir [12] pour le maillage des images réelles d'un composite obtenues par microscope à transmission.

Dans cette méthode, le comportement mécanique ou thermique associé aux phases est attribué à chaque point d'intégration de chaque élément. L'utilisation de cette méthode dans le cadre de ce travail vient du fait que dans les travaux précédents, une comparaison entre cette méthode et d'autres types de maillage a été effectuée.

La deuxième méthode est le maillage libre qui se base sur le maillage de chaque phase de la microstructure 2D/3D séparément, ce qui engendra une taille très importante en ce qui concerne l'espace mémoire. L'utilisation de cette technique nécessite les moyens de calcul puissants donc un coût élevé.

Par comparaison entre les deux techniques et selon les résultats finaux, les valeurs des grandeurs macroscopiques sont identiques dans les deux cas du maillage, sachant que le nombre des EFs utilisé dans le cas d'un maillage multiphasique est inférieur au cas du maillage libre. Cette différence au niveau du nombre des EF influence le temps de compilation ainsi que la mémoire des machines demandée. Il est à noter que la méthode des éléments multi-phases

nécessite peu de mémoire et peu du temps de convergence par rapport à la méthode de maillage libre.

Le maillage EF associé pour chaque microstructure est obtenu à l'aide de la méthode des éléments multi-phases, qui est présenté par la figure 6. On rappelle que ces microstructures sont générées selon une distribution poissonnienne, puis implémentées dans le code Zébulon pour les calculs EF.

1.3 Les calculs numériques mécanique/thermique.

Une fois la phase de génération et de maillage des microstructures 2D/3D achevée, l'étape de calcul numérique de la résolution du problème thermique ou mécanique est entamée. Le matériau est sollicité par des efforts mécanique ou bien thermique suivant le cas des propriétés effectives voulus. Dans ce cas des conditions aux limites spéciales dans le monde de l'homogénéisation des matériaux hétérogènes sont imposées et utilisées. Dans les chapitres 2, 3 et 4 seront présentées ces conditions aux limites pour chaque cas étudié.

1.4 Bornes et modèles analytiques

Plusieurs travaux sur les bornes encadrant les propriétés effectives, et les modèles donnant des estimations approchées sont proposés. Il existe plusieurs types de bornes qui se différencient par la précision de prédiction. Les estimations analytiques donnent des valeurs acceptables des propriétés effectives, pour quelques types de matériau hétérogène. Dans ce travail, les modèles analytiques sont présentés dans l'annexe 1 pour le cas élastique et l'annexe 2 pour le cas thermique.

1.5 Conclusion

Deux éléments importants d'études des matériaux hétérogènes ont été abordés. La recherche d'une relation existante entre le comportement macroscopique et le comportement microscopique des phases a été choisie comme objectif final pour l'homogénéisation des matériaux étudiés dans ce travail.

Dans ce chapitre, une présentation de la méthodologie de construction et de maillage d'une microstructure hétérogène multi-phases 2D/3D a été expliquée. La méthode utilisée est nommée "méthode des éléments multi-phases. La génération des particules dans l'espace est basée sur le processus aléatoire de Poisson. Pour une bonne modélisation, il faut définir une résolution d'images très haute. Il faut noter aussi que la mémoire nécessaire pour un maillage fin doit être prise en compte.

1.6 Bibliographie

- [1] J. Chaboche, P. Suquet, 1998. Endommagement, interfaces. Ecole d'été méthodes d'homogénéisation en mécanique des Matériaux. La Londe-les-Maures.
- [2] I. Gitman, H. Askes, L. Sluys, 2007. Representative volume: Existence and size determination. *Engineering fracture mechanics* 74, 2518–2534.
- [3] T. Kanit, S. Forest, I. Galliet, V. Mounoury and D. Jeulin, 2003. Determination of the size of the representative volume element for random composites: Statistical and numerical approach, *Int. J. Solids. Struct.* (40) 3647–3679
- [4] A. Jean, 2009. Etude d'un élastomère chargé, de la nanostructure au macro-comportement. Thèse de doctorat.
- [5] A. El Moumen, T. Kanit, A. Imad, H. El Minor, 2013. Effect of overlapping inclusions on effective elastic properties of composites. *Mechanics Research Communications*. 53, 24–30.
- [6] J. Segurado, J. Llorca, 2006. Computational micromechanics of composites: The effect of particle spatial distribution. *Mechanics of Materials* 38, 873–883.
- [7] S. Kari, H. Berger, U. Gabbert, 2007. Numerical evaluation of effective material properties of randomly distributed short cylindrical fibre composites. *Computational Materials Science* 39, 198–204.
- [8] O. Pierard, C. Gonzalez, J. Segurado, J. Llorca, I. Doghri, 2007. Micromechanics of elastoplastic materials reinforced with ellipsoidal inclusions. *International Journal of Solids and Structures* 44, 6945-6962.

- [9] F. Barbe, L. Decker, J. Dominique, G. Cailletaud, 2001. Intergranular and intragranular behavior of polycrystalline aggregates. Part 1 : F.E. model. *International Journal of Plasticity* 17, 513–536.
- [10] T. Kanit, F. N’Guyen, S. Forest, D. Jeulin, M. Reed, S. Singleton, 2006. Apparent and effective physical properties of heterogeneous materials: Representativity of samples of two materials from food industry. *Comput. Meth. Appl. Mech. Engng.* 195, 3960–3982.
- [11] M. M. Oumarou, D. Jeulin, D. Renard, P. Castaing, 2012. Multi-scale statistical approach of the elastic and thermal behavior of a thermoplastic polyamid-glass fiber composite. *TECHNISCHE MECHANIK* 32, 484–506.
- [12] Y. K. Khdir, T. Kanit, F. Zaïri and M. Naït-Abdelaziz, 2014. Computational homogenization of plastic porous media with two populations of voids, *Materials Science & Engineering A.*(597) 324–330.

Chapitre 2 : Homogénéisation des matériaux hétérogènes élastiques à N -phases

Ce chapitre est une application de la technique d'homogénéisation des matériaux hétérogènes dans les cas des matériaux élastiques à N -phases.

2.1 Introduction

Le matériau élastique représente une classe très importante des matériaux avec une large variété d'applications s'étendant des structures aérospatiales, des cartes électronique et des équipements électroniques. Les propriétés élastiques effectives des matériaux hétérogènes dépendent essentiellement des propriétés des phases et de leurs fractions volumiques. Tous les matériaux industriels sont hétérogènes puisque chaque constituant présente différentes propriétés suivant l'orientation et peut lui-même être hétérogène à quelques plus petites échelles de longueur.

Il est délicat de déterminer les caractéristiques globales macroscopiques d'un matériau hétérogène dans beaucoup d'applications de technologie. D'une perspective de réduction de temps et de coût, effectuer des mesures expérimentales sur un certain nombre de matériau, pour différentes propriétés des phases, des fractions de volume et le chargement est une tâche à peine faisable. Pour surmonter ce problème plusieurs techniques d'homogénéisation ont émergées pour la prédiction des propriétés élastiques effectives des matériaux hétérogènes. Ceci peut être résolu au moyen de techniques numériques telles que des simulations sur des échantillons de composites Pelissou [1], Wang [2], Sendhil [3], Kanit [4] et Torquato [5], ou en employant des méthodes analytiques. C'est un fait connu que les propriétés mécaniques effectives des matériaux hétérogènes dépendent fortement de la morphologie de chaque phase et de leur distribution dans l'espace, Sab [6], Barbe [7], Kanit [8, 9] et Madi [10].

Il existe beaucoup de modèles analytiques, tels que le modèle d'inclusion, basé sur la solution de l'Eshelby Sanchez [11] et Nemat-Nasser [12]. Le modèle d'inclusion est basé sur la solution de l'élasticité de l'Eshelby pour une inclusion simple émergée dans une matrice infinie [13]. Le modèle cohérent, Budiansky [14] ; le modèle cohérent généralisé ; la méthode de Mori Tanaka par [15, 16] ont été développés sur cette base. Une association du modèle d'inclusion avec la méthode d'élément fini peut être employée pour traiter le problème de forme arbitraire d'inclusion. La méthode différentielle développée par Hashin et Shtrikman [17], Norris [18] et Hashin [19], a été utilisée pour traiter les cas des matériaux composites avec une forte concentration (fraction volumique).

Beaucoup d'investigations ont été formulées pour les problèmes avec le matériau à N -phases ($N \geq 3$). Taya et Mura [20] ont présentés une méthode de détermination des modules élastiques effectives des composites à fibres ellipsoïdes continues. Le travail de Berryman et Berge [21] présente une critique de deux arrangements explicites pour estimer les propriétés élastiques des composés multi-phases. Dans le travail de Klusemann [22] une comparaison de trois stratégies pour traiter des hétérogénéités de formes non elliptiques dans le cadre des méthodes d'homogénéisation. Frank Xu et Chen [23] ont étudié les effets de la taille de l'élément de volume représentatif (VER). Yang [24] a traité le cas des composites à fibre cylindrique présentant des défauts. Le travail de Yang et de Qin [25] a considéré la distribution des fibres dans les composites et a calculé les propriétés élasto-plastiques effective de ce matériau. Un outil a été développé pour prévoir les propriétés effectives des composés de N -phases dont la fraction de volumique est grande pour un seul type d'inclusion et/ou plusieurs genres d'inclusions Yang *et al*, [26]. Dans cette méthode, les inclusions sont traitées point par point et les coefficients effectives de rigidité sont calculés pour le composite dans chaque étape. Pierard dans [27] a employé une procédure en deux étapes d'homogénéisation pour l'élasticité non linéaire.

Dans les travaux de Garboczi et de Day [28], un algorithme a été développé pour calculer les modules effectives des composites en (3D) et (2D), pour des valeurs arbitraires du coefficient de Poisson et du module de Young. Il peut également manipuler les tenseurs élastiques anisotropes de rigidité, pour le N -phases. Cet algorithme peut opérer sur des vraies images 3D numériques des matériaux avec des morphologies complexes. Dans les travaux de Berger [29],

les techniques d'homogénéisation sont employées avec une méthode d'éléments finis (FEM) pour déterminer les propriétés thermomécaniques effectives des composites à 3-phases avec des fibres cylindriques continues enduites dans une matrice. Guinovart-Diaz [30] ont installé un arrangement récursif pour déterminer les propriétés globales de ce matériau multi-phase. Friebel [31] considère des matériaux dont la matrice est renforcée avec des inclusions différentes. Quant au travail du Gal [32], il décrit l'approche en deux étapes d'homogénéisation pour évaluer les propriétés élastiques du béton armé.

Le concept de la morphologie équivalente a été proposé pour la première fois par EL Moumen [33], il permet le remplacement de la morphologie originale des matières composites élastiques biphasées contenant les inclusions sphériques par une autre morphologie appelée « *morphologie équivalente* » contenant les inclusions sphériques dures. Ainsi, avec les résultats obtenus :

Il est possible de remplacer la morphologie des matériaux hétérogènes biphasés contenant les inclusions sphériques qui admit la pénétration entre inclusions dont le rayon est R , appelée le composite 1, avec la fraction de volume P de la phase d'inclusion, par une autre morphologie appelée le composite 2 d'inclusions sphériques dures avec le rayon $2R$ où la fraction volumique des inclusions est égales à $0.6P$. Ces deux composites 1 et leur morphologie équivalente 2 donnent les mêmes propriétés élastiques effective mais pas nécessairement avec le même VER déterministe.

Dans le travail de Khdir [34], le concept de morphologie équivalente est prolongé au matériau poreux avec une matrice plastique. Les calculs ont montrés qu'un matériau poreux aléatoire avec deux populations des vides de différentes tailles peut être remplacé par un matériau poreux aléatoire avec seulement une population des vides et une fraction volumique du vide équivalente.

Le but dans ce chapitre, est d'une part, l'évaluation des propriétés élastiques effectives des composites a N-phases et d'autre part de présenter le concept de morphologie équivalente pour ces matériaux. Une nouvelle expression de la portée intégrale pour le cas de matériaux élastiques hétérogènes aléatoires de N-phases sera proposée.

On montrera que cette portée intégrale qui joue un rôle important dans l'estimation des propriétés effectives est définie comme un paramètre purement géométrique cela égale au volume d'une inclusion dans l'élément de volume représentatif déterministe.

2.2 Matériaux et Méthodes

2.2.1 Génération des microstructures et propriétés élastiques des phases

La première microstructure utilisée dans ce travail est constituée de 3 phases, une matrice m , l'inclusion 1 et l'inclusion 2. Trois fractions volumiques différentes de matrice sont considérées $P=50\%$, 70% et 90% . Les deux phases (inclusion 1 et 2) circulaires ont les mêmes fractions volumiques $P_1 = P_2 = 25\%$, 15% et 5% , le même nombre d'inclusions $M_1 = M_2$, les mêmes diamètres $D_1 = D_2$ et différentes propriétés élastiques. Un deuxième cas est considéré, quand les deux phases d'inclusion ont différentes fractions volumique $P_1 = 20\%$, $P_2 = 10\%$, différents diamètres $D_1 \neq D_2$, le même nombre d'inclusions $M_1 = M_2$ et différentes propriétés élastiques.

La deuxième microstructure est un matériau à 4-phases, une matrice et trois phases différentes d'inclusions. Dans ce cas-ci la fraction volumique choisi est de $P = 70\%$, $M_1 = M_2 = M_3$, $P_1 = P_2 = P_3 = 10\%$, $D_1 = D_2 = D_3$ et différentes propriétés élastiques. La figure 9 montre des exemples de matériau hétérogène employée dans ce travail. Pour la morphologie des inclusions, la forme circulaire est aléatoirement produite par le processus de Poisson. Plusieurs réalisations de microstructure, pour chaque taille de volume, ont été considérées, voir figure 9. Le module de Young E , le coefficient de Poisson ν , le module de compressibilité k et le module de cisaillement μ sont présentés dans le tableau 1.

	E [MPa]	k [MPa]	ν	μ [MPa]
Matrice m	10000	9615	0.3	3846
Inclusion 1	100	96.15	0.3	38.46
Inclusion 2	1	0.9615	0.3	0.3846
Inclusion 3	0.01	0.009615	0.3	0.003846

Tableau 1. Propriétés élastiques du matériau à 3 et 4-phases considérée.

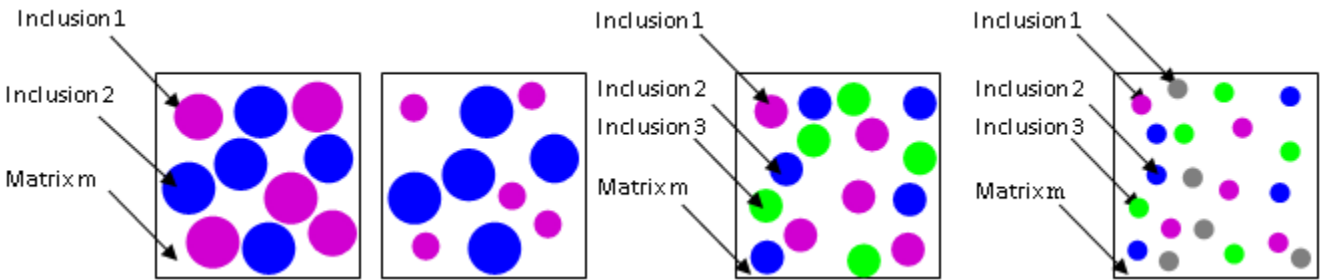


Figure 9. Exemples de matériau, (a) 3-phases avec différents diamètres des inclusions, (b) 3-phases avec des diamètres identiques des inclusions et (c) 4-phases avec des diamètres identiques des inclusions.

2.2.2 Conditions aux limites

Deux types de conditions aux limites (CAL) sont considérés et doivent être appliquées sur un élément de volume V . Dans le cas d'élasticité linéaire, ces conditions sont des conditions aux limites uniformes cinématiques (KUBC) et des conditions de périodicité. La taille minimale du VER exigée pour estimer les propriétés effective est inférieure pour des conditions aux limites périodiques que pour le KUBC. Les résultats obtenus par les conditions aux limites périodiques convergent plus rapidement que ceux obtenus par KUBC. Terada [35], Kouznetsova [36] et Kanit [8] ont démontrés que les conditions aux limites périodiques fournissent les évaluations les plus raisonnables parmi la classe des états de conditions aux limites possibles pour des matériaux statistiquement homogènes.

- **Conditions homogènes sur le contour en déformation (KUBC)**

Dans ces conditions, on applique sur tous les nœuds de la surface extérieure du volume V un déplacement u_i qui s'écrit à partir du tenseur des déformations homogénéisées correspondant à la moyenne des déformations locales dans le volume par :

$$\begin{cases} u_i = E_{ij} \cdot x_j & \forall x \in \partial V \\ E_{ij} = \langle \varepsilon_{ij} \rangle = \frac{1}{V} \int_V \varepsilon_{ij} dV \end{cases} \quad (\text{Eq. 1})$$

Le tenseur des contraintes macroscopiques est alors obtenu par la moyenne des contraintes locales dans tout le volume V :

$$\Sigma_{ij} = \langle \sigma_{ij} \rangle = \frac{1}{V} \int_V \sigma_{ij} dV \quad (\text{Eq. 2})$$

- **Conditions aux limites Périodiques (PBC)**

Dans ce cas on applique sur tous les nœuds de la surface extérieure du volume V un déplacement u qui s'écrit à partir du tenseur des déformations homogénéisées E et d'une fluctuation périodique v_i par :

$$\begin{cases} u_i = E_{ij} \cdot x_j & \forall x \in \partial V \\ E_{ij} = \langle \varepsilon_{ij} \rangle = \frac{1}{V} \int_V \varepsilon_{ij} dV \end{cases} \quad (\text{Eq. 3})$$

La fluctuation v est périodique car elle prend la même valeur en deux points homologues de faces opposées. De même, les efforts $\sigma \cdot n$ en deux points homologues sont opposés.

2.2.3 Valeurs des conditions aux limites

Pour des problèmes 2D isotropes, le module de compressibilité k et le module de cisaillement μ sont reliés au module de Young E et au coefficient de Poisson ν par les expressions suivantes :

$$k = \frac{E}{2(1+\nu)(1-2\nu)}, \quad \mu = \frac{E}{2(1+\nu)} \quad (\text{Eq. 4})$$

Dans les matériaux hétérogènes 2D, les modules (apparents et effectifs) macroscopiques de compressibilité et de cisaillement ont été calculés en résolvant deux problèmes aux limites avec une contrainte moyenne imposée. Les tenseurs de contrainte imposés macroscopiques \tilde{E} utilisée pour calculer les modules macroscopiques de compressibilité et de cisaillement sont donnés par :

$$\tilde{E}^k = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \tilde{E}^\mu = \begin{pmatrix} 0 & 1/2 \\ 1/2 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{Eq. 5})$$

Nous pouvons définir le module de compressibilité macroscopique k^{app} et le module macroscopique de cisaillement μ^{app} comme suit :

$$k^{app} = \langle \tilde{\sigma} \rangle : \tilde{E}^k = \frac{1}{4} [\text{trace}(\langle \sigma \rangle)], \quad \mu^{app} = \langle \tilde{\sigma} \rangle : \tilde{E}^\mu = \langle \sigma_{12} \rangle \quad (\text{Eq. 6})$$

Le signe $\langle \sigma \rangle$ indique la valeur moyenne des efforts locaux σ .

2.2.4 Maillage des microstructures

Pour les résultats numériques présentés dans ce chapitre, la technique de maillage libre est employée pour mailler les images 2D des microstructures. Les éléments finis utilisés sont des triangles bidimensionnels de Delaunay avec 6 nœuds avec intégration complète, voir figure 10.

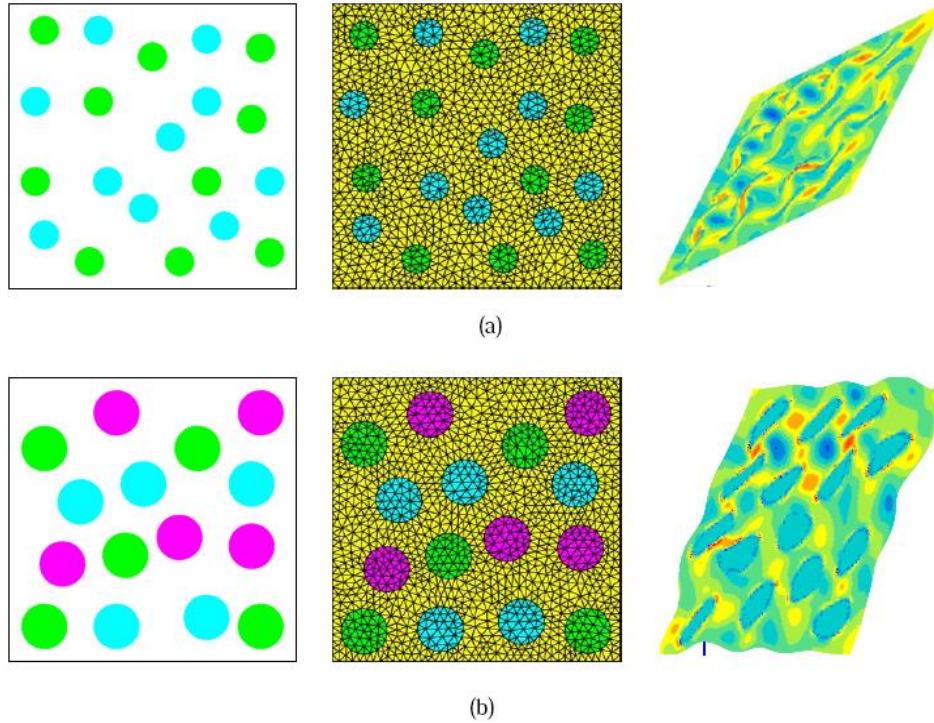


Figure 10. Exemples de microstructures étudiées par élément finis, (a) composite à 3-phases avec des CAL KUBC, (b) composite à 4-phases avec des CAL périodiques.

