

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



**Université de Batna 2 – Mostefa Ben Boulaid**  
**Faculté de Technologie**  
**Département de Mécanique**



## Thèse

Préparée au sein du Laboratoire de **m**écanique des **S**tructures et **m**atériaux



Présentée pour l'obtention du titre de :  
**Docteur en Sciences en Mécanique**  
**Option : Construction Mécanique**

Sous le Thème :

**Détermination des propriétés mécaniques effectives des milieux hétérogènes, approche par le modèle n+1 phases et validation par l'approche numérique**

Présentée par :

**BATACHE Djamel**

**Devant le jury composé de :**

ZIDANI Kamel	Professeur	Université de Batna 2	Président
OUTTAS Toufik	Professeur	Université de Batna 2	Rapporteur
KANIT Toufik	M.C (HDR)	Université de Lille - France	Co-Rapporteur
MADANI Salah	Professeur	Université de Batna 2	Examineur
BELKACEM BOUZIDA Aissa	Professeur	Université de Batna 1	Examineur
HECINI Mabrouk	Professeur	Université de Biskra	Examineur

**Décembre 2018**

*A la mémoire de mon père et de mon frère,*

*A toute ma famille.*

*Djamel*

# Remerciements

À l'issue de la rédaction de cette thèse, je suis convaincue que la recherche est loin d'être un travail solitaire. Il me sera très difficile de remercier tout le monde, car c'est grâce à de nombreuses personnes, par leur générosité et leur intérêt manifestés que j'ai pu mener cette thèse à son terme.

Ce travail est le fruit d'une coopération entre le Laboratoire de Mécanique des Structures et Matériaux (Lamsm) de l'Université de Batna 2 en Algérie et le Laboratoire de Mécanique de Lille (LML) de l'université de Lille en France.

J'exprime ma gratitude à Monsieur OUTTAS Toufik, mon encadreur de thèse et Directeur du laboratoire de recherche (Lamsm) pour m'avoir donné envie de réaliser cette thèse, pour ses incessants encouragements et sa disponibilité à tout temps malgré ses nombreuses charges.

Je voudrais rendre ma reconnaissance à Monsieur Kanit Toufik, mon co-encadreur de thèse, initiateur des travaux de recherches au sein du laboratoire (Lamsm), qui m'a proposé au début un thème en 3D, qui a nécessité un calcul parallèle et par la suite n'a pas abouti pour faute de moyens informatiques, par la suite, il m'a guidé sur le chemin de cette thèse. Enfin, j'ai été extrêmement sensible à ses qualités humaines d'écoute et de compréhension.

Je ne saurais trouver les mots pour adresser mes remerciements les plus vifs à Monsieur ZIDANI Kamel de l'université de Batna 2 et Directeur de l'Ecole Nationale d'Application des Techniques des Transports Terrestres (ENATT) de Batna, collègue, ami et frère, tout d'abord, pour m'avoir encouragé et pour avoir, ensuite, accepté de présider mon jury de thèse. Mes vifs remerciements sont également adressés à Messieurs BELKACEM BOUZIDA Aissa de l'Université de Batna 1, HECINI Mabrouk de l'Université de Biskra et MADANI Salah de l'Université de Batna 2, qui ont accepté de faire partie du jury de cette thèse et d'examiner son contenu.

Heureusement que mes amis et mes collègues étaient là pour m'inciter. Ils ont tous cru en moi et ouf ! maintenant j'y suis ! Alors merci à vous tous, MADANI Salah, BOUGUERN Fattouma, BOURIH Abdellah, ZAOUCH Boubaker, BRIOUA Mourad, GAID Mohamed Tahar, DJARI Salim, DJENANE Abdellah, LEBCHEK Kamel, KHERRAF Allaoua, LAHBARI Miloud, BENMOUSSA Hocine, MOHAMMEDI Brahim, BARKAT Belkacem, DRID Said, RAHAL GHARBI Mohamed El Hadi, BENSER Said, HAMANA Maleki, BELKHIR Said, MOHAMMEDI Lwardi, BOUCETA Kamel, AMAIRI Redha....J'en oublie certainement encore et je m'en excuse. Encore un grand merci à tous pour m'avoir conduit à ce jour mémorable.

Ce travail n'aurait pas été possible sans le soutien des membres du laboratoire que je remercie chacun individuellement, qui m'ont encouragé à me consacrer sereinement à l'élaboration de ma thèse.

Ces remerciements ne peuvent s'achever, sans une pensée particulière et une mention spéciale à mes amis et collègues MASMOUDI Mohamed, KADDOURI Wahid et NAOUN Mahiedine qui ont épuré cette thèse, c'est grâce à leur disponibilité que ce travail doctoral est achevé.

Enfin, mes remerciements vont à mes parents et toute ma famille, en particulier ma femme à laquelle je souhaite un bon rétablissement, et mes 3+1 filles AMIRA, SOUMIA, ROUMAÏSSA, et RANIM MINET'ARRAHMANE qui, avec cette question récurrente, « quand est-ce que tu la soutiens cette thèse ? », bien qu'angoissante en période fréquente de doutes, m'ont permis de ne jamais dévier de mon objectif final. Leurs attentions et encouragements m'ont accompagnée tout au long de ces années, j'en suis redevable.

Mes remerciements à tous ceux que je ne nomme pas, mais qui se reconnaîtront.