Dans cette section, plusieurs densités de maillage ont été testées pour un matériau hétérogène à trois phases avec $P_1 = P_2 = 15\%$ et $M_1 = M_2 = 10$. Le nombre d'éléments finis a été changé de 125 en 8000. Comme propriété macroscopique, nous considérons le module apparent de cisaillement μ^{app} . La figure 11 montre l'évolution du module apparent de cisaillement en fonction des nombres d'élément ou de la densité de maillage élément fini. Dans toutes les simulations, une bonne densité de maillage a été choisie pour les calculs des propriétés macroscopiques afin de garantir une bonne précision. Les références précédentes prouvent que cette stratégie de maillage mène à des évaluations des propriétés élastiques à l'intérieur des phases avec une précision acceptable.

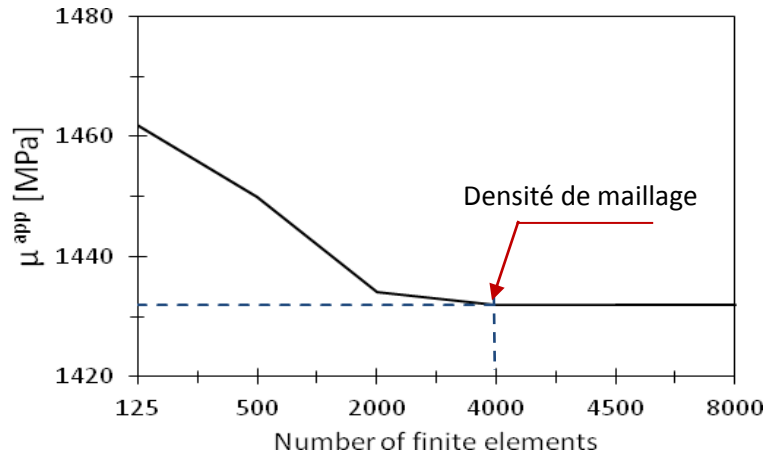


Figure 11. Évolution du module apparent de cisaillement en fonction du nombre d'éléments finis pour le composite à 3-phases.

2.2.5 Propriétés apparentes et effectives

Des simulations numériques, basées sur la méthode des éléments finis FEM, sont effectuées pour des conditions aux limites KUBC et périodiques. Dans la présente partie, les propriétés élastiques macroscopiques sont présentées, pour un volume V et un grand nombre d'inclusions M . Ces propriétés sont le module de compressibilité macroscopique k^{app} et le module de cisaillement macroscopique μ^{app} .

L'objectif est d'estimer l'évolution des propriétés élastiques apparentes en fonction de la taille du domaine V ou du nombre d'inclusions M . La dispersion des propriétés apparentes est caractérisée et présentée pour chaque cas. Ces propriétés sont comparées aux bornes de Hashin-Shtrikman (HS^- et HS^+) et au modèle auto-cohérent (SCM), voir tableaux 2 et 3. L'erreur relative entre les simulations numériques et le SCM est rapporté.

Matériau		HS^-	Simulations	erreur Relative	SCM	HS^+
$P_1 = P_2 = 5\%, D_1 = D_2$	k^{eff} [MPa]	28	6921	5%	7315	7315
	μ^{eff} [MPa]	17	2932	7%	3185	3185
$P_1 = P_2 = 15\%, D_1 = D_2$	k^{eff} [MPa]	9	3760	13%	4356	4356
	μ^{eff} [MPa]	5	1560	27%	2140	2140
$P_1 = P_2 = 25\%, D_1 = D_2$	k^{eff} [MPa]	5	1921	24%	2534	2534
	μ^{eff} [MPa]	3	671	50%	1349	1349
$P_1 = 20\%, P_2 = 10\%, D_1 \neq D_2$	k^{eff} [MPa]	13	3728	14%	4372	4372
	μ^{eff} [MPa]	8	1541	28%	2144	2144

Tableau 2. Propriétés élastiques effectives du matériau à 3-phases.

Propriétés	HS^-	Simulations	erreur Relative	SCM	HS^+
k^{eff}	≈ 0	3734	13%	4338	4340
μ^{eff}	≈ 0	1484	48%	2620	2621

Tableau 3. Propriétés élastiques effectives du matériau à 4-phases.

Pour chaque cas, les résultats numériques obtenus sont présentés sur les figures 12, 13, 14 et 15 pour des matériaux à 3-phases. Ces résultats sont présentés dans le cas du composite à 4-phases sur la figure 16. Les barres verticales donnent l'intervalle correspondant de la variation $[\bar{Z} - 2D_Z, \bar{Z} + 2D_Z]$ des propriétés apparentes. Il s'avère que cette erreur diminue et tend vers zéro pour de grands volumes, particulièrement quand $V \geq VERD$.

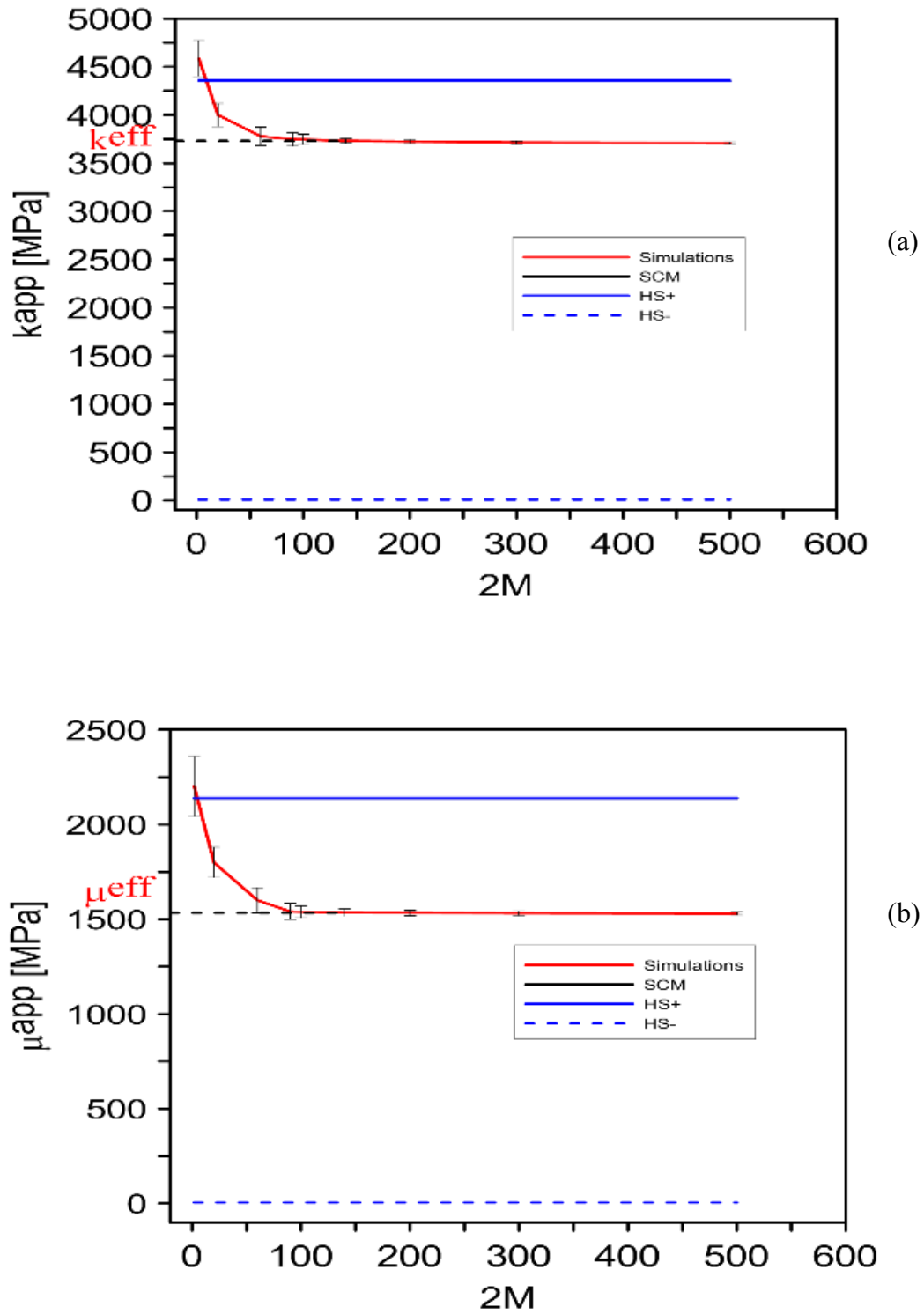


Figure 12. Valeurs et intervalles de confiance des, (a) modules de compressibilité (b) modules de cisaillement, en fonction de la taille de volume du matériaux à 3-phases avec les CAL

périodiques et $P_1 = P_2 = 5\%$, $D_1 = D_2$.

2.2.6 Caractérisation morphologique

La portée intégrale est une caractéristique qui fournit l'information sur la taille du domaine de la structure pour laquelle les paramètres ont été mesurés pour ce volume avec une bonne représentativité statistique Matheron [37], Iantujoul [38] et Jeulin [39]. La méthodologie proposée pour des caractérisations morphologiques des mosaïques de Voronoï par Kanit [8] et pour les matériaux hétérogènes avec la distribution aléatoire des particules sphériques par El El Moumen [33] est employée ici pour des matériaux hétérogènes à N-phase. La portée intégrale est validée dans les études précédentes en tant que paramètres morphologiques. Ce paramètre est mesuré pour les cas des matériaux hétérogènes à N-phases.

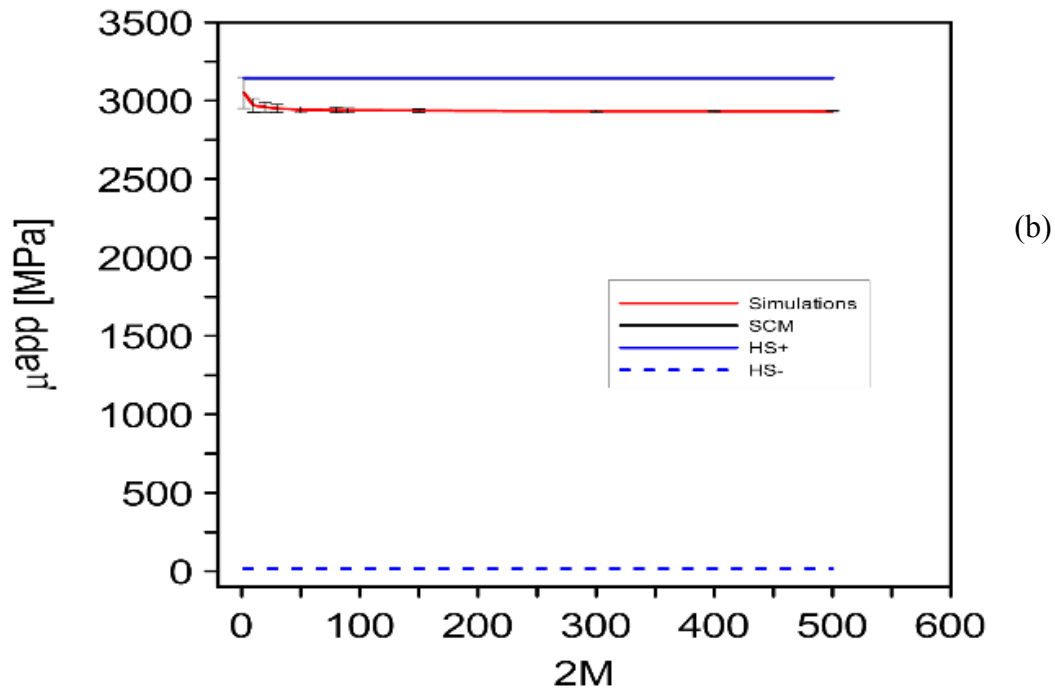
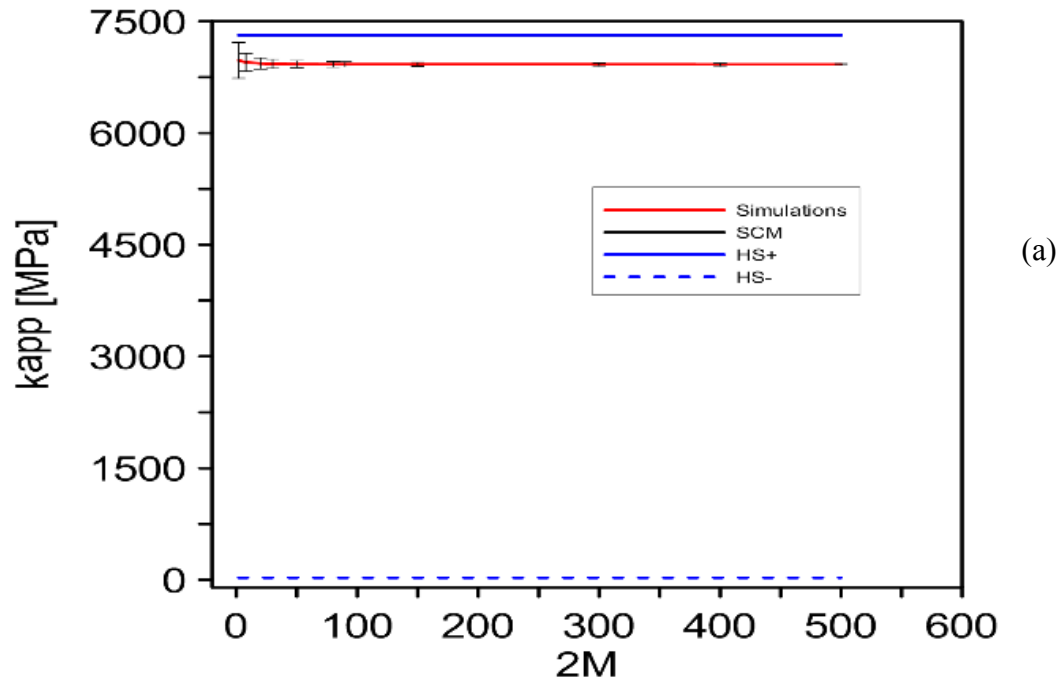


Figure 13. Valeurs et intervalles de confiance des, (a) modules de compressibilité (b) modules de cisaillement, en fonction de la taille de volume du matériaux à 3-phases avec les CAL périodiques et $P_1 = P_2 = 15\%$, $D_1 = D_2$.

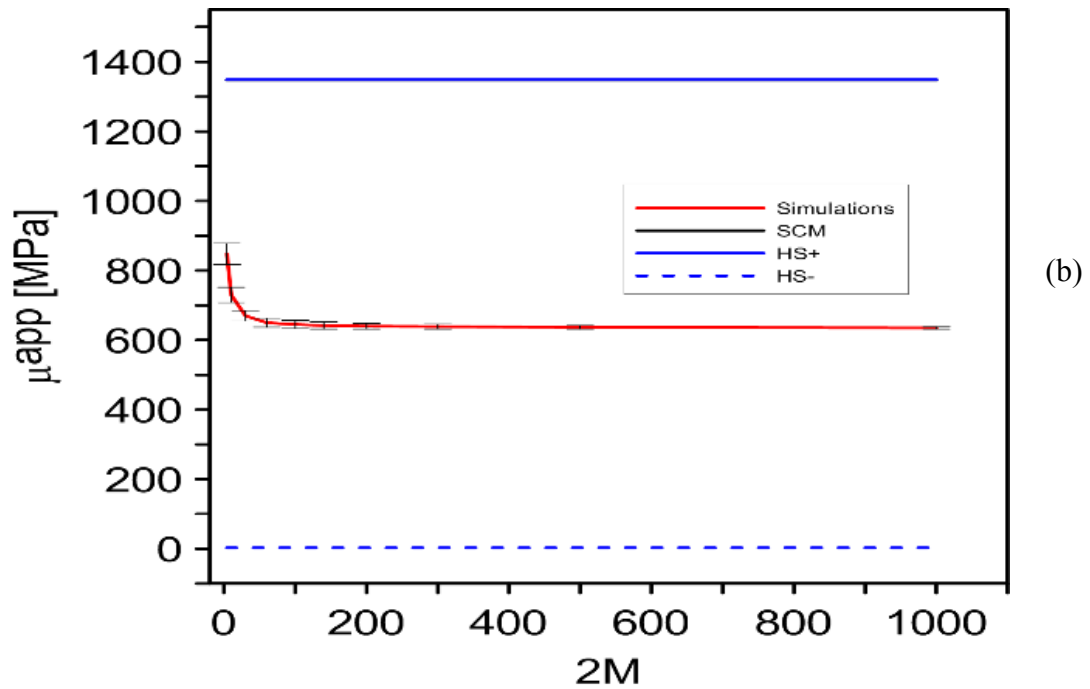
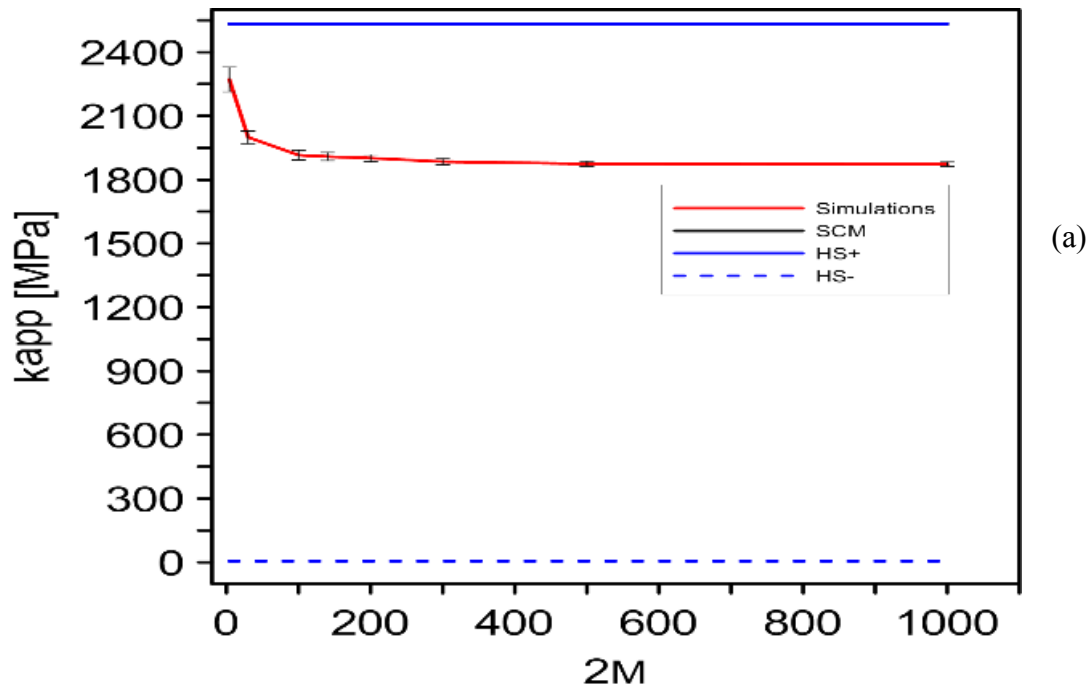


Figure 14. Valeurs et intervalles de confiance des, (a) modules de compressibilité (b) modules de cisaillement, en fonction de la taille de volume du matériaux à 3-phases avec les CAL périodiques et $P_1 = P_2 = 25\%$, $D_1 = D_2$.

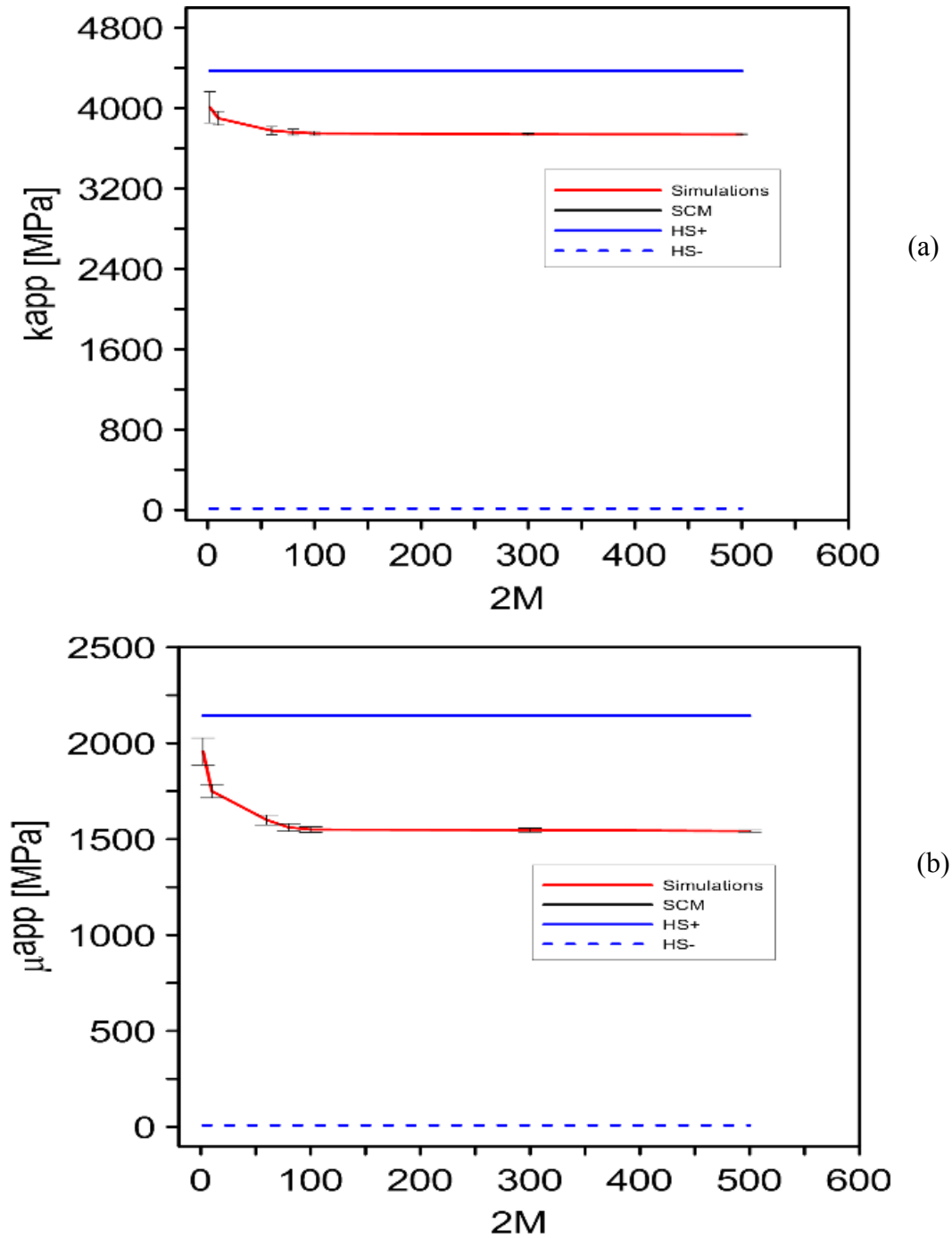


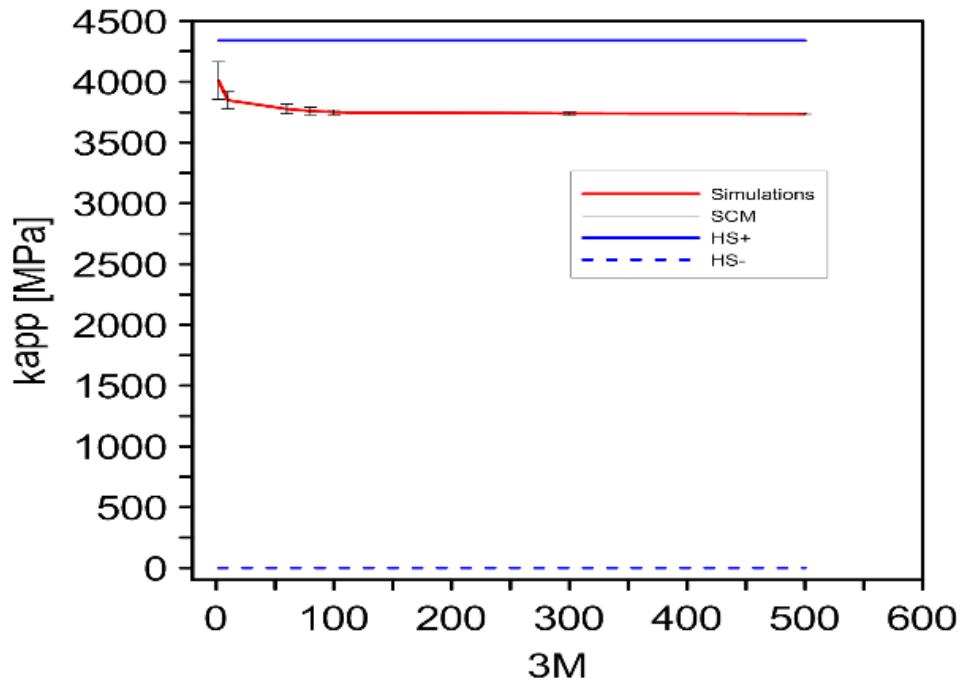
Figure 15. Valeurs et intervalles de confiance des, (a) modules de compressibilité (b) modules de cisaillement, en fonction de la taille de volume du matériaux à 3-phases avec les CAL

périodiques et $P_1 = 20\%$, $P_2 = 10\%$, $D_1 \neq D_2$.

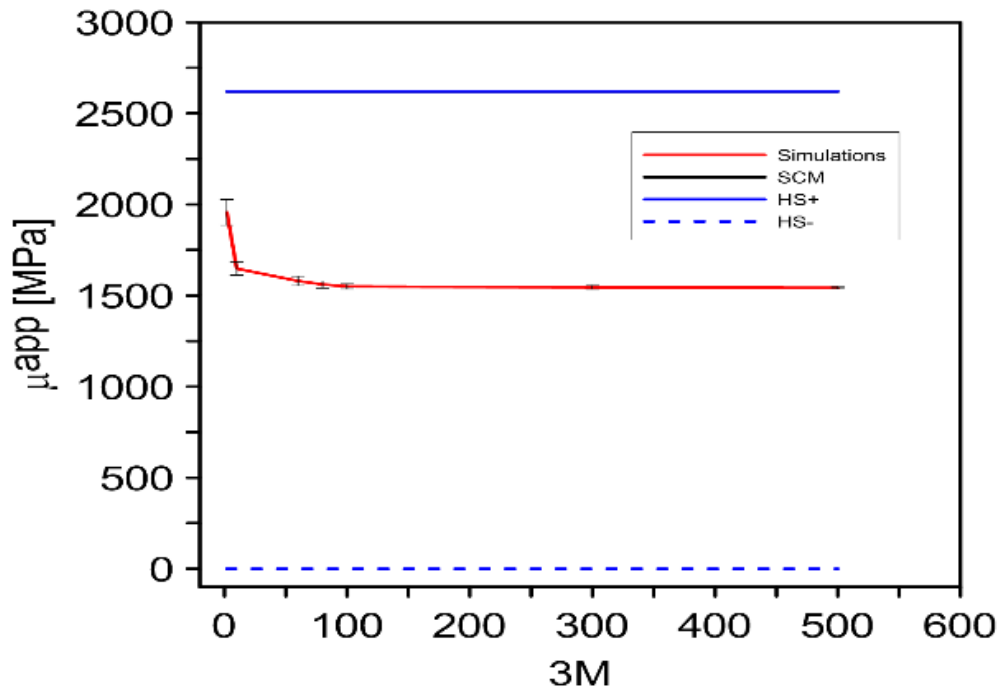
2.2.7 Détermination de la portée intégrale

La portée intégrale A est un outil standard pour la détermination de la taille du VER de composite aléatoire et pour prévoir la variabilité des propriétés selon l'échelle des observations. Les informations recueillies au sujet de l'évolution avec la taille de volume V ou du nombre d'inclusions M et de la dispersion des propriétés apparentes simulées sont employées pour identifier le paramètre statistique A , qui décrira la définition d'une taille de VER. Les propriétés effective sont définies par des moyennes spatiales de champs au-dessus des inclusions M , de volume V ou un certain nombre. La propriété apparente Z est obtenue en faisant la moyenne d'une grandeur scalaire d'additif au-dessus du volume V . On a montré que, pour les volumes $V \geq VERD$, la variance $D_Z^2(V)$ de Z est donné par :

$$D_Z^2(V) = D_Z^2 A / V \quad (\text{Eq. 7})$$



(a)



(b)

Figure 16. Valeurs et intervalles de confiance des, (a) modules de compressibilité (b) modules de cisaillement, en fonction de la taille de volume du matériau à 4-phases avec les CAL périodiques

$$\text{et } P_1 = P_2 = P_3 = 10\%, D_1 = D_2 = D_3.$$

Dans le cas d'un matériau à 2-phases avec la propriété élastique Z_1 pour la phase 1 et Z_2 pour la phase 2, le point variance D_Z^2 de la variable aléatoire Z est donné par :

$$D_Z^2 = P_1 P_2 (Z_1 - Z_2)^2 \quad (\text{Eq. 8})$$

Une extension de cette équation est proposée et examinée ici pour le cas du matériau de N-phase, avec la propriété élastique Z_1 pour la phase 1, Z_2 pour la phase 2, ..., Z_i pour la phase i et Z_n pour la phase N . le point variance D_Z^2 de la variable aléatoire Z est donné pour ce cas par :

$$D_Z^2 = \frac{\sum_{i=1}^N P_i Z_i^2}{\sum_{i=1}^N P_i} - (\bar{Z})^2 \quad (\text{Eq. 9})$$

La valeur moyenne \bar{Z} est donné par :

$$\bar{Z} = \frac{\sum_{i=1}^N P_i Z_i}{\sum_{i=1}^N P_i} \quad (\text{Eq. 10})$$

Pour chaque taille de volume V , plusieurs différentes réalisations n sont produites et présentées dans le tableau 2. Ces réalisations donnent les fluctuations du volume apparent et des modules apparents de cisaillement. Les fluctuations totales sont utilisées pour calculer l'écart des propriétés élastiques macroscopiques de chaque cas étudié des matériaux hétérogènes. Cet écart est présenté dans l'équation 4 pour déterminer la portée intégrale A . La méthode convenable entre l'écart et la taille du VER, selon l'équation (7) donne la valeur de la portée intégrale A dans le cas des matériaux à 3-phases et à 4-phases.

Les portées intégrales et la taille du VERD de chaque cas sont indiquées dans le tableau 4. La taille du VERD est obtenue par la convergence de différentes conditions aux limites, KUBC et périodique. Les propriétés élastiques apparentes, obtenues par ces conditions aux limites, convergent vers des valeurs stables appelées les propriétés effectives si la taille du volume $V \geq VERD$.

Matériaux	Fractions volumique	Diamètres	Portée intégrale A	VERD
3-phases	$P_1 = P_2 = 5\%$	$D_1 = D_2$	0.014	10
	$P_1 = P_2 = 15\%$		0.00212	140
	$P_1 = P_2 = 25\%$		0.00066	680
	$P_1 = 20\%, P_2 = 10\%$	$D_1 \neq D_2$	0.0025	120
4-phases	$P_1 = P_2 = P_3 = 10\%$	$D_1 = D_2 = D_3$	0.0125	240

Tableau 4. Portée intégrale **A** obtenue par fittage et VERD, pour un matériau à 3-phases avec et un composite à 4-phases.

2.2.8 Évaluation des tailles de VERD

La taille de VERD doit être donnée pour une propriété physique ou morphologique spécifique, un contraste entre les propriétés des différentes phases et une précision indiquée dans l'évaluation de la propriété effectives étudiée. On rappelle que, dans la théorie d'échantillons, l'erreur absolue ε_{abs} et l'erreur relative sur la valeur moyenne d'une propriété étudiée Z , obtenue avec des réalisations indépendantes n du même volume V , sont donnés en fonction de la variance $D_Z(V)$ par :

$$\varepsilon_{abs} = \frac{2D_Z(V)}{\sqrt{n}} \quad (\text{Eq. 11})$$

Et :

$$\varepsilon_{rel} = \frac{\varepsilon_{abs}}{Z} \quad (\text{Eq. 12})$$

Par exemple, la taille de VERD peut être définie comme volume pour lequel $n=1$ requis estimer la propriété moyenne \bar{Z} avec une bonne précision $\varepsilon_{rel} = 0.01 = 1\%$. Nous pouvons également estimer la propriété effective par l'utilisation de plus petits volumes et considérer n différentes réalisations pour obtenir la même erreur relative ε_{rel} . Dans ce cas-ci, les équations (11) et (12) donnent :

$$D_Z^2(V) = \frac{n(\bar{Z}\varepsilon_{rel})^2}{4} \quad (\text{Eq. 13})$$

Où \bar{Z} indique k^{eff} ou μ^{eff} .

La variance $D_Z(V)$ de la valeur moyenne est donnée par l'équation (7) et peut être inséré dans l'équation (13). Le plus petit volume nécessaire pour l'évaluation de la propriété effective Z avec une erreur absolue donnée ε_{abs} et différentes réalisations de n est alors données par :

$$V = \frac{4D_Z^2 A}{\varepsilon_{rel}^2 n} \quad (\text{Eq. 14})$$

Le nombre minimal n des différentes réalisations, utilisées pour chaque taille M ou volume V est donné dans le tableau 5.

M	6	10	15	37	50	100	125	200	285	500	1000
n	2500	1653	1488	1238	1200	1152	1020	277	118	35	25

Tableau 5. Nombre de réalisations n utilisé pour tous les domaines considérés classe V ou M.

Les propriétés élastiques apparentes, obtenues par différents types des conditions aux limites convergent vers des valeurs stables (valeurs effectives) en augmentant le nombre d'inclusions ou de la taille de domaine. Les tailles de VERD, pour différents cas, sont indiquées dans le tableau 4Tableau 4.

Pour des microstructures hétérogènes à 2-phases, EL Moumen *et all* [33] ont établis une relation entre la portée intégrale A et les autres paramètres morphologiques. Ils ont prouvé que ce paramètre est purement morphologique - dans le cas des microstructures hétérogènes à 2-phases et il est égale au volume d'une inclusion dans la taille de VERD. On peut écrire ainsi :

$$A = P/VERD \quad (\text{Eq. 15})$$

Dans cette section, nous essayons de trouver l'expression de ce paramètre morphologique dans le cas du matériau de N -phases. Les portées intégrales, dans tous les cas étudiés, sont liées aux fractions de volume des phases d'inclusion et avec la taille de volume. A partir des résultats obtenus présentés dans le tableau 4, nous proposons l'équation (16) pour le matériau hétérogène aléatoire à 3-phases :

$$A = (P_1 + P_2) / VERD \quad (\text{Eq. 16})$$

Pour le composite aléatoire à 4-phases, nous proposons la même équation (16) avec l'ajout de la 3^{ème} phase d'inclusion :

$$A = (P_1 + P_2 + P_3) / VERD \quad (\text{Eq. 17})$$

Des équations (16) et (17), nous concluons que la portée intégrale est directement liée aux fractions volumiques de l'inclusion. Pour le composite à N-phases, nous proposons l'expression suivante pour la portée intégrale :

$$A = \frac{\sum_{i=1}^{N-1} P_i}{VERD} \quad (\text{Eq. 18})$$

2.3 Concept de la morphologie équivalente

A partir des expressions de la portée intégrale dans le cas d'un matériau à 3-phases, des matériaux à 4-phases et à N-phases, nous pouvons déduire que le matériau hétérogène à N-phases, appelé *morphologie originale*, peut être remplacé par un matériau à 2-phases appelée *morphologie équivalente*. Le nombre d'inclusions est égale pour les deux configurations. La fraction volumique de l'inclusion dans la morphologie équivalente est la somme de toutes les fractions volumiques des phases d'inclusion dans la morphologie originale. Les propriétés élastiques de la morphologie biphasique équivalente, du module de compressibilité k et du module de cisaillement μ , peuvent être trouvées des propriétés élastiques des composants du matériau original de N-phase, en utilisant l'égalité de la variance de deux matériaux, le N-phases originale $D_Z^2(V)_N$ et son biphasique équivalent $D_Z^2(V)_2$. Nous proposons l'utilisation de l'équation (19) donnée ci-dessous pour la détermination des propriétés élastiques Z_1^e de la nouvelle inclusion équivalente :

$$Z_1^e = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N P_i Z_i^2}{\sum_{i=1}^N P_i} - \left(\frac{\sum_{i=1}^N P_i Z_i}{\sum_{i=1}^N P_i} \right)^2} \quad (\text{Eq. 19})$$

Pour le matériau à 3-phases, l'équation (19) est simplifiée et exprimée comme suit :

$$Z_1^e = \sqrt{PZ^2 + P_1Z_1^2 + P_2Z_2^2 - (PZ + P_1Z_1 + P_2Z_2)^2} \quad (\text{Eq. 20})$$

Dans toutes les cas des composites étudiés, les nombres d'inclusions est les mêmes. Pour chaque cas, deux calculs ont été effectués pour deux cas de composites. Le premier calcul est conduit pour le matériau triphasé original, alors que le second, est conduit pour le matériau équivalent biphasé (e-matériau). Les propriétés effectives obtenues analytiquement à partir de l'équation (19) sont présentées dans un fichier d'entrée pour le calcul. Les résultats de simulation du matériau à 3-phases et du matériau 2-phases équivalent ont été comparés dans les tableaux 6 et 7.

Cas	Propriétés [MPa]	3-phases	e-matériau	Erreur relative (%)
$P_1 = P_2 = 5\%$, $D_1 = D_2$	k^{eff}	6921	7000	1
	μ^{eff}	2932	3010	2
$P_1 = P_2 = 15\%$, $D_1 = D_2$	k^{eff}	3800	3870	1
	μ^{eff}	1560	1600	3
$P_1 = P_2 = 25\%$, $D_1 = D_2$	k^{eff}	1921	1970	2
	μ^{eff}	671	689	2
$P_1 = 20\%$, $P_2 = 10\%$, $D_1 \neq D_2$	k^{eff}	3728	3836	2
	μ^{eff}	1541	1510	1

Tableau 6. Propriétés élastiques effectives obtenues pour le composite à 3-phases.

Propriétés [MPa]	4-phase	e-matériau	Erreur relative (%)
k^{eff}	3734	3836	2
μ^{eff}	1484	1510	1

Tableau 7. Propriétés élastiques effectives, obtenues pour le composite à 4-phases.

Nous pouvons affirmer que le matériau à N -phases est équivalent dans son comportement élastique à un matériau à 2-phases. Ici, nous notons par P_1^e la fraction volumique de la nouvelle phase d'inclusion de la morphologie équivalente, voir figure 17.

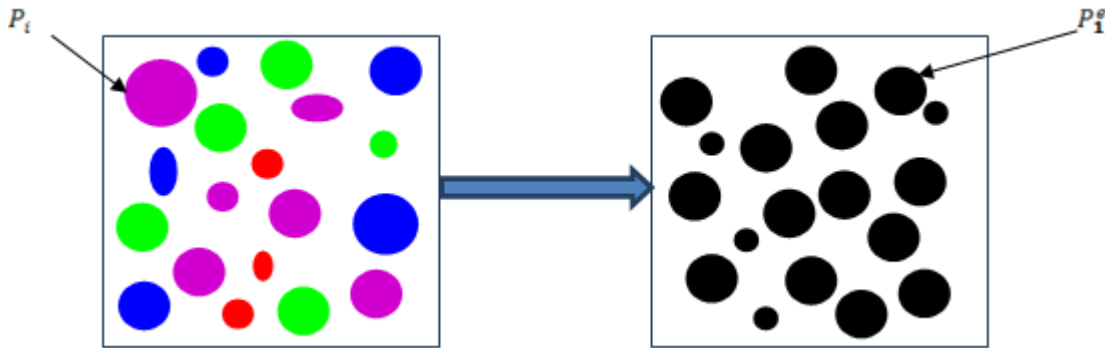


Figure 17. Concept de la morphologie équivalente.

2.4 Conclusion

La taille du VER déterministe est identifiée dans le cas des matériaux aléatoires à 3-phases et 4-phases pour le module de compressibilité effectif et de cisaillement effectif. On propose ici une expression généralisée de la portée intégrale A pour accomplir la méthodologie proposée par Kanit [8]. Nous avons admis que la portée intégrale, pour un composite en 2D de N -phases est seulement liée aux fractions volumiques des phases d'inclusions.

On a présenté aussi le concept de la morphologie équivalente dans le cas d'un matériau hétérogène à N -phases, qui permet le remplacement de la morphologie des matériaux hétérogènes de N -phases contenant des inclusions sphériques appelées « *morphologie originale* », avec la fraction volumique P_i de l'inclusion par une autre morphologie appelée « *la morphologie équivalente* » contenant les inclusions sphériques où la fraction volumique est égale à ceux des inclusions P_1^e . Celles-ci et leur morphologie équivalente donnent les mêmes propriétés élastiques effectives. Pour la définition morphologique de la nouvelle phase d'inclusion dans la morphologie équivalente, la forme d'inclusion est circulaire. La valeur de la propriété élastique de l'inclusion équivalente est obtenue à partir de la connaissance des propriétés élastiques des inclusions et de

leurs fractions volumiques. De l'équation (16), nous pouvons obtenir les propriétés élastiques de l'inclusion équivalente avec une erreur insignifiante.

Cette étude prouve que l'approche d'homogénéisation numérique rend la définition possible de la portée intégrale A dans les nouveaux cas d'un matériau hétérogène avec la N -phases qui ne sont pas étudiés expérimentalement actuellement.

2.5 Bibliographie

- [1] C. Pelissou, J. Baccou, Y. Monerie, and F. Perales, 2009. Determination of the size of the representative volume element for random quasi-brittle composites, *Int. J. Solids. Struct.* (46) 2542–2855.
- [2] M. Wang and P. Ning, 2009. Elastic property of multiphase composites with random microstructures, *J. Comput. Phys.* (228) 5978–5988.
- [3] S. V. Senthil and J. G. Andrew, 2010. Multiscale thermo-elastic analysis of random heterogeneous materials part I: Microstructure characterization and homogenization of material properties, *Comp. Mater. Sci.* (48) 22–38.
- [4] T. Kanit, S. Forest, D. Jeulin, F. N'Guyen and S. Singleton, 2011. Virtual improvement of ice cream properties by computational homogenization of microstructures, *Mechanics Research Communications* (38) 136–140.
- [5] S. Torquato, 1991. Random heterogeneous media: Microstructure and improved bounds on effective properties, *Appl. Mech. Rev* (44) 37–77.
- [6] K. Sab, 1992. On the homogenization and the simulation of random materials, *European Journal of Mechanics. A. Solids* (11) 585–607.
- [7] F. Barbe, L. Decker, D. Jeulin and G. Cailletaud, 2001. Inter-granular and intra-granular behavior of poly-crystalline aggregates. Part 1: Finite element model, *International Journal of Plasticity*, (17) 513–536.
- [8] T. Kanit, S. Forest, I. Galliet, V Mounoury and D. Jeulin, 2003. Determination of the size of the representative volume element for random composites : Statistical and numerical approach, *Int. J. Solids. Struct.* (40) 3647–3679.

- [9] T. Kanit, F. N’Guyen, S. Forest, D. Jeulin, M. Reed and S. Singleton, 2006. Apparent and effective physical properties of heterogeneous materials : Representativity of samples of two materials from food industry, *Comput. Meth. Appl. Mech. Engng.* (195) 3960–3982.
- [10] K. Madi, S. Forest, M. Boussuge, S. Gaillègue, E. Lataste, J. Y. Buffière, D. Bernard and D. Jeulin, 2007. Finite element simulations of the deformation of fused-cast refractories based on X-ray computed tomography, *Computational Materials Science* (39) 224–229.
- [11] E. Sanchez Palencia, 1980. Non-homogeneous Media and Vibration Theory, *Lecture Notes in Physics.* (127) Springer Verlag, Heidelberg.
- [12] S. Nemat Nasser and M. Hori, 1993. Micromechanics: Overall Properties of Heterogeneous materials, North Holland Publ., Amsterdam.
- [13] J. D. Eshelby, 1957. The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion and related problems, *Proc. R. Soc. London (A241)* 376–396.
- [14] B. Budiansky, 1965. On the elastic moduli of some heterogeneous materials, *J. Mech. Phys. Solids* (13) 223–227.
- [15] T. Mori and K. Tanaka, 1973. Average stress in the matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions, *Acta Metallurgica* (21) 571–574.
- [16] R. M. Christensen and K. H. Lo, 1979. Solutions for effective shear properties in three phase sphere and cylinder models, *J. Mech. Phys. Solids* (27) 315–330.
- [17] Z. Hashin and S. Shtrikman, 1963. A variational approach to the theory of elastic behavior of multiphase materials, *J. Mech. Phys. Solids* (11) 127-40.
- [18] A. N. Norris, 1985. A differential scheme for the effective moduli of composite, *Mech. Mater.* (4) 116.
- [19] Z. Hashin, 1988. The differential scheme and its application to cracked materials, *J. Mech. Phys. Solids* (36) 719–736.
- [20] M. Taya and T. Mura, 1981. On stiffness and strength of an aligned short fiber reinforced composites containing fiber-end cracks under uniaxial applied stress, *J. Appl. Mech.* (48) 361–366.
- [21] J. G. Berryman and P. A. Berge, 1996. Critique of two explicit schemes for estimating elastic properties of multiphase composites, *Mechanics of Materials* (22) 149-164.
- [22] B. Klusemann, H. J. Böhm and B. Svendsen, 2012. Homogenization methods for multiphase elastic composites with non-elliptical reinforcements: comparisons and benchmarks, *European Journal of Mechanics A / Solids* (34) 21-37.

- [23] X. Frank Xu and X. Chen, 2009. Stochastic homogenization of random elastic multi-phase composites and size quantification of representative volume element, *Mechanics of Materials* (41) 174-186.
- [24] Q. S. Yang, 1988. Effective properties of composites with fiber-end cracks, *Acta. Mech. Sinica. Prc.* (14-2) 171–178.
- [25] Q. S. Yang and Q. H. Qin, 2003. Modeling the effective elasto-plastic properties of unidirectional composite reinforced by fiber bundles under transverse tension and shear loading, *Mat. Sci. Eng. A - Struct.* (344-12) 140–145.
- [26] Q. S. Yang, X. Tao and H. Yang, 2007. A stepping scheme for predicting effective properties of the multi-inclusion composites, *Int. J. Eng. Sci.* (45) 997–1006.
- [27] O. Pierard, C. Friebel and I. Doghri, 2004. Mean-field homogenization of multi-phase thermo-elastic composites: a general framework and its validation, *Compos. Sci. Technol.* (64) 1587–1603.
- [28] E. Garboczi and A. R. Day, 1995. An algorithm for computing the effective linear elastic properties of heterogeneous materials: three-dimensional results for composites with equal phase Poisson ratios, *J. Mech. Phys. Solids* (43) 1349–1632.
- [29] H. Berger, S. Kurukuri, S. Kari, U. Gabbert, R. Rodriguez-Ramos, J. Bravo-Castillero and R. Guinovart-Diaz, 2007. Numerical and Analytical Approaches for Calculating the Effective Thermo-Mechanical Properties of Three-Phase Composites, *Journal of Thermal Stresses*, (30:8)801-817.
- [30] R. Guinovart-Diaz, R. Rodriguez-Ramos, J. Bravo-Castillero, Federico J. Sabina, A. Jose, O. Hernandez, Gerard and A. Maugin, 2005. A recursive asymptotic homogenization scheme for multi-phase fibrous elastic composites, *Mechanics of Materials* (37)1119–1131.
- [31] C. Friebel, I. Doghri, V. Legat; 2006. General mean-field homogenization schemes for viscoelastic composites containing multiple phases of coated inclusions, *Int. J. Solids. Struct.* (43) 2513–2541.
- [32] E. Gal and R. Kryvoruk, 2011. Meso-scale analysis of FRC using a two-step homogenization approach, *Computers and Structures* (89) 921–929.
- [33] A. El Moumen, T. Kanit, A. Imad and H. El Minor, 2013. Effect of overlapping inclusions on effective elastic properties of composites, *Mechanics Research Communications* (53) 24–30.

- [34] Y. K. Khdir, T. Kanit, F. Zaïri and M. Naït-Abdelaziz, 2014. Computational homogenization of plastic porous media with two populations of voids, *Materials Science & Engineering A*.(597) 324–330.
- [35] K. Terada, M. Hori, T. Kyoya and N. Kikuchi, 2000. Simulation of the multi-scale convergence in computational homogenization approaches, *Int. J. Solids. Struct.* (37) 2285–2133.
- [36].V. Kouznetsova, 2002. Computational Homogenization for the Multi-Scale Analysis of Multi-Phase Materials, *Technische Universiteit Eindhoven*.
- [37] G. Matheron, 1975. Random sets and integral geometry. J. Wiley, New York. 50, 85, 89
- [38] C. Lantuéjoul, 1991. Ergodicity and integral range. *J. Microsc.* (161) 387–403.
- [39] D. Jeulin, M. Ostoja-Starzewski, 2001. Mechanics of random and multiscale microstructures. Springer Wien New York. 175

Chapitre 3 : Conductivité thermique des matériaux hétérogènes à N-phases

Ce chapitre est une application de la technique d'homogénéisation des propriétés thermiques des matériaux hétérogènes dans les cas des matériaux à N-phases.

3.1 Introduction

Les composites sont des mélanges de deux types ou plus de matériaux (polymère, métal, en céramique, etc.). Cela forme un nouveau matériau avec les propriétés qui sont une combinaison des propriétés des composants. Des composites conducteurs sont souvent constitués par l'addition des particules thermiquement conductrices à une matrice. Beaucoup d'investigations ont étudié l'effet de l'addition du type simple de particules pour augmenter la conductivité thermique de la matrice, Big [1], Agari [2], Progelhof [3], Karkari [4], Kari [5] et Wen-Zhong [6] ou bien diverses particules conductrices peuvent être employées pour augmenter ou diminuer la conductivité thermique du mélange.

Plusieurs méthodes de prédiction numérique et théoriques sont proposées dans la littérature pour étudier les propriétés thermiques des matières composites Flourey [2], Maxwell [8], Bruggeman [9], Mortazari [10], Lu [11], Moussa [12] et Mourad [13]. Beaucoup d'études théoriques sur la conductivité thermique effective ETC des matières composites ont été réalisées pendant plus de 100 années. Plusieurs modèles analytiques ont été proposés dans la littérature pour prévoir la conductivité thermique des matières composites. Le problème pour la plupart de ces modèles est l'évaluation des propriétés thermo-physiques basées sur la connaissance de la fraction de volume de particules, les propriétés de chaque composant du mélange, le facteur de forme et la résistance de contact thermique entre le couple matrice-inclusions, Kanit [14], Kaddouri [15] et El Moumen [16]. Ces modèles ne sont pas généralement bien adaptés pour les matières composites fortement chargées et pour les inclusions aléatoirement distribuées. L'influence des particules et la fraction volumique ont été prises en compte dans les simulations

numériques. Les résultats des ETC des composites étudiés ont été analysés et comparés à divers modèles analytiques.

3.2 Matériaux et Méthodes

Dans cette section, tous les éléments et notations d'homogénéisation numérique nécessaires pour déterminer la conductivité thermique effective, en se basant sur la méthodologie expliquée par Kanit [14], seront employées.

3.2.1 Génération des microstructures et conductivité thermique des phases

Ce travail concerne la prédiction du coefficient de la conductivité thermique *ETC* des matériaux composites multiphasiques par la simulation numérique en *3D*. Ces simulations sont effectuées en utilisant la méthode d'éléments finis couplée avec une méthode d'homogénéisation. L'algorithme de génération de la position aléatoire des particules, Figure 18, est développé sous Mathematica. Le code Matlab utilise les positions des points produits par Mathematica pour donner un fichier d'entrée pour le code de simulation Comsol. Pour simplifier les calculs, des simulations ont été effectuées pour un élément de volume représentatif aléatoirement rempli de particules sphériques.

L'algorithme produit des positions d'inclusion pour une fraction volumique spécifique, dans une région carrée (matrice). Il s'assure que les particules ne se croisent pas entre elles par l'imposition d'une distance de répulsion. Le procédé de génération automatisé ne s'arrêtera que si la fraction volumique des particules soit atteinte. La morphologie et la technique de produire des microstructures *3D* est présentée dans cette section. Chaque microstructure contient une population d'inclusions séparées et aléatoirement distribuée dans une matrice.

Il convient de noter qu'il n'y a aucun contact entre les inclusions voisines de la phase dispersée. La Figure 19, présente un exemple des différentes microstructures utilisées contenant une distribution aléatoire des inclusions avec différentes fractions volumiques. Différentes conductivités thermiques sont attribuées aux phases d'inclusions, afin de prévoir la conductivité thermique effective des composites. P_i , D_i sont respectivement la fraction volumique et la taille de la phase i . P est la fraction volumique de la matrice. Les Tableau 8 et 9 représentent les

propriétés thermiques de chaque phase utilisée pour des calculs numériques et les cas des composites étudiés. La Figure 19 montre un exemple de calcul pour les matériaux à 3-phases et à 4-phases.

Phase	Matrice	Inclusion 1	Inclusion 2	Inclusion 3
λ conductivité thermique [W/m.K]	30	10	20	1

Tableau 8. Propriétés thermique de chaque phase.

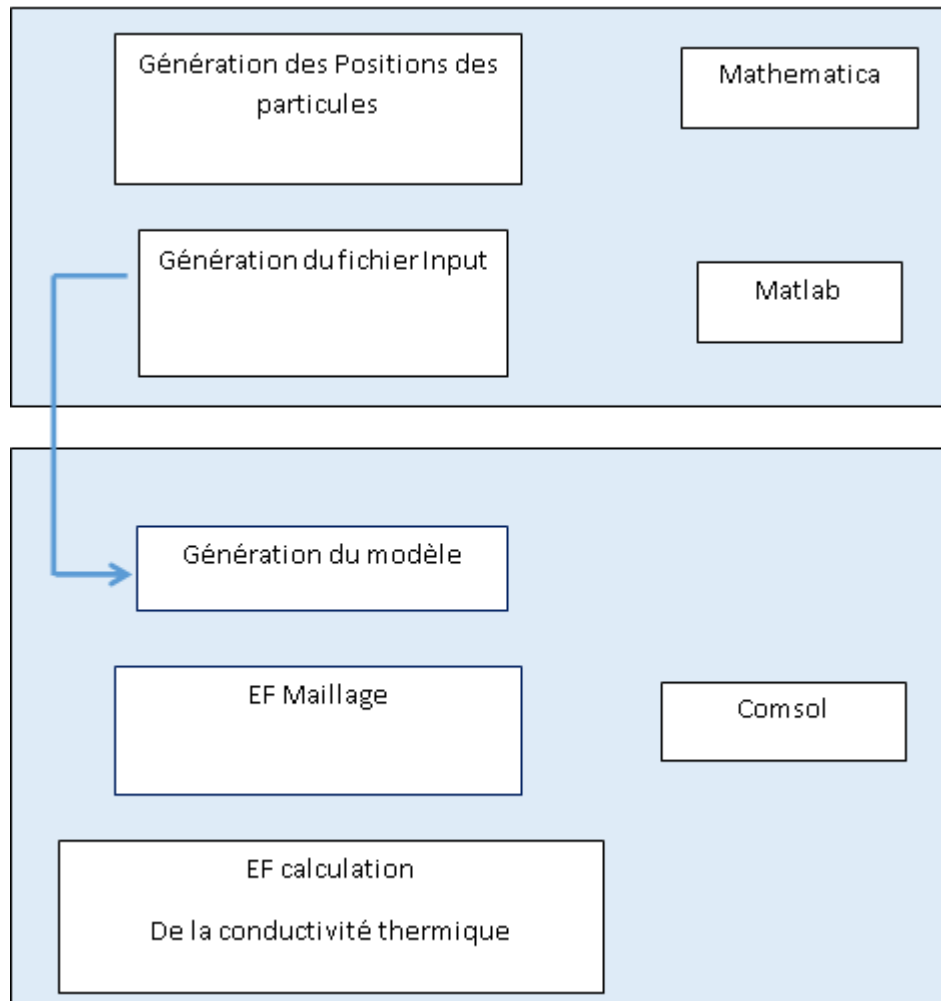


Figure 18. Processus de génération des microstructures.

Matériau	Cas	Propriétés
3-phase composite	Cas 1	$P_1 = P_2 = 05\%, D_1 = D_2$
	Cas 2	$P_1 = P_2 = 15\%, D_1 = D_2$
	Cas 3	$P_1 = P_2 = 25\%, D_1 = D_2$
	Cas 4	$P_1 = P_2 = 15\%, D_1 = 2D_2$
4-phase composite	Cas 5	$P_1 = P_2 = P_3 = 10\%, D_1 = D_2 = D_3$

Tableau 9. Cas des composites utilisés dans les simulations numériques.

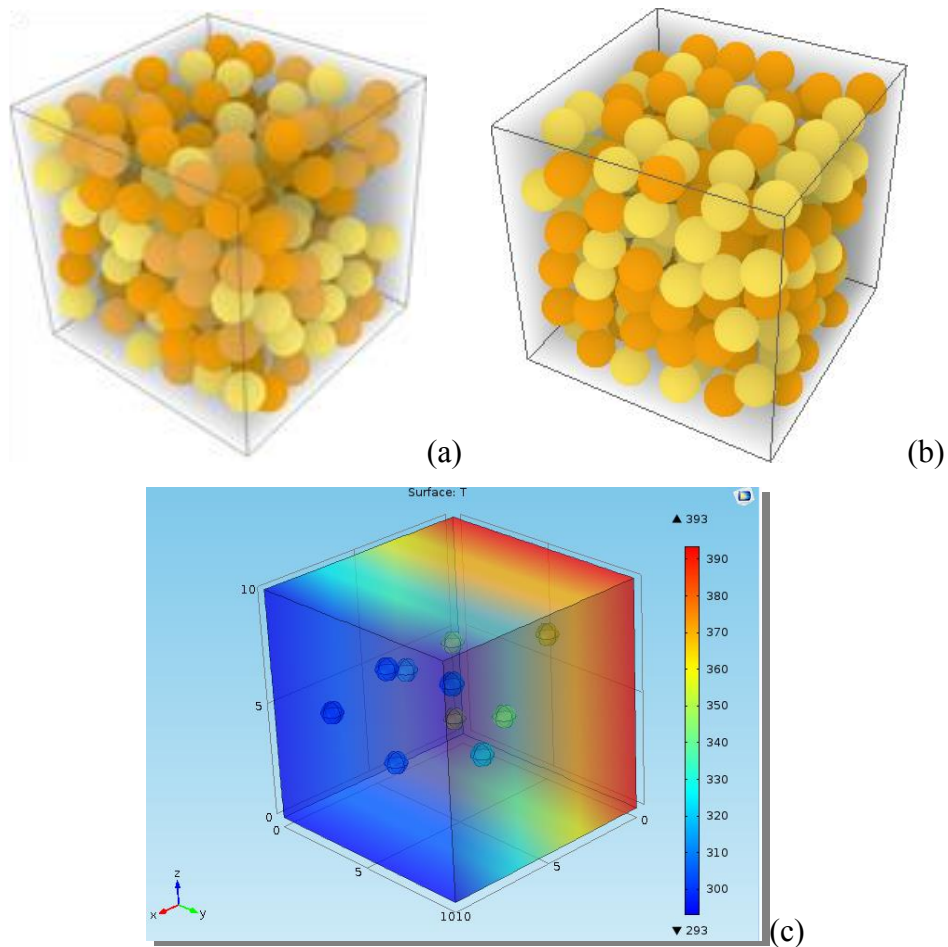


Figure 19. Exemple de matériau utilisé dans cette investigation, (a) matériau à 4-phases, (b) matériau à 3-phases, (c) variation de la température pour le matériau à 3-phases avec 10 inclusions.

3.2.2 Maillage et densité de maillage

Le maillage est réalisé par le code Comsol. Plusieurs possibilités de taille et types de maillage sont disponibles dans ce code. En raison de la convergence des calculs, une bonne densité de maillage doit être adoptée pour les simulations.

3.2.3 Conditions aux limites thermiques

Pour le problème thermique, la température, son gradient et le flux de chaleur sont notés par T , ∇T et \underline{q} respectivement. Le vecteur de flux de chaleur et le gradient de température sont donnés par la loi de Fourier, comme suit :

$$\underline{q} = -\lambda \nabla T \quad (\text{Eq. 21})$$

Dans le cas isotopique, le scalaire λ est le coefficient de conductivité thermique de la phase considérée.

- Dans le cas des conditions de type UGT on applique sur la surface extérieure d'un volume V un gradient de température $\underline{\nabla}T$:

$$T = \underline{G} \cdot \underline{x}, \quad \forall \underline{x} \in \partial V \quad (\text{Eq. 22})$$

Avec \underline{G} est un vecteur constant indépendant de la position \underline{x} .

$$\underline{G} = \frac{1}{V} \int \underline{\nabla}T dV \quad (\text{Eq. 23})$$

Macroscopiquement, le flux thermique macroscopique est obtenu par la moyenne des flux microscopiques le long de V :

$$\underline{Q} = \langle \underline{q} \rangle = \frac{1}{V} \int \underline{q} dV \quad (\text{Eq. 24})$$

- Dans les conditions aux limites périodiques (PBC) on applique sur les nœuds de la surface extérieure d'un volume V une température périodique T qui s'écrit de la manière suivante :

$$T = \underline{G} \cdot \underline{x} + t, \quad \forall \underline{x} \in \partial V \quad (\text{Eq. 25})$$

La fluctuation de température t est périodique.

Nous notons ici que les conditions aux limites périodiques PBC convergent plus rapidement en termes de taille de VER, à la conductivité thermique effective globale moyenne d'après [14].

3.2.4 Valeurs des conditions aux limites

Pour déterminer la conductivité thermique, on définit toutes les composantes du vecteur gradient de température uniforme selon les conditions. On récupère ainsi les composantes du tenseur de la conductivité thermique selon Kanit [14] comme suit :

$$\lambda = \frac{\langle \underline{q} \rangle_x \cdot \langle \underline{\nabla T} \rangle_x + \langle \underline{q} \rangle_y \cdot \langle \underline{\nabla T} \rangle_y + \langle \underline{q} \rangle_z \cdot \langle \underline{\nabla T} \rangle_z}{(\langle \underline{\nabla T} \rangle_x)^2 + (\langle \underline{\nabla T} \rangle_y)^2 + (\langle \underline{\nabla T} \rangle_z)^2} \quad (\text{Eq. 26})$$

Dans le cas d'une propriété isotropique, comme le cas de cette étude, le gradient de température est donné comme suit :

$$\underline{G} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (\text{Eq. 27})$$

La conductivité thermique homogénéisée en tenant compte des équations (23) et (24) est donnée par :

$$\lambda = \frac{1}{3} \langle \underline{q} \rangle \quad (\text{Eq. 28})$$

3.3 Résultats et discussion

Dans la présente partie, pour la détermination de la conductivité thermique des matériaux hétérogènes, la méthode des éléments finis avec la notion de VER développée par Kanit [14] est employée. Elle est basée sur la considération de différentes réalisations des microstructures aléatoires afin d'obtenir les propriétés effectives. Le VER est le volume qui permet l'évaluation de la propriété effective avec une seule réalisation.

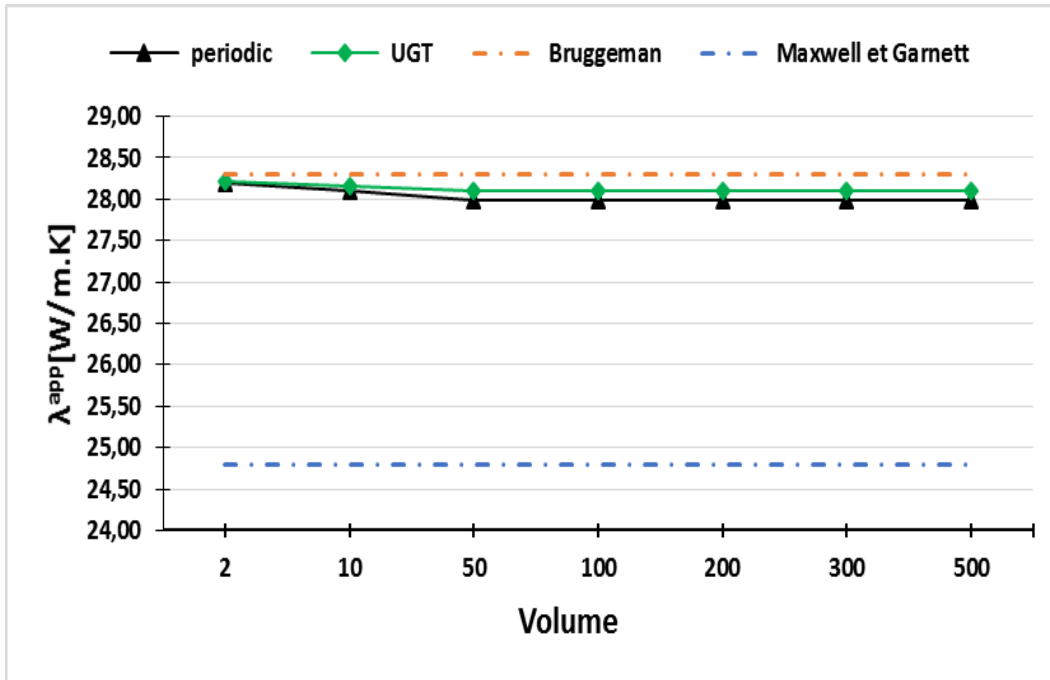


Figure 20. Variation de la conductivité thermique λ^{app} en fonction de la taille du volume, matériau à 3-phases, cas 1.

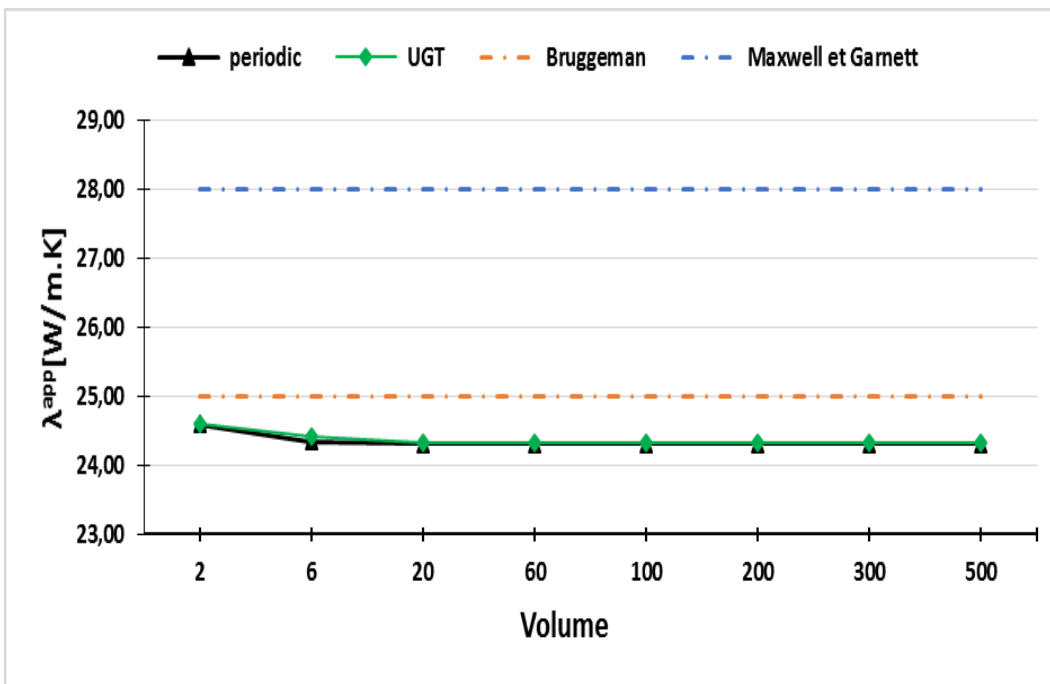


Figure 21. Variation de la conductivité thermique λ^{app} en fonction de la taille du volume, matériau à 3-phases, cas 2.

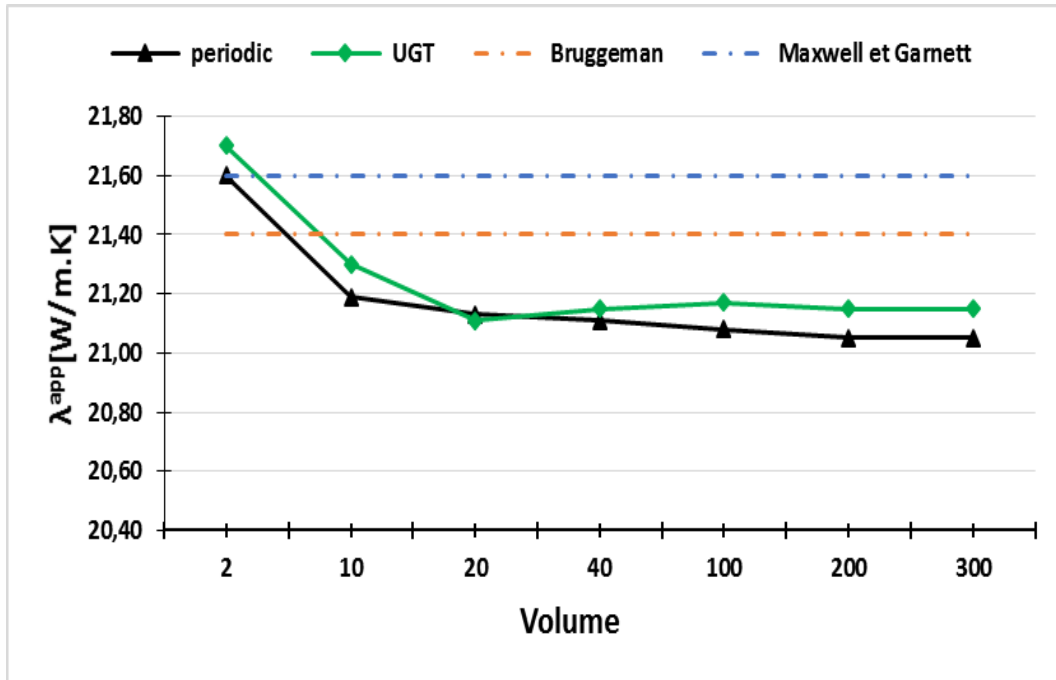


Figure 22. Variation de la conductivité thermique λ^{app} en fonction de la taille du volume, matériau à 3-phases, cas 3.

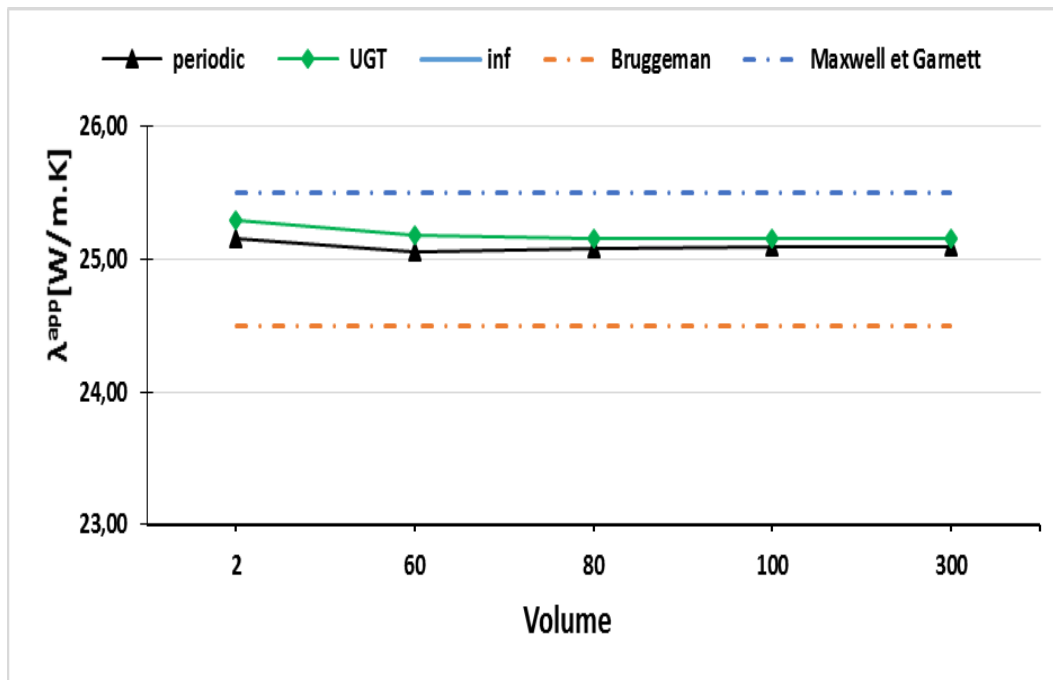


Figure 23. Variation de la conductivité thermique λ^{app} en fonction de la taille du volume, matériau à 3-phases, cas 4.

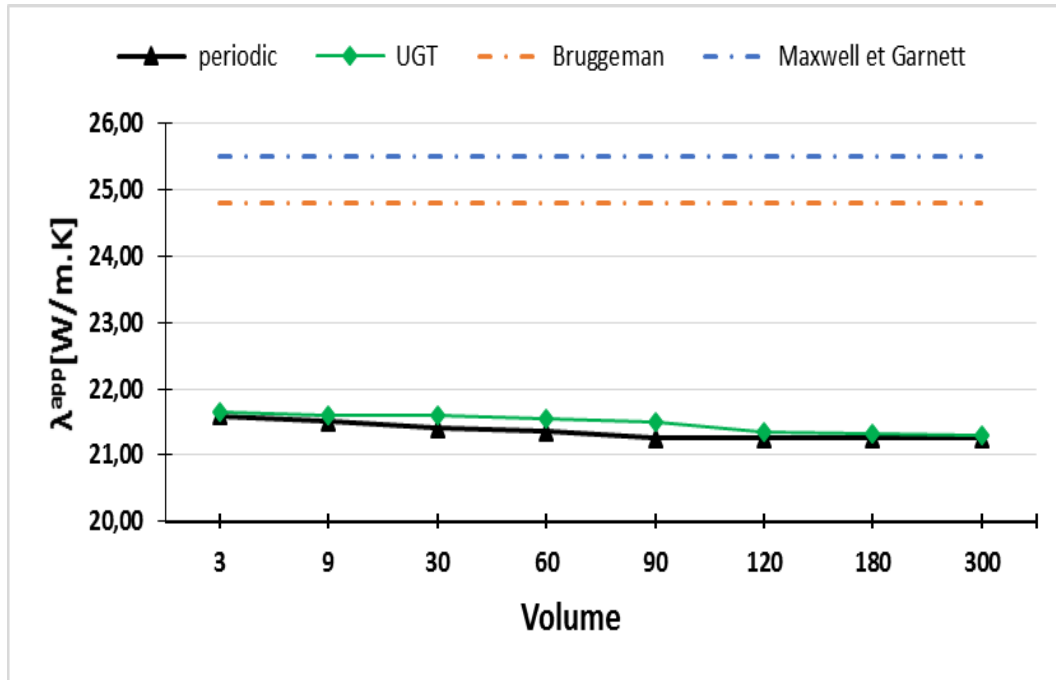


Figure 24. Variation de la conductivité thermique λ^{app} en fonction de la taille du volume, matériau à 4-phases, cas 5.

3.3.1 Détermination du VER

Pour les simulations numériques, les conditions aux limites PBC sont appliquées sur chaque volume contenant plusieurs inclusions. Les résultats trouvés sont présentés sur les figures 21, 22, 23 et 24. Il s'avère que la dispersion des résultats diminue quand la taille du volume augmente, voir le Tableau 10.

Matériau	Cas	Propriétés	VER
Composite à 4-phases	Cas 1	$P_1 = P_2 = 05\%, D_1 = D_2$	50
	Cas 2	$P_1 = P_2 = 15\%, D_1 = D_2$	20
	Cas 3	$P_1 = P_2 = 25\%, D_1 = D_2$	30
	Cas 4	$P_1 = P_2 = 15\%, D_1 = 2D_2$	50
Composite à 4-phases	Cas 5	$P_1 = P_2 = P_3 = 10\%, D_1 = D_2 = D_3$	60

Tableau 10. Taille du VER obtenue par simulations numériques.

3.3.2 Effet de la fraction volumique des particules sur la conductivité thermique

Beaucoup d'auteurs ont étudié l'effet de la fraction volumique des inclusions sur la conductivité thermique des matériaux composites, Mourad [16]. Pour notre cas et afin d'étudier l'effet de la fraction volumique d'inclusions sur la conductivité thermique effective, différentes fractions volumiques d'inclusions ont été considérées. On note, la diminution de la conductivité thermique avec l'augmentation de la fraction volumique des inclusions, voir la Figure 25.

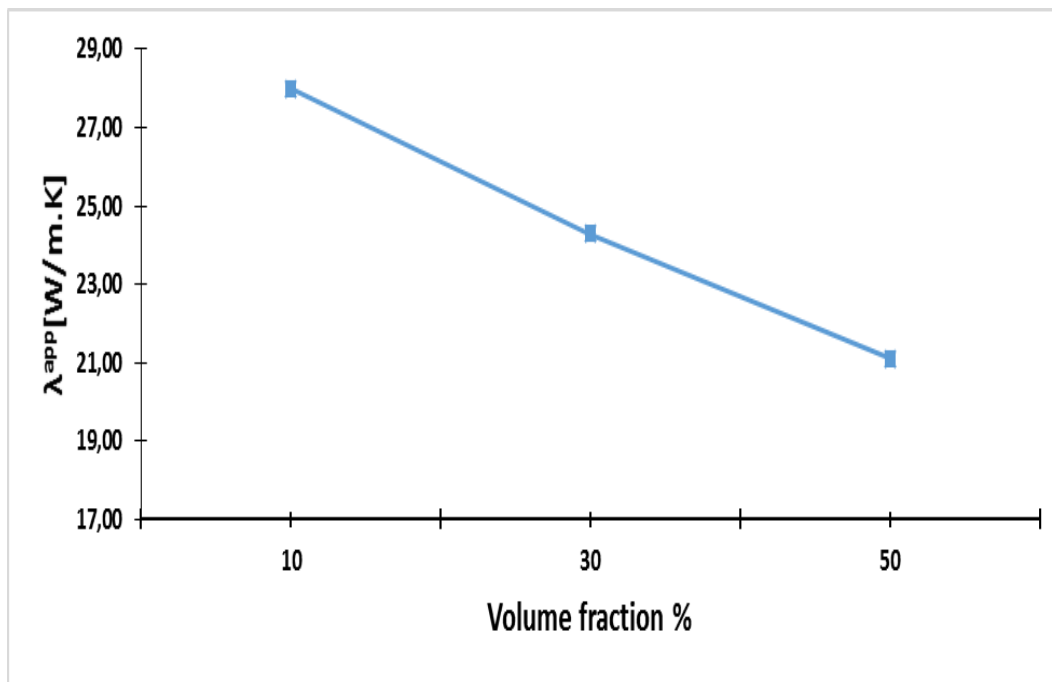


Figure 25. Variation de la conductivité thermique λ^{app} en fonction de la fraction volumique, matériau à 3-phases.

3.4 Conclusion

Pour employer les composites en pratique, leurs propriétés physiques devraient être bien identifiées. Une des propriétés importantes des composites est la *conductivité thermique effective* ETC. Puisque la conductivité thermique des composites dépend de plusieurs paramètres, il n'est pas facile de prévoir les propriétés thermiques exactement.

Le processus de Poisson a été employé pour produire des dispersions aléatoires de particules dans la matrice. Deux types de microstructures sont considérés : microstructure 1 avec

3 inclusions séparées, et microstructure 2 avec 4 inclusions séparées. Plusieurs fractions volumiques, appelés des réalisations, ont été considérées. Ces réalisations ont été employées pour déterminer l'effet des paramètres sur la conductivité thermique *ETC* du matériau obtenue. Les résultats des simulations numériques coïncident avec les résultats du modèle cohérent de Bruggeman [9]. Les propriétés effectives et la taille de l'élément de volume représentatif sont rapportées avec tous les paramètres des microstructures. La variation du VER en fonction de la taille de volume a été étudiée.

3.5 Bibliographie

- [1] D. M. Bigg, 1986. Thermally conductive polymer compositions. *Polym Compos*; 7: 125.
- [2] Y. Agari, A. Ueda and S. Nagai, 1991. Thermal conductivities of composites in several types of dispersion systems. *J of Appl Polym Sci*; 42: 1655–1669.
- [3] RC. Progelhof, JL Throne and RR Ruetsch, 1975. Methods of predicting thermal conductivity of composite systems: a review. *Reg Tech Cond – Soc Plast Eng*; 221–257.
- [4] M Karkri A Boudenne and L Ibos, 2001. Numerical and experimental study of thermophysical properties of spheres composite materials. *Int J High Temp High Pressures*; 40: 61–81.
- [5] S. Kari, H. Berger and U. Gabbert, 2007. Numerical evaluation of effective material properties of randomly distributed short cylindrical fibre composites. *J Comput Mater Sci*; 39: 198–204.
- [6] C. Wen-Zhong, T. Shan-Tung and T. Guo-Liang, 2005. Thermal conductivity of PTFE composites with three-dimensional randomly distributed particuls. *J Thermoplast Compos Mater*; 18(3): 241–253.
- [7] J. Flourey, J. Carson and Q Tuan Pham, 2008. Modelling thermal conductivity in heterogeneous media with the finite element method. *Food Bioprocess Technol*; 1: 161–170.
- [8] J C Maxwell, 1891. *A Treatise on Electricity and Magnetism*. 3rd ed. Oxford: Clarendon Press, (reprinted by Dover, 1954).

- [9] D. A. G. Bruggeman, 1935. Berechnung verschiedener physikalischer konstanten von heterogenen substanzen. I. dielektrizitätskonstanten und leitfähigkeiten der mischkörper aus isotropen substanzen. *Annalen der*
- [10] B. Mortazavi M. Baniassadi J. Bardon. 2013. Modeling of two-phase random composite materials by finite element, Mori–Tanaka and strong contrast methods. *Composites Part B*; 45: 1117–1125.
- [11] X. Lu and G. Xu, 1997. Thermally conductive polymer composites for electronic packaging. *J Appl Polym Sci*; 65: 2733.
- [12] A. Moussa, K. Mustapha, I. Laurent and EM Mimoun, 2014. Effective thermal conductivity of random two-phase composites, *Journal of Reinforced Plastics and Composites*, Vol 33(1) 69–80.
- [13] C. Mourad A. Boudjemaa, H. Manel and B. Abderrahim, 2011. Numerical modelling of the effective thermal conductivity of heterogeneous materials, *Journal of Thermoplastic Composite Materials* 26(3) 336–345.
- [14] T. Kanit, S. Forest, I. Galliet, V. Mounoury, D. Jeulin, 2003. Determination of the size of the representative volume element for random composites: statistical and numerical approach. *Int. J. Solids Struct.* 40, 3647–3679.
- [15] W. Kaddouri, A. El Moumen, T. Kanita, S. Madani and A. Imad, 2016. On the effect of inclusion shape on effective thermal conductivity of heterogeneous materials, *Mechanics of Materials* 92 28–41.
- [16] A. El Moumen, T., Kanit, A. Imad, H. El Minor. 2015. Computational thermal conductivity in porous materials using homogenization techniques: numerical and statistical approaches. *Comput. Mater. Sci.* 97, 148–158.

Chapitre 4 : Homogénéisation des matériaux hétérogènes élasto-plastiques à N-phases

Ce chapitre est une application de la technique d'homogénéisation des propriétés élasto-plastiques des matériaux hétérogènes dans les cas des matériaux à N-phases.

4.1 Introduction

L'évaluation de la réponse mécanique effective des matériaux aléatoires hétérogènes est un domaine de recherche actif très important. Beaucoup de méthodes analytiques utilisant des techniques d'homogénéisation ont été développées, pour borner ou estimer leurs propriétés mécaniques effectives, Nemat-nasser [1]. Ces méthodes supposent que les propriétés mécaniques effectives peuvent être définies comme relations entre les moyens volumiques de champs de contraintes et de déformations ont été principalement employées pour le domaine élastique linéaire. Dans la littérature, nous pouvons découvrir beaucoup de modèle, bornes de Voigt-Reuss et de Hashin-Shtrikman [2], modèle de Mori-Tanaka [3] et le modelé autocohérent [4]. Pour une comparaison de ces modèles, il suffit de voir les papiers d'Anoukou [5]. Malgré la large utilisation de ces approches analytiques, il reste difficile d'utiliser ces modèles du régime élastique linéaire au régime plastique. Pour cette raison, les formulations tangentes et sécantes ont été développées.

Dans la formulation tangente, la réponse effective élasto-plastique est calculée incrémentalement par l'intégration le long du chemin de chargement et le tenseur de rigidité effectives obtenu à partir du tenseur tangente de rigidité de chaque phase Hutchinson [6], Ju [7], Doghri [8] et Zaïri [9]. Pour la formulation sécante, la réponse effective élasto-plastique est calculée à partir du tenseur sécant de rigidité de chaque phase dans le régime élastique non linéaire Pontecastaneda [10] et Tandon [11]. Des auteurs comme Zaïri [9] et Shen [12] ont présentés des investigations numériques sur l'effet des conditions aux limites et de la taille du

volume élémentaire représentatif du titane poreux. Alternativement, les simulations numériques directement effectuées sur la microstructure peuvent donner des solutions à ces problèmes tels que la plasticité des composite a N-phases. La notion volume élémentaire représentatif est employée pour représenter la microstructure. Le VER doit être choisi suffisamment grand comparé aux hétérogénéités pour englober des informations suffisantes sur la microstructure afin d'être représentatif, mais il doit rester assez petit, beaucoup plus petit que le corps macroscopique, afin d'être considéré comme élément matériel de volume. Drugan et Willis [13] ont proposés de définir le VER comme suit: "It is the smallest material volume element of the composite for which the usual spatially constant (overall modulus) macroscopic constitutive representation is a sufficiently accurate model to represent the mean constitutive response".

Cette définition de l'élément de volume représentatif « déterministe » doit être vérifiée dans le cadre des composites a comportement élasto-plastique. La réponse contrainte-déformation effectives, définie par des moyennes spatiales de champs de contraintes et de déformations au-dessus de l'élément de volume, doit être obtenue avec une précision donnée. Pour des calculs à grande échelle le coût numérique est une issue principale et il est recommandé de faire appel au calcul sur des volumes plus petits que le VERD. L'utilisation de plus petits volumes induit des fluctuations des réponses prévues qui doivent être compensées par l'établissement d'une moyenne au-dessus de plusieurs réalisations de la microstructure afin d'obtenir la même évaluation que cela obtenue pour le volume entier, [14].

La méthodologie basée sur le (VERD) proposée par Hasanov [15], Kanit [16,17], pour estimer la réponse élastique linéaire des matériaux hétérogènes, a été utilisée sur des composites à 2-phases à comportement élastique-plastique. Le but de cette partie est d'appliquer l'approche d'homogénéisation numérique proposée par le Khdir *et al* [14] pour estimer la réponse effective élasto-plastique des composites aléatoires à N-phases. La méthodologie est appliquée à des matériaux à 3-phases et 4-phases, pour être extrapoler ensuite à des composites aléatoires à N-phases.

Les évaluations numériques de la réponse de contrainte-déformation, et leurs dispersions, obtenus sur des volumes de taille fixe qui contiennent différentes réalisations d'un volume donné de la microstructure sont étudiés.

4.2 Matériaux et méthodes

La méthode des 'éléments finis est employée pour l'étude de la réponse mécanique des composites à N -phases présentés dans ce chapitre.

4.2.1 Microstructure et propriétés mécaniques des phases

Les composites choisis dans cette partie pour illustrer la méthodologie sont des matériaux hétérogènes aléatoires à 3 et à 4-phases. Ces composites sont constitués d'une distribution désordonnée d'inclusions à comportement élastique dans une matrice à comportement plastique. Le nombre d'inclusion de chaque phase est identifié par la lettre M .

Les propriétés mécaniques sont connues pour chaque constituant. Le module de Young de la matrice m est de 1550 MPa, le coefficient de Poisson est de 0,4. Pour les inclusions, le contraste dans les propriétés mécaniques est choisi égale à 100. Les propriétés non élastiques de la matrice ont été prises des données expérimentales utilisées par Zaïri [9].

Le premier matériau employé est constitué de 3-phases, nommées : matrice m , inclusion 1 et inclusion 2. La fraction volumique de la matrice est $P=0.7$. Les deux inclusions ont les mêmes fractions volumiques $P_1 = P_2 = 15\%$, le même nombre d'inclusions $M_1 = M_2$, les mêmes diamètres $D_1 = D_2$ et différentes propriétés élastiques. Le second matériau employé est constitué de 4-phases, nommées : matrice m , inclusion 1, inclusion 2 et inclusion 3. La fraction volumique de la matrice dans ce cas est $P=0.7$. Les trois inclusions ont les mêmes fractions volumiques $P_1 = P_2 = P_3 = 10\%$, le même nombre d'inclusions $M_1 = M_2 = M_3$, les mêmes diamètres $D_1 = D_2 = D_3$ et différentes propriétés élastiques.

La Figure 26, présente des exemples de matière hétérogène employés dans ce chapitre avec différentes tailles. Pour la morphologie des inclusions, les formes circulaires sont employées, avec une distribution aléatoire selon le processus de Poisson. Plusieurs réalisations de microstructures, ont été considérées. Le module de Young E et le coefficient de Poisson ν des différentes phases, sont présentés dans le tableau 11.

Matériau			E [MPa]	ν	Forme d'inclusions	fraction volumique
Cas 1	3-phases	Inclusion 1	100	0.3	$D_1 = D_2$ $M_1 = M_2$	$P_1 = P_2 = 15\%$
		Inclusion 2	1			
Cas 2	4-phases	Inclusion 1	100	0.3	$D_1 = D_2 = D_3$ $M_1 = M_2 = M_3$	$P_1 = P_2 = P_3 = 10\%$
		Inclusion 2	1			
		Inclusion 3	0.01			

Tableau 11. Propriétés mécaniques des phases.

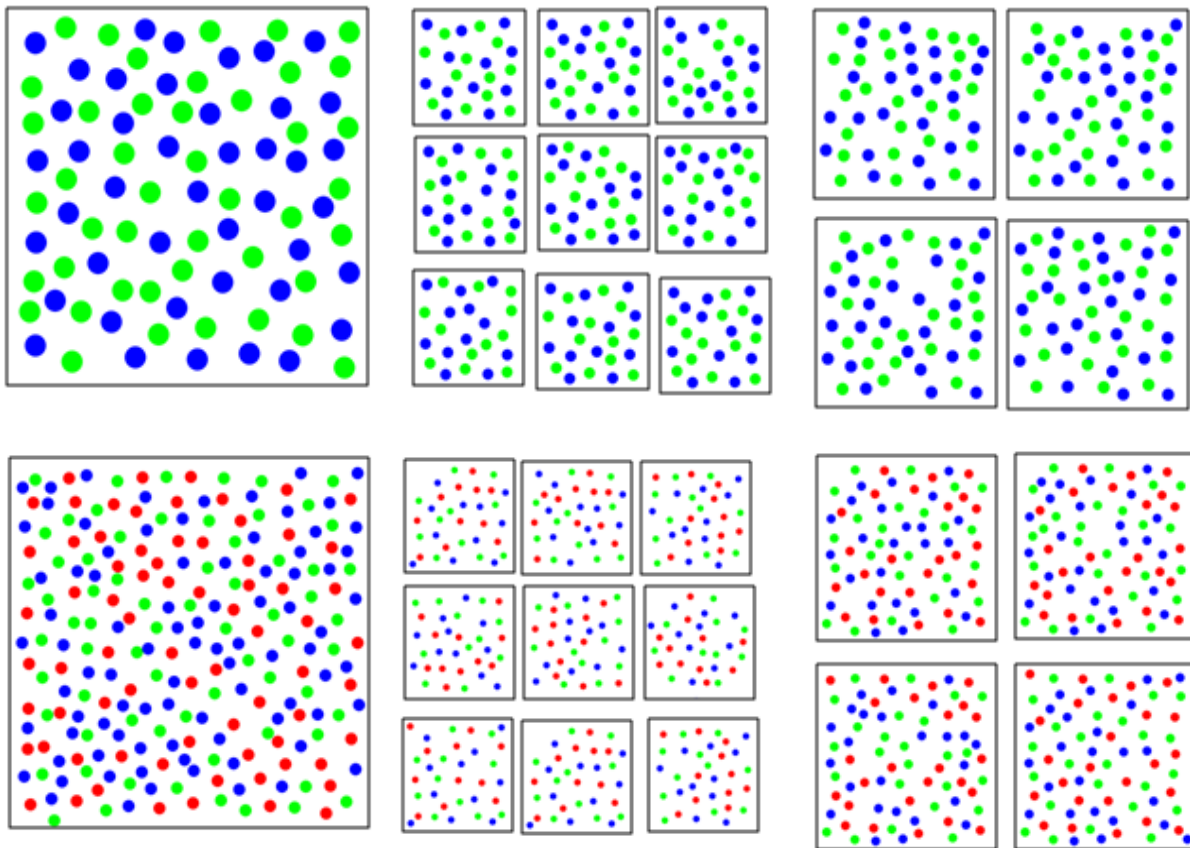


Figure 26. Exemples de composites étudiés.

4.2.2 Maillage des microstructures

La méthode des éléments finis a été choisie pour les calculs présentés dans ce travail. La technique de maillage libre est employée pour le maillage des images 2D des microstructures.

Les éléments utilisés sont les triangles bidimensionnels de Delaunay, 3 nœuds, avec intégration complète. Dans toutes les simulations, une bonne densité de maille a été choisie pour calculer les propriétés macroscopiques avec une bonne précision.

4.2.3 Conditions aux limites

Un autre élément très important pour les calculs par éléments finis concerne les conditions aux limites [16]. Pour un essai de traction uni-axiale dans la direction x par exemple, ces conditions aux limites sont comme suit, voire Figure 27:

- u (Point O (0, 0)) = 0
- v (Point O (0, 0)) = 0
- u (LEFT ($x=0, y$)) = 0
- v (LEFT ($x=0, y$)) = 0
- u (RIGHT ($x=l, y$)) = d

Avec u et v sont les déplacements appliqués dans les directions x et y , l la longueur du volume et d est le déplacement prescrit.

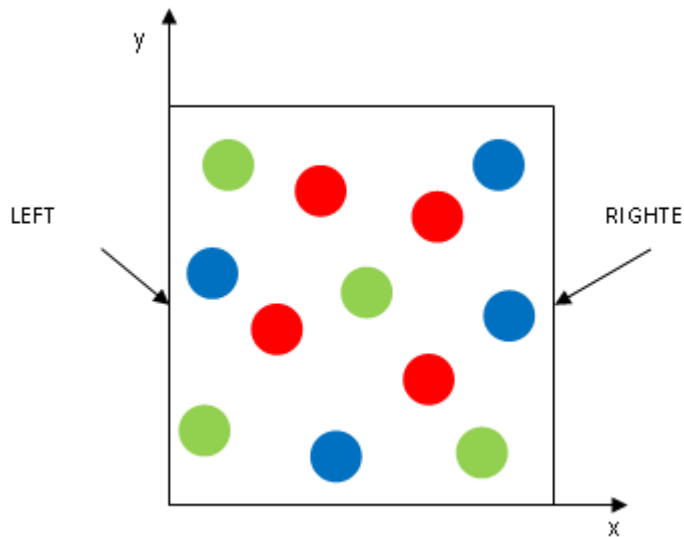


Figure 27. Description des conditions aux limites.

4.2.4 Nombre de réalisations et tailles du VER

Des calculs par éléments finis sur des petits volumes de différentes tailles, plus petites que le VER et extraites à partir du volume entier V ont été effectués. Différentes tailles des échantillons sont employées dans cette recherche ; 3000x3000 Pixel, 1000x1000 Pixel et de 500x500 Pixel. L'avantage principal de cette stratégie est qu'elle nous permet de travailler sur un volume suffisamment large pour un bas coût de calcul et de simulation. La Figure 26 montre des exemples de composites à 3-phases et à 4-phases avec des tailles de volumes différents utilisées dans ce document. La terme n désigne le nombre d'inclusions en chaque volume et p désigne le nombre de réalisations. Différentes configurations de matériaux avec l'augmentation des tailles sont résumées dans les Tableau 12 et Tableau 13. Il faut noter qu'en diminuant p signifie un nombre croissant d'inclusions n dans le petit-volume.

$$n = \sum_{i=1}^N M_i \quad (\text{Eq. 29})$$

p	36	9	4	4	4	1
n	2	24	50	76	100	200

Tableau 12. Caractéristiques des réalisations considérées pour le composite à 3-phases.

p	36	9	4	4	4	1
n	3	33	75	99	150	300

Tableau 13. Caractéristiques des réalisations considérées pour le composite à 4-phases.

Cela mène à un total de 58 différentes réalisations qui donne, pour tous les volumes, le même nombre d'inclusions M . Les contraintes et les déformations apparentes obtenues pour chaque petit-volume sont employées pour calculer la déformation moyenne \bar{E}^{app} et la contrainte moyenne $\bar{\Sigma}^{app}$ donnée à chaque incrément comme suit :

$$\bar{E}^{app} = \frac{1}{p} \sum_{i=1}^p E_i^{app} \quad (\text{Eq. 30})$$

$$\bar{\Sigma}^{app} = \frac{1}{p} \sum_{i=1}^p \Sigma_i^{app} \quad (\text{Eq. 31})$$

Σ_i^{app} est la contrainte pour une déformation donnée E_i^{app} de la réalisation i .

Dans toutes les simulations, les mêmes conditions aux limites ont été appliquées au VER entier et à tous les différents petit-volumes. La réponse moyenne de contrainte-déformation des petit-volumes pour les composites à 3-phases et à 4-phases sont comparées aux réponses effectives trouvées pour le VER.

4.3 Résultats et discussion

Dans toutes les simulations, seulement une fraction volumique $P = 70\%$ de la matrice est considérée. Comme le montre la Figure 28 et 29, des réponses effectives identiques de la contrainte-déformation dans les deux directions orthogonales ont été obtenues pour le VER ($p=1, n=200$) dans le cas à 3-phases et le VER ($p=1, n=300$) dans le cas du composite à 4-phases, voire la figure 30 et 31. a. Pour les cas de la moyenne dans les petit-volumes, des calculs numériques de la réponse apparente de contrainte-déformation des sous-domaines plus petits que le VER montrent des différences dans les deux directions x et y pour les deux types des matériaux considérés ici. Pour seulement un petit-volume, la réponse mécanique est anisotrope, figures 29b et 31b. Si la moyenne est entreprise pour tous les petit-volumes dans chaque direction, figures 28b et 29a), nous remarquons que les réponses moyennes apparentes sont presque identiques dans les deux directions (figure. 29b). Même cette isotropie récupérée est observé pour un cas spécifique, les mêmes tendances pour tous les arrangements sont démontrées, figure 32 et 33.

On peut conclure qu'un petit-volume seulement ne pourrait pas être employé comme VER pour décrire la réponse mécanique puisque l'anisotropie observée n'est pas en accord avec le caractère isotrope de la microstructure aléatoire à l'échelle macroscopique. Les réponses mécaniques obtenues pour d'autres réalisations du composite à 4-phases sont présentées dans la

figure. 34 et 35. Comme prévu, pour une subdivision donnée, la dispersion d'un petit-volume à un autre diminue quand la taille des petit-volumes augmente. Il s'avère qu'un petit-volume suffisamment grand doit être choisi à l'intérieur du volume entier pour éviter des fluctuations et pour atteindre une bonne évaluation de la moyenne.

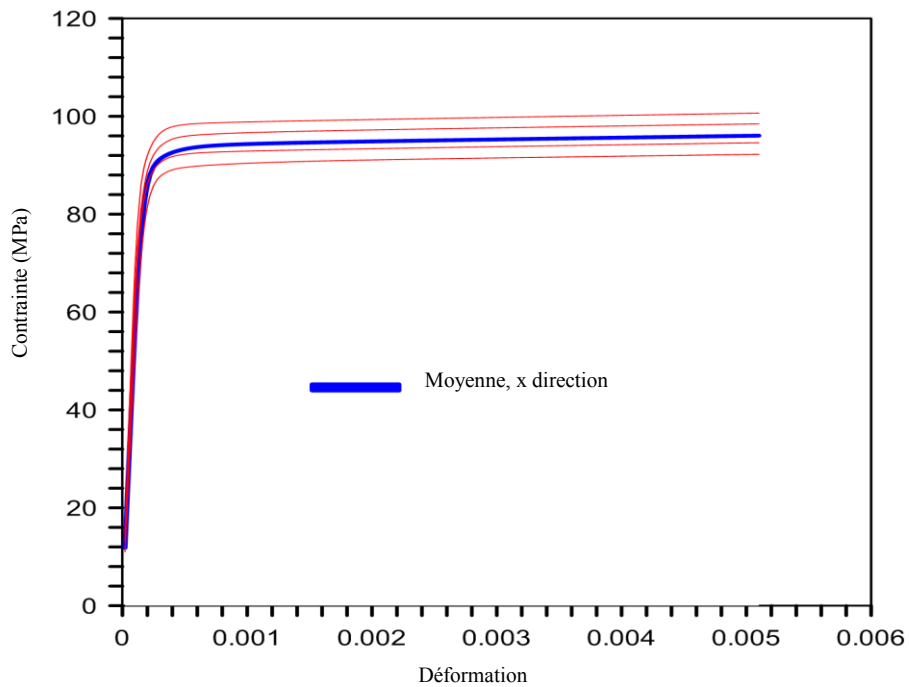
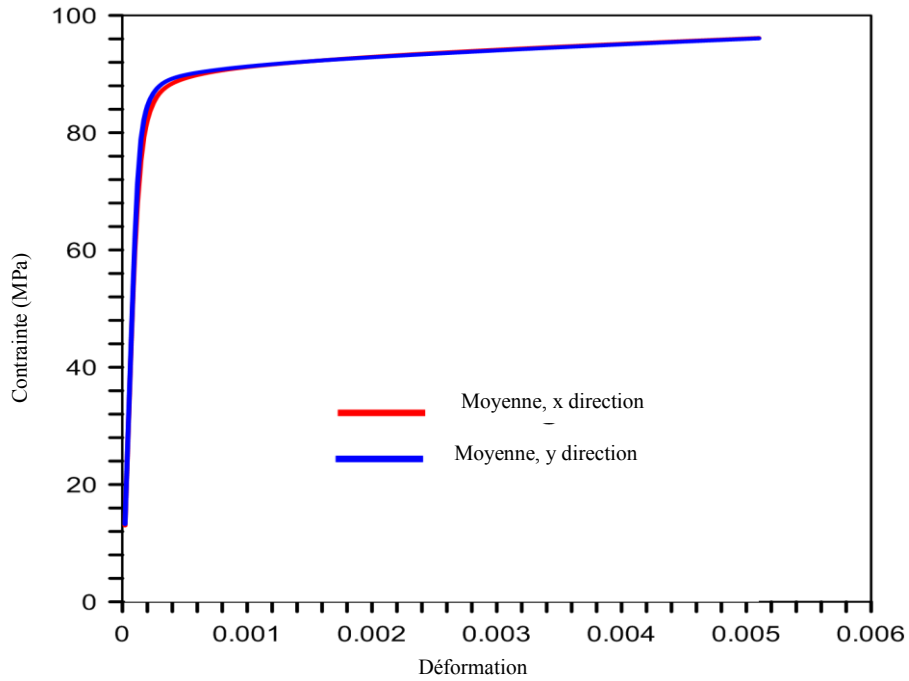
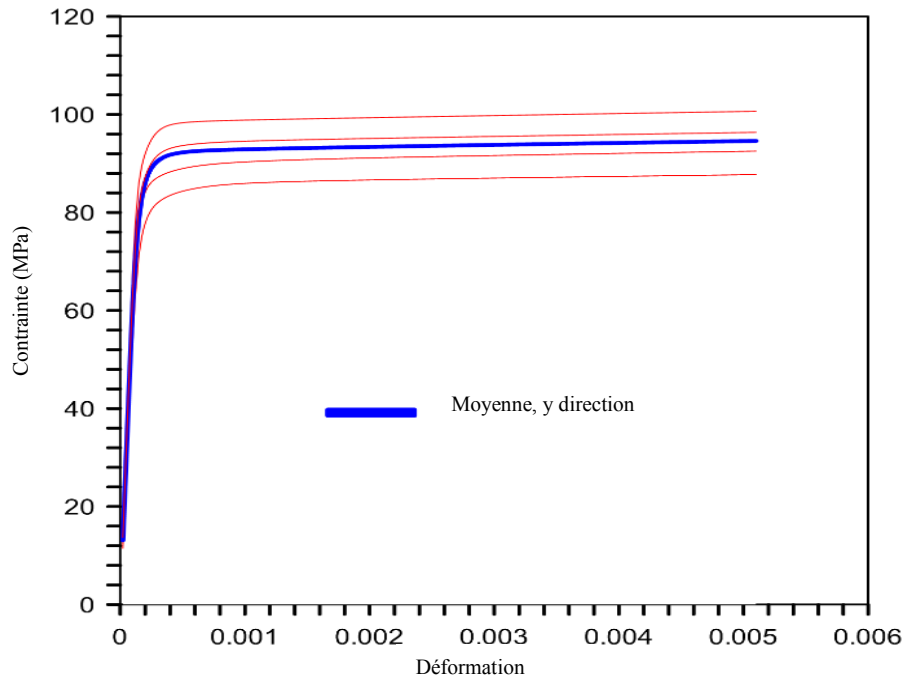
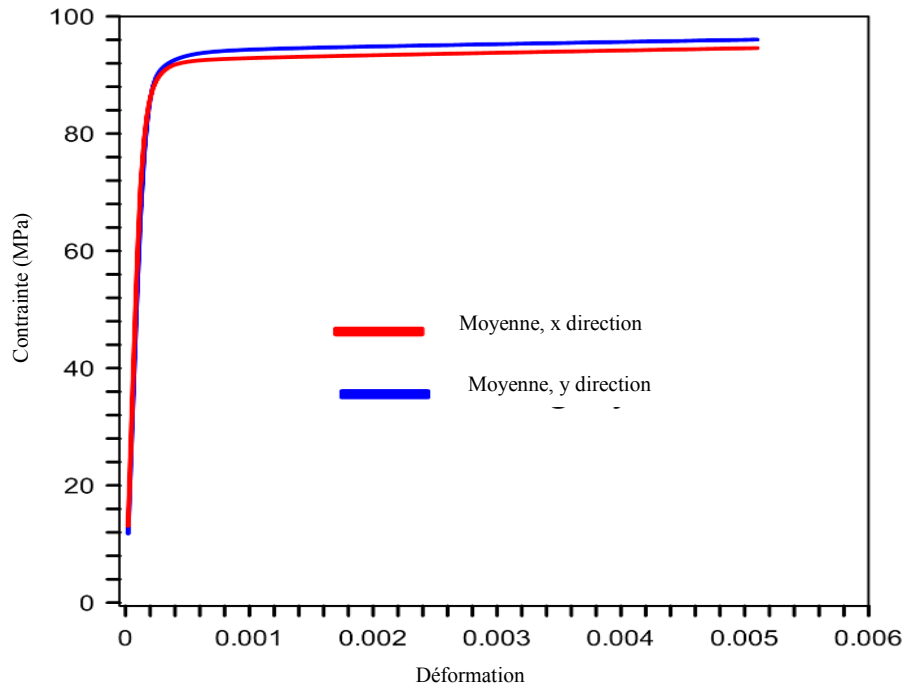


Figure 28. Courbes contraintes-déformations apparentes (lignes minces) et comparaison avec la courbe moyenne (ligne épaisse) pour les différentes configurations du composite à 3-phases,

$P = 70\%$: (a) ($p = 9, n = 24$), (b) ($p = 4, n = 76$).



(a)



(b)

Figure 29. Courbes contraintes-déformations apparentes (lignes minces) et comparaison avec la courbe moyenne (ligne épaisse) pour les différentes configurations du composite à 3-phases,

$P = 70\%$: (a) ($p = 4, n = 100$) , (b) ($p = 1, n = 200$).

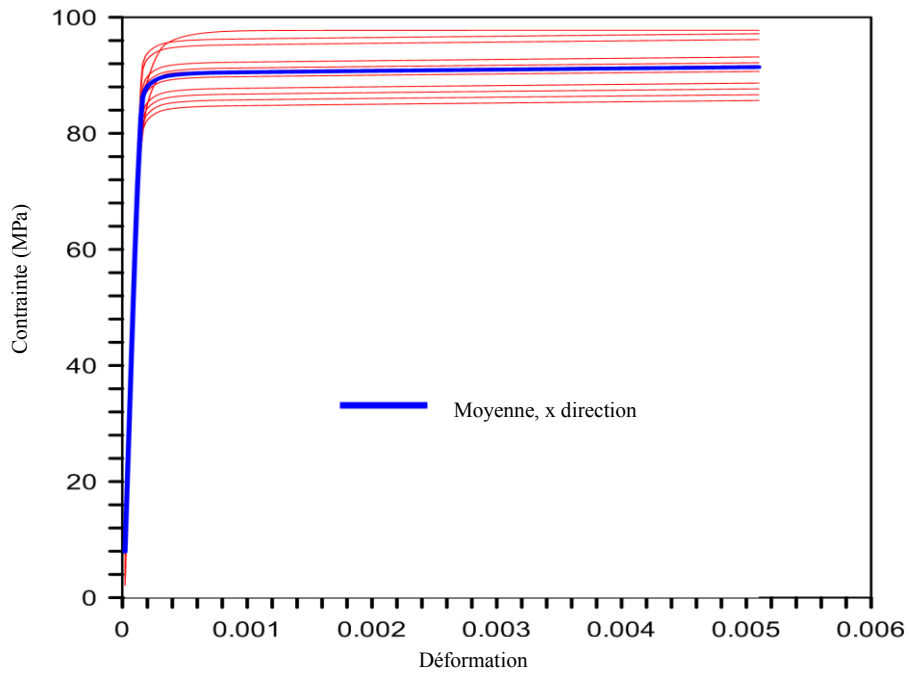
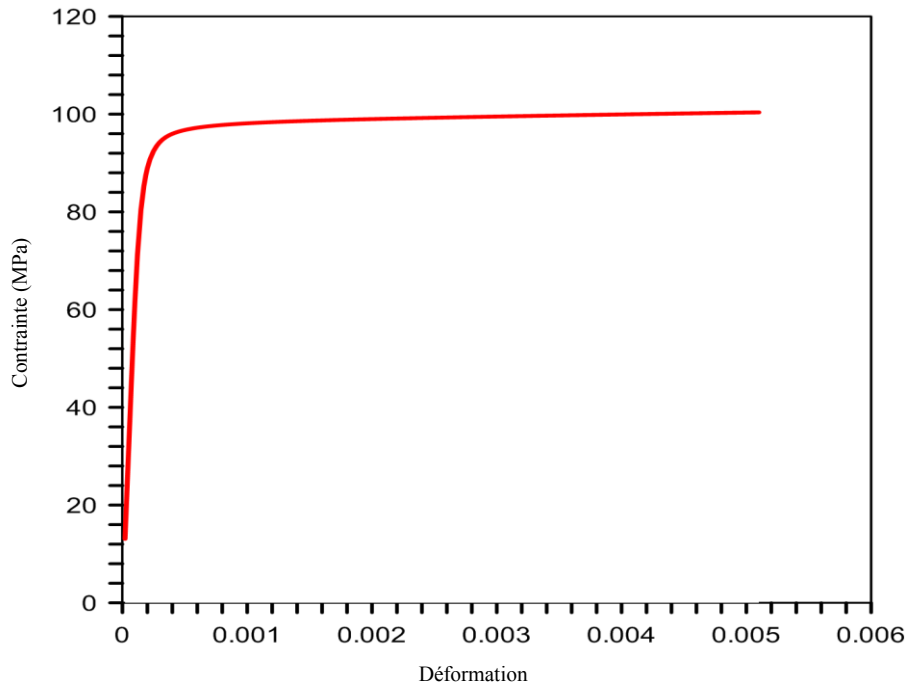
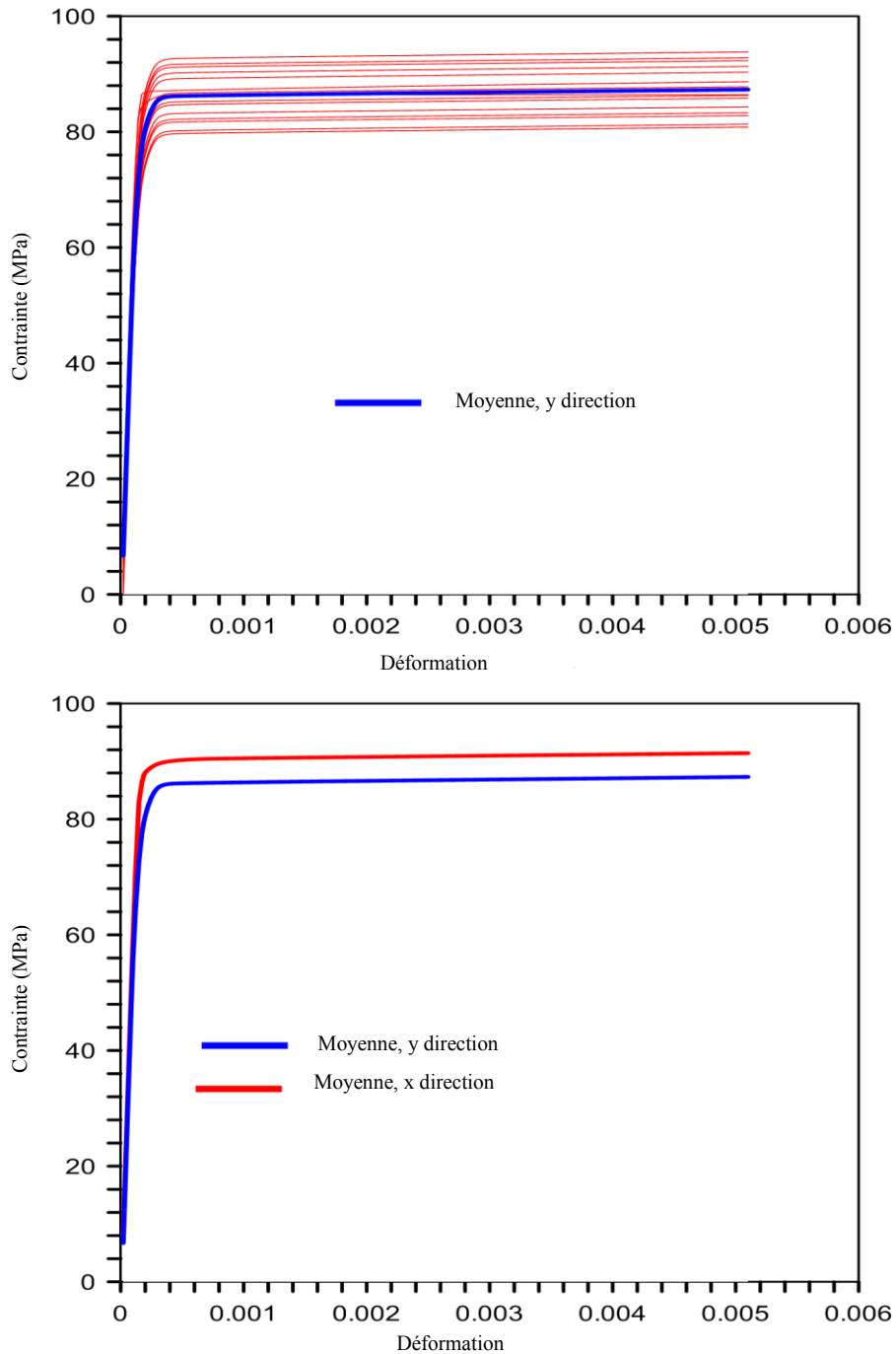


Figure 30. Courbes contraintes-déformations apparentes pour le matériau à 4-phases : (a) $VER(p=1, n=300), P=70\%$ (b) pour petit-volume ($p=36, n=3$) en traction suivant x .

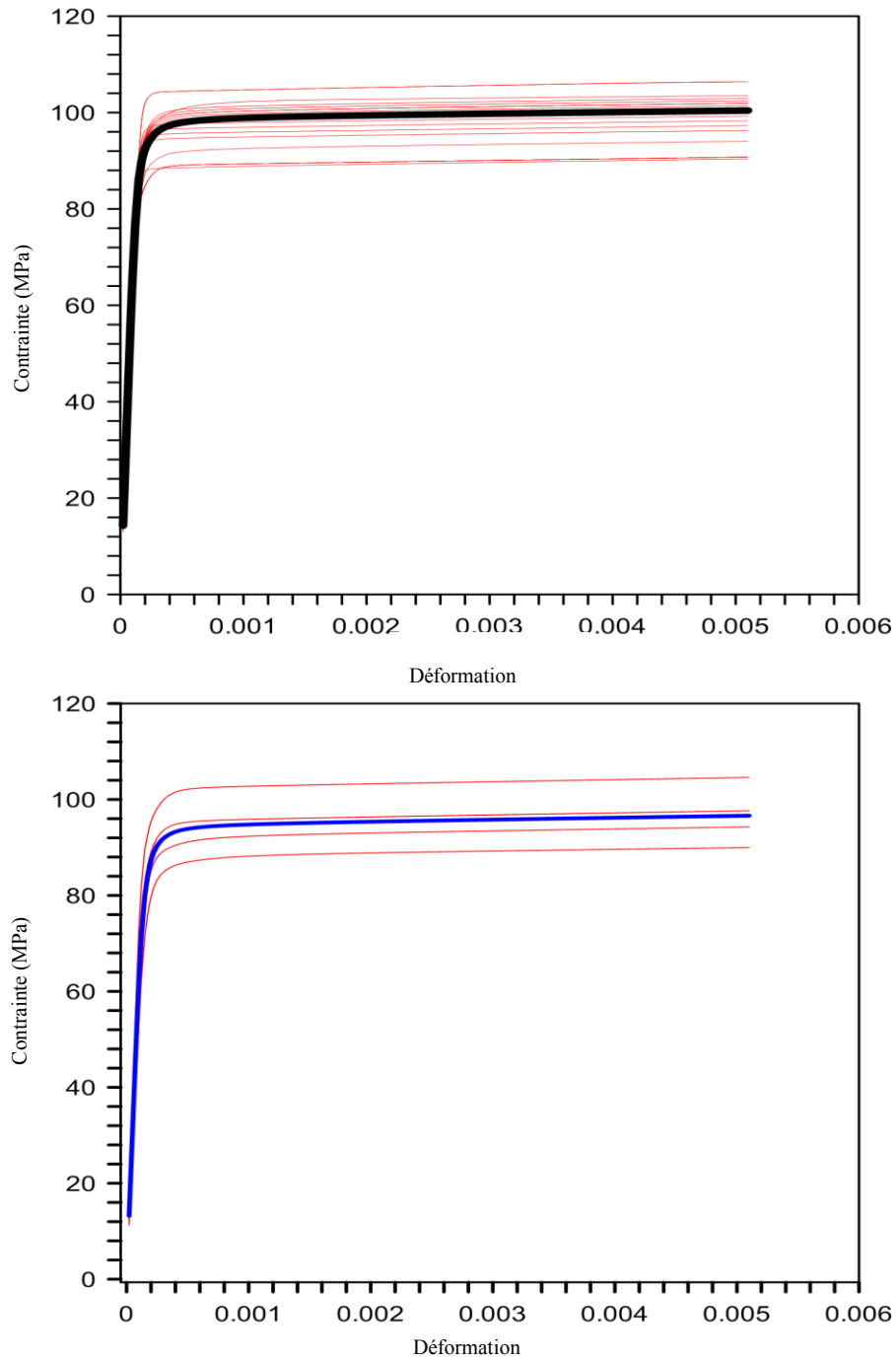
(a)



(b)

Figure 31. Courbes contraintes-déformations apparentes pour le matériau à 4-phases : $P = 70\%$, pour petit-volume ($p = 36, n = 3$), (a) en traction suivant y et (b) comparaison des courbes moyennes dans les deux directions x et y.

(a)



(b)

Figure 32. Courbes de contraintes-déformations apparentes (lignes minces) et comparaison avec la courbe moyenne (ligne épaisse) pour les différentes configurations du composite à 3-phases,

$P = 70\%$: (a) $(p = 9, n = 24)$, (b) $(p = 4, n = 76)$.

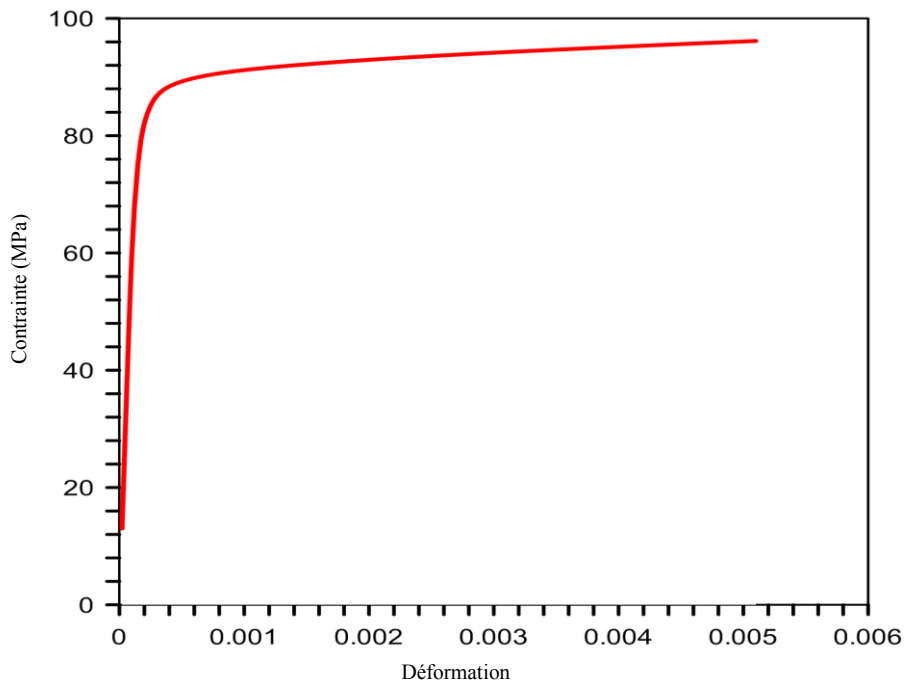
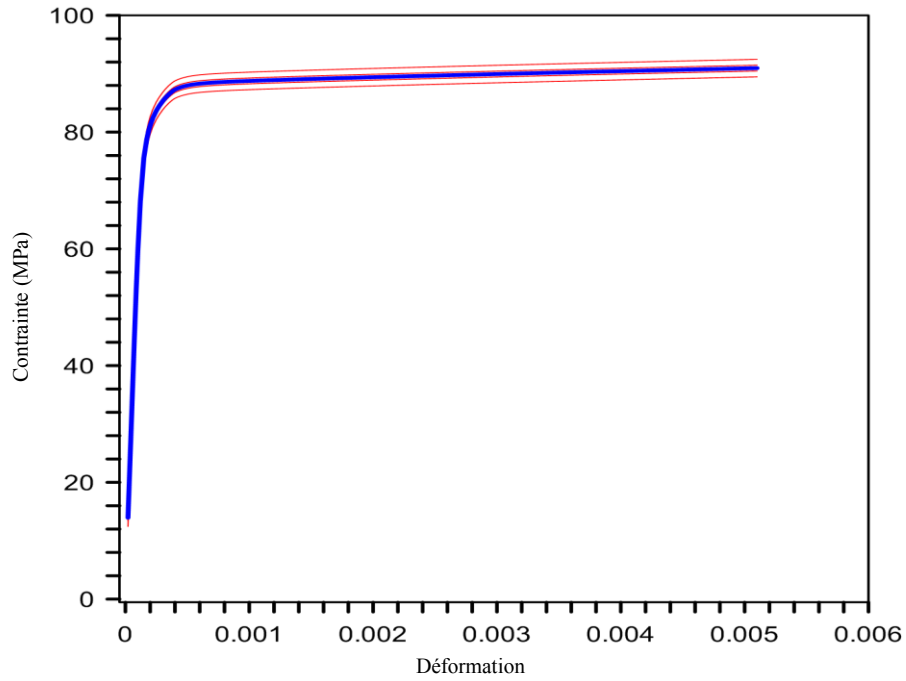


Figure 33. Courbes de contraintes-déformations apparentes (lignes minces) et comparaison avec la courbe moyenne (ligne épaisse) pour les différentes configurations du composite à 3-phases,

$P = 70\%$: (a) ($p = 4, n = 100$) , (b) ($p = 1, n = 200$).

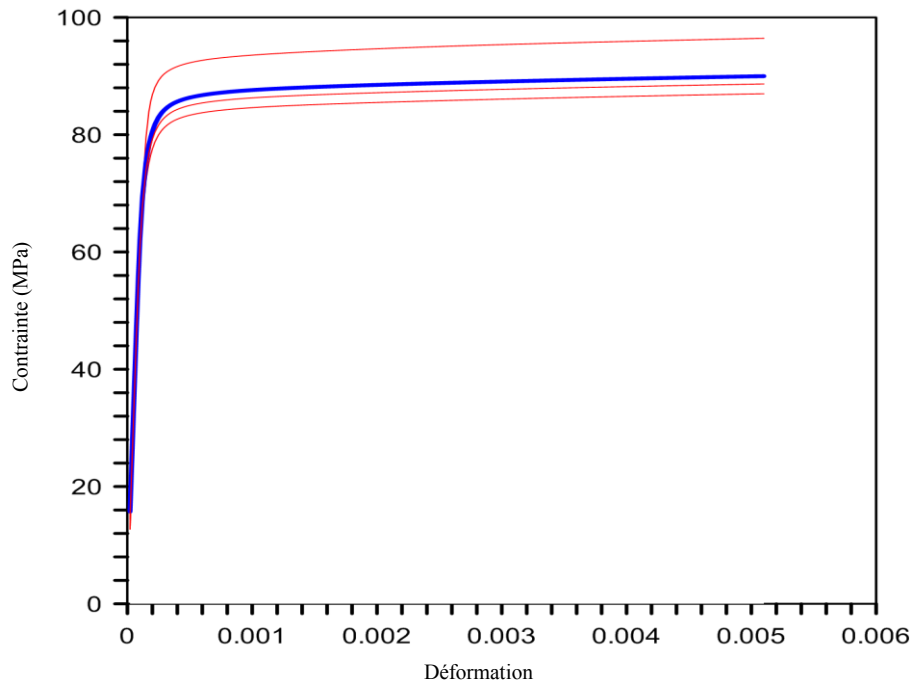
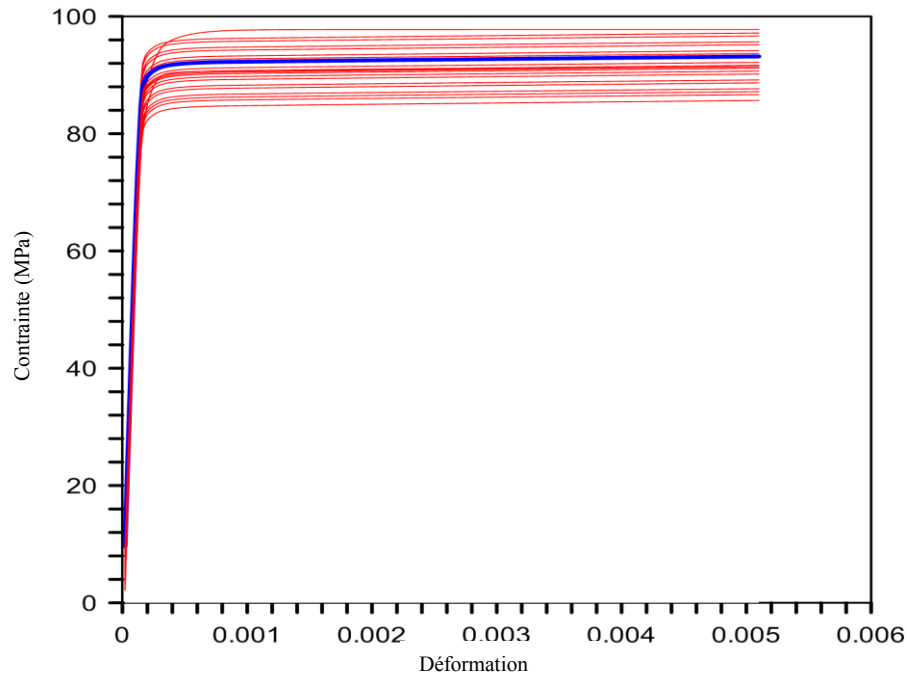


Figure 34. Courbes contraintes-déformations apparentes (lignes minces) et comparaison avec la courbe moyenne (ligne épaisse) pour les différentes configurations du composite à 4-phases,

$P = 70\%$: (a) $(p = 36, n = 3)$, (b) $(p = 4, n = 99)$.

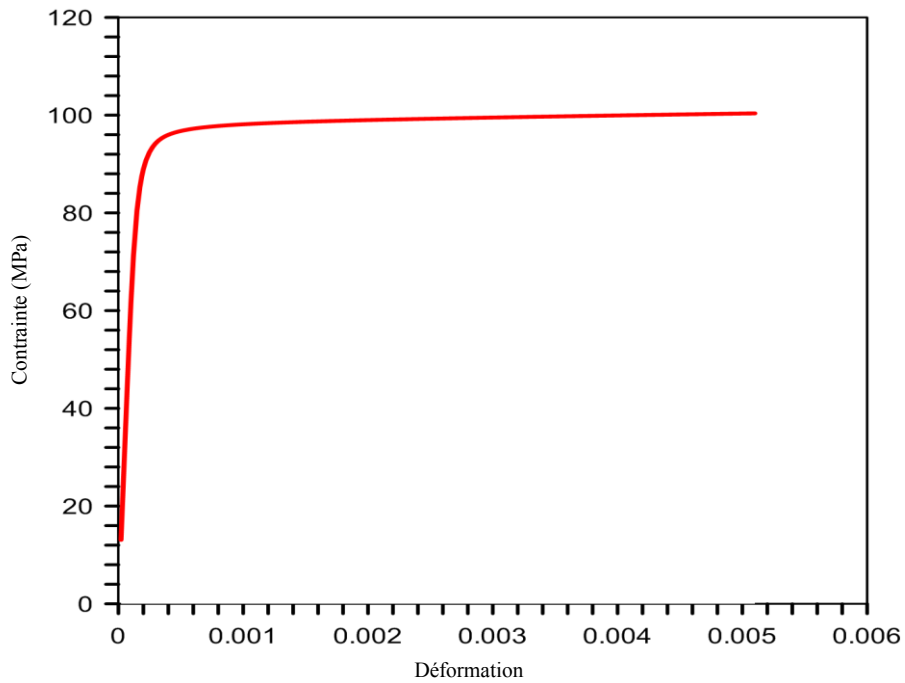
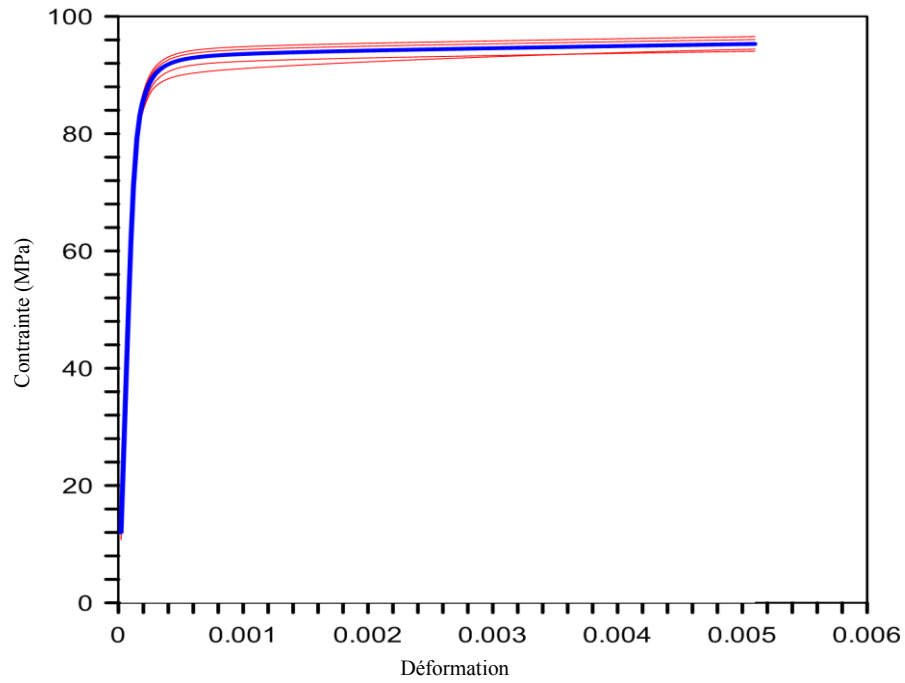


Figure 35. Courbes contraintes-déformations apparentes (lignes minces) et comparaison avec la courbe moyenne (ligne épaisse) pour les différentes configurations du composite à 4-phases,

$P = 70\%$: (a) ($p = 4, n = 150$) , (b) ($p = 1, n = 300$) .

Le nombre des petit-volumes fournissent, le même nombre de courbes de contrainte-déformation apparentes pour le matériau a 3-phases (figures. 34a et 34b) et pour le matériau à 4-phases (figure. 35a et 35b) avec une dispersion significative pour tous les cas. Cette dispersion significative peut être appréhendée comme quantité de la perte de représentativité due à une variabilité élevée des propriétés au-dessus des domaines limités. Il peut être apprécié que l'erreur diminue avec la taille du domaine. Pour caractériser la dispersion dans la réponse apparente de contrainte-déformation, l'erreur quadratique x_i est employée ici. Ce paramètre est défini comme suit :

$$x_i = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m \left(\frac{\sum_j^{app}}{\bar{\sum}_j^{app}} - 1 \right)^2, 1 \leq l \leq p \quad (\text{Eq. 32})$$

Où $\bar{\sum}_j^{app}$ représente la valeur de contrainte axiale pour une déformation axiale indiquée E_i^{app} $1 \leq j \leq m$ (m est tout le nombre d'incrément) et $\bar{\sum}_j^{app}$ désignent la contrainte axiale moyenne correspondante calculé sur p courbes. L'erreur quadratique moyenne \bar{x} de p réalisations est donnée par l'équation (32). Les valeurs de l'erreur quadratique \bar{x} sont rapportées pour un composite à 3-phases et à 4-phases dans les tableaux 14 et 15.

n	2	24	50	76	100	200
\bar{x} erreur	2.12	1.7	0.9	0.07	0.01	0

Tableau 14. Erreur pour chaque groupe de réalisations pour le composite à 3-phases.

n	3	33	75	99	150	300
\bar{x} erreur	2.34	1.5	1.02	0.5	0.05	0

Tableau 15. Erreur pour chaque groupe de réalisations pour le composite à 4-phases.

4.4 Conclusion

Dans cette partie, on a proposé une technique numérique originale d'homogénéisation pour évaluer la réponse effectives élasto-plastique des composites à N -phases. La technique est basée

sur les calculs sur des petits volumes limités qui contiennent différentes réalisations de particules aléatoires de taille fixe. Le petit-volume n'affiche pas obligatoirement une réponse isotrope, nous avons vérifié que la réponse moyenne d'un nombre approprié de différentes réalisations est isotrope. On a observé aussi une dispersion significative dans le régime plastique des courbes de contrainte-déformation apparentes pour les volumes trop petits. La dispersion dans les résultats diminue quand la taille de volume augmente. En conclusion, nous avons montré que la méthodologie utilisée dans Khdir [14] pour le composite à 2-phases à comportement élasto-plastique s'applique aussi dans le cas des composite à 3-phases, 4-phases et applicable pour les cas des matériaux hétérogènes à N-phases a comportement élasto-plastique.

4.5 Bibliographie

- [1] S. Nemat-Nasser, M. Hori, 1993. *Micromechanics: overall properties of heterogeneous materials*. North-Holland, New York.
- [2] Z. Hashin, S. Shtrikman, 1963. A variational approach to the theory of the elastic behaviour of multiphase materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 11, 127-140.
- [3] T. Mori, K. Tanaka, 1973. Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions. *Acta Metallurgica* 21, 571-574.
- [4] K. Danas, N. Aravas, 2012. Numerical modeling of elasto-plastic porous materials with void shape effects at finite deformations. *Composites: Part B* 43, 2544-2559.
- [5] K. Anoukou, F. Zaïri, M. Naït-Abdelaziz, A. Zaoui, T. Messenger, J.M. Gloaguen, 2011. On the overall elastic moduli of polymer/clay nanocomposite materials using a self-consistent approach. Part I: theory. *Composites Science and Technology* 71, 197-205.
- [6] J.W. Hutchinson, 1970. Elastic-plastic behavior of polycrystalline metals and composites. *Proceedings of the Royal Society of London A* 319, 247-272.
- [7] J.W. Ju, L.Z. Sun, 2001. Effective elastoplastic behavior of metal matrix composites containing randomly located aligned spheroidal inhomogeneities. Part I: micromechanics-based formulation. *International Journal of Solids and Structures* 38, 183-201.
- [8] I. Doghri, C. Friebel, 2005. Effective elasto-plastic properties of inclusion-reinforced composites. Study of shape, orientation and cyclic response. *Mechanics of Materials* 37, 45-68.

- [9] F. Zaïri, J.M. Gloaguen, M. Naït-Abdelaziz, A. Mesbah, J.M. Lefebvre, 2011. Study of the effect of size and clay structural parameters on the yield and post-yield response of polymer/claynanocomposites via a multiscale micromechanical modelling. *Acta Materialia* 59, 3851-3863.
- [10] P. Ponte Castaneda, P. Suquet, 1998. Nonlinear composites. *Advances in Applied Mechanics* 34, 171-302.
- [11] G.P. Tandon, G.J. Weng, 1988 A theory of particle-reinforced plasticity. *Journal of Applied Mechanics* 55, 126-135.
- [12] H. Shen and L. C. Brinson, 2007. Finite element modeling of titanium foam. *Int. J. Solids Struct.* 44, 1, 320–335.
- [13] W.J, Drugan, J.R, Willis, 1996. A micromechanics-based nonlocal constitutive equation and estimates of representative volume element size for elastic composites. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 44, 497-524.
- [14] Y.K. Khdir, T. Kanit, F. Zaïri, M. Naït-Abdelaziz, 2013. Computational homogenization of elastic-plastic composites. *Int. J. Solids Struct.*
- [15] S. Hazanov, C. Huet, 1994. Order relationships for boundary conditions effect in heterogeneous bodies smaller than the representative volume. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 42, 1995-2011.
- [16] T. Kanit, S. Forest, I. Galliet, V. Mounoury, D. Jeulin, 2003. Determination of the size of the representative volume element for random composites: statistical and numerical approach. *International Journal of Solids and Structures* 40, 3647-3679.
- [17] T. Kanit, F. Naït Guyen, S. Forest, D. Jeulin, M. Reed, S. Singleton, 2006. Apparent and effective physical properties of heterogeneous materials: representativity of samples of two materials from food industry. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 195, 3960-3982.

Conclusion générale

Cette thèse a pour objectif l'étude des comportements macroscopiques des microstructures hétérogènes à N-phases. Les microstructures sont à base des modèles aléatoires de la morphologie mathématique, en utilisant l'algorithme de Poisson.

La détermination des propriétés élastiques et thermiques de matériaux hétérogènes requiert la prise en compte de la microstructure à l'échelle microscopique en utilisant la technique d'homogénéisation numérique. Deux configurations de matériaux ont été exploitées à savoir : des composites à 3-phases et d'autres à 4-phases.

Cette étude a mis en évidence l'intérêt d'une détermination rigoureuse de la taille du volume élémentaire représentatif (VER) d'une microstructure, celle-ci doit tenir compte de plusieurs paramètres comme : le nombre de phase, la fraction volumique, le contraste, le type de la propriété et la morphologie des hétérogénéités.

De ce fait, nous avons déterminé la variation de la taille du volume élémentaire représentatif pour le module de compression et pour le module de cisaillement ainsi que pour la conductivité thermique. L'évaluation de cette taille est basée sur l'utilisation des approches numériques et statistiques. L'ensemble des résultats numériques obtenus ont été validés par les approches analytiques et statistiques. Nous avons pu également étudier la variation de la taille du VER en fonction des fractions volumique et des caractéristiques morphologiques des différentes phases présentent.

Ce travail a permis aussi de généraliser la nouvelle notion morphologique pour l'étude des microstructures hétérogènes proposé par EL Moumen [33] à des matériaux à N-phases. Il s'agit du "concept de la morphologie équivalente". En effet, nous pouvons affirmer que dans le cas des propriétés élastiques, il est possible de substituer une microstructure à N-phases à base des formes des inclusions non connectées par une microstructure à 2-phases à base de schéma de circulaire non interconnectées. Ces deux microstructures conduisent aux mêmes propriétés

effectives mais avec deux VER différents. En plus nous avons proposé une expression pour le calcul de la propriété de la nouvelle inclusion. Il faut noter aussi que ce nouveau concept présente un intérêt majeur pour l'étude des propriétés élastiques dans le cas des matériaux hétérogènes avec des morphologies complexes.

Cette thèse a permis en plus de généraliser le principe proposé par Khdir [14] pour l'étude du comportement elasto-plastique des matériaux à 2-phases à des matériaux à N-phases. Il s'agit de faire des simulations numériques dans ce cas sur des petits volumes mais avec un nombre de réalisation suffisant afin de prédire avec une précision acceptable la réponse mécanique de tel matériau.

Annexe 1

Propriétés élastiques en 2D

Dans un problème isotrope 2D, le module de compressibilité k et le module de cisaillement μ sont reliés avec le module de Young E et le coefficient de Poisson ν par la relation :

$$k = \frac{E}{2(1+\nu)(1-2\nu)} \quad \text{et} \quad \mu = \frac{E}{2(1+\nu)}$$

Modèle Self-consistent

Pour un matériau isotrope en 2D qui contient N différentes particules isotropiques avec des modules de compressibilités k^N et modules de cisaillements μ^N , l'estimation obtenue par le modèle self-consistent de k^{SC} peut-être écrit par :

$$\sum_{i=1}^N P_i \frac{k^i - k^{SC}}{k^i + \mu^{SC}} = 0$$

Il faut noter que le module de compressibilité estimé par ce modèle self-consistent dépend de l'estimation du module de cisaillement μ^{SC} :

$$\sum_{i=1}^N P_i \frac{\mu^i - \mu^{SC}}{\mu^i + \frac{\mu^{SC} k^{SC}}{k^{SC} + 2\mu^{SC}}} = 0$$

P_i est la fraction volumique de la phase i .

Bornes de Hashin et Shtrikman

Pour le matériau isotrope 2D, *i.e.* présentant une distribution isotrope des hétérogénéités et dont le comportement est élastique, les bornes peuvent être données. En se basant sur le principe vibrationnelle de minimisation de l'énergie dans le cas d'élasticité linéaire, Hashin and Shtrikman ont défini des bornes de 2^{em} pour le module de compressibilité k et le module de cisaillement μ . Le module inférieur est noté par l'exposant¹, Le module supérieur est noté

par l'exposant N . Il faut noter que $k^{i-1} < k^i$ et $\mu^{i-1} < \mu^i$. L'exposant $^{HS^+}$ présente la borne supérieure tandis que l'exposant $^{HS^-}$ présente la borne inférieure. Définissant maintenant les bornes pour le module k :

$$k^{HS^-} = k^1 + \frac{A_1}{1 + \alpha_1 A_1}$$

$$k^{HS^+} = k^N + \frac{A_N}{1 + \alpha_N A_N}$$

avec α_1 , α_N , A_1 et A_N sont donnés :

$$\alpha_1 = -\frac{3}{3k^1 + 4\mu^1}$$

$$\alpha_N = -\frac{3}{3k^N + 4\mu^N}$$

$$A_1 = \sum_{i=2}^N \frac{P_i}{\frac{1}{k^i - k^1} - \alpha_1}$$

$$A_N = \sum_{i=1}^{N-1} \frac{P_i}{\frac{1}{k^i - k^N} - \alpha_N}$$

On peut définir le module de compressibilité k^H : $k^{HS^-} \leq k^H \leq k^{HS^+}$.

Pour le module de cisaillement μ :

$$\mu^{HS^-} = \mu^1 + \frac{1}{2} \frac{B_1}{1 + \beta_1 B_1}$$

$$\mu^{HS^+} = \mu^N + \frac{1}{2} \frac{B_N}{1 + \beta_N B_N}$$

Avec β_1 , β_N , B_1 et B_N comme suit :

$$\beta_1 = -\frac{3(k^1 + 2\mu^1)}{5\mu^1(3k^1 + 4\mu^1)}$$

$$\beta_N = -\frac{3(k^N + 2\mu^N)}{5\mu^N(3k^N + 4\mu^N)}$$

$$B_1 = \sum_{i=2}^N \frac{P_i}{\frac{1}{2(\mu^i - \mu^1)} - \beta_1}$$
$$B_N = \sum_{i=1}^{N-1} \frac{P_i}{\frac{1}{2(\mu^i - \mu^N)} - \beta_N}$$

Les bornes du module de cisaillement μ^H sont définis par : $\mu^{HS^-} \leq \mu^H \leq \mu^{HS^+}$.

Annexe 2

Des modèles analytiques définissant la conductivité thermique pour le cas des matériaux multi-phases ont été étudiés. Ces modèles considérant une dispersion aléatoire des particules sphériques ont été choisis

Le modèle cohérent de Bruggeman

Le modèle cohérent pour déterminer la conductivité effective d'un milieu fait de particules sphériques de n de différentes conductivités et de fraction de volume dans une matrice infinie de la conductivité. L'équation cohérente est donnée par :

$$\sum_{r=1}^n P_r \left(\frac{\lambda^r - \lambda_e}{\lambda^r + (d-1)\lambda_e} \right) = 0$$

Où λ^r avec $r = \{1, 2, 3\}$ est la conductivité de chaque phase et de la fraction de volume correspondante.

Estimation de Maxwell et Garnett

J.C. Maxwell et Garnett a proposé un modèle de la prévision de la conductivité thermique du composé avec les inclusions sphériques de n de la fraction de conductivité et de volume dans une matrice infinie de la conductivité, en n'assumant aucune interaction entre les inclusions [Maxwell Garnett, 1904] :

$$\frac{\lambda_e - \lambda_m}{\lambda_e + (d-1)\lambda_m} = \sum_{r=1}^n P_r \left(\frac{\lambda^r - \lambda_m}{\lambda^r + (d-1)\lambda_m} \right)$$

ملخص:

في هذا العمل، دراسة طريقة تجانس رقمية واحصائية لخليط معدني يحتوي على عدد من المكونات من ثلاثة الى ن مكون باستعمال العنصر الحجمي التمثيلي. قمنا بدراسة تأثير عدة عناصر كنسبة المكون وحجم العنصر المادي على الخصائص المتحصل عليها. أجريت عدة عمليات محاكاة رقمية باستعمال برنامج العناصر المنتهية والذي مكن من إيجاد العلاقة التي تربط بين الخصائص الميكانيكية و the $integral$ $range$. تم اقتراح علاقة رياضية تربط بين هذا الأخير والنسب الحجمية للمكونات الى جانب اقتراح مبداء جديد سمي بالشكل الموافق للخليط المكون من ن عنصر. في هذا العمل ايضا، قمنا بدراسة طريقة تجانس رقمية للخليط المعدني يحتوي على عدد من المكونات من ثلاثة الى ن مكون ذات خصائص حرارية معينة لمعرفة مدى تأثير نسبة المكون وحجم العنصر المادي على الخصائص المتحصل عليها. كما أجريت عدة عمليات محاكاة رقمية لإيجاد العلاقة التي تربط بين ردة الفعل الميكانيكية ونسبة المكون وحجم العنصر المادي. لاحظنا انه لحجم العنصر تأثير كبير على ردة الفعل الميكانيكية اذ انه يمكن ان تجرى المحاكاة الرقمية على احجام صغيرة من الخليط وباعداد مناسبة للحصول على نتائج مقبولة. **الكلمات الدلالية:** طريقة تجانس رقمية واحصائية، ن مكون، $integral$ $range$ ، الخصائص الميكانيكية مرنة وبلاستيكية، الخصائص الحرارية، العنصر الحجم الممثل.

Résumé

Dans ce travail une étude statistique et numérique des matériaux hétérogènes à N-phases en utilisant le volume élémentaire représentatif pour déterminer l'influence de la fraction volumique et le nombre d'inclusions sur les propriétés obtenues. Les simulations numériques, réalisées ont montrés l'existence d'une relation entre les propriétés mécanique et la portée intégrale d'où la proposition d'une expression analytique reliant cette dernière et la fraction volumique des inclusions. En plus, une généralisation du concept de morphologie équivalente est proposée. Une étude de l'influence du nombre ainsi que la fraction volumique des phases sur les propriétés thermiques est réalisée. Les simulations numériques du comportement plastique des composites à N-phases ont montrés que la simulation des petits volumes sans recourir à des gros volumes donnera des résultats satisfaisantes.

Mots-clés : Approche Statistique et Numérique de l'homogénéisation, N-phases, portée intégrale, propriété mécanique élastique et plastique, propriété thermique, Volume Élémentaire Représentatif.

Abstract

The representative elementary volume is used in this thesis for the study of heterogeneous mediums with an aim of determining their effective properties and the effect of some parameters such us: volume fraction and number of inclusion. Numerical simulations with finite element tools show the existence of relation between the elastic properties and the integral range. An analytical relation was proposed to relate the volume fraction of inclusions to this integral range. A generalization of the equivalent morphology concept is proposed. The study of the effect of volume fraction and numbers of inclusions in the thermal properties is investigate. Numerical simulations show that mechanical behavior of N-phase can be obtained with a small and sufficient number of volume of material; the error in this case is insignificant.

Keywords : Statistical and Numerical Approach of the homogenization, N-phase, integral range, elastic and plastic mechanical properties, thermal properties, Representative Elementary Volume.