# Notations

$\varepsilon_{ij}$	Tenseur du deuxième ordre des déformations du matériau hétérogène,
$\sigma_{ij}$	Tenseur du deuxième ordre des contraintes du matériau hétérogène,
$\Sigma_{ij}$	Tenseur du deuxième ordre des contraintes macroscopiques du matériau homogène,
$E_{ij}$	Tenseur du deuxième ordre des déformations macroscopiques du matériau homogène,
$\langle \rangle$	La moyenne,
$c_{ijkl}$	Tenseur local d'élasticité
$s_{ijkl}$	Tenseur local de souplesse,
$C_{ijkl}$	Tenseur apparent d'élasticité,
$S_{ijkl}$	Tenseur apparent de souplesse,
$P$	Fraction volumique,
$N$	Nombre d'inclusion
$f_i$	Fraction volumique de la composante $i$ ,
$p$	Pression isostatique,
$\theta$	Le taux de déformation isostatique,
$k$	Module de compressibilité,
$K^H$	Module de compressibilité homogénéisé,
$\mu$	Module de cisaillement,
$\mu^H$	Module de cisaillement homogénéisé,
$u$	Déplacement,
$V$	Volume du domaine 3D,
$\partial V$	Les limites du domaine 3D,

$S$	Surface du domaine 2D,
$\partial S$	Les limites de la surface 2D,
$VER$	Volume Elémentaire Représentatif,
$E$	Module d'élasticité (de Young),
$\hat{E}$	Module de Young effectif,
$E_i$	Module de Young de la composante $i$ ,
$E^H$	Module de Young homogénéisé,
$\hat{\sigma}$	Contrainte effective,
$\hat{\varepsilon}$	Déformation effective,
$\nu$	Coefficient de Poisson,
$\lambda$	Coefficient de la conductivité thermique,
$\lambda^H$	Conductivité thermique homogénéisé,
$\rho$	Coefficient de la résistivité thermique,
$i$	Indice correspondant à l'inclusion,
$m$	Indice correspondant à la matrice,
$ph$	Indice de la phase,
$T$	Température,
$\nabla T$ ou $g$	Gradient de température local,
$q$	Flux de chaleur local,
$d$	Taille de l'hétérogénéité,
$l$	Taille du VER,
$L$	Taille de la structure,
$A_{ijkl}$	Tenseur de localisation des déformations,
$B_{ijkl}$	Tenseur de localisation des contraintes,
$G_i$	Tenseur macroscopique du gradient de température,
$Q_i$	Tenseur macroscopique du flux de chaleur,
$a_{ij}$	Tenseur de localisation du gradient de température,
$b_{ij}$	Tenseur de localisation du flux de chaleur,

# Table des matières

<b>1. Généralités et littérature.</b>	<b>5</b>
1.1 Introduction .....	5
1.2 Généralités sur les matériaux hétérogènes.....	6
1.2.1 Matériaux composites.....	7
1.2.2 Matériaux poreux .....	8
1.2.3 Matériaux de génie civil.....	9
1.3 Effet d'échelles dans les matériaux hétérogènes .....	10
1.4 Objectif de l'homogénéisation .....	11
1.5 Méthodologie de l'homogénéisation .....	12
1.6 Notion de VER dans un matériau hétérogène.....	13
1.7 Méthodes d'homogénéisation analytique et numérique.....	21
1.7.1 Homogénéisation analytique .....	21
1.7.2 Homogénéisation numérique .....	25
1.7.2.1 Approches numériques basées sur les microstructures virtuelles .....	26
1.7.2.2 Approches numériques basées sur les microstructures réelles.....	29
1.7.2.3 Approches numériques basées sur les microstructures périodiques .....	34
1.7.3 Choix des conditions aux limites pour l'approche numérique .....	36
1.8 Synthèse .....	38
<b>2. Approches de l'homogénéisation.</b>	<b>39</b>
2.1 Introduction .....	39
2.2 Technique d'homogénéisation des matériaux hétérogènes .....	40
2.2.1 Les Méthodes analytiques .....	40
2.2.2 Les Méthodes numériques .....	41
2.2.2.1 Les Méthodes intégrées .....	41

2.2.2.2	Les Méthodes séquencées .....	41
2.2.2.3	Elasticité linéaire .....	42
2.2.2.4	Conductivité thermique .....	42
2.2.3	Localisation .....	43
2.2.3.1	Elasticité linéaire .....	43
2.2.3.2	Conductivité thermique .....	44
2.2.4	Homogénéisation .....	44
2.2.4.1	Elasticité linéaire .....	44
2.2.4.2	Conductivité thermique .....	44
2.2.5	Condition de HILL .....	45
2.2.6	Conditions aux limites et moyenne des champs locaux .....	45
2.2.6.1	Elasticité linéaire .....	46
2.2.6.2	Conductivité thermique .....	47
2.2.6.3	Propriétés apparentes et effectives .....	49
2.3	Estimations analytiques des propriétés élastiques .....	54
2.3.1	Estimations analytiques .....	55
2.3.1.1	Einstein (1906-1911) .....	55
2.3.1.2	Smallwood (1944) .....	55
2.3.1.3	Guth-Gold (1938) .....	55
2.3.1.4	Budiansky (1965) .....	55
2.3.2	Modèles analytiques de changement d'échelles .....	56
2.3.2.1	Problème de l'inclusion d'Eshelby .....	56
2.3.2.2	Schéma des distributions diluées .....	57
2.3.2.3	Modèle auto-cohérent .....	58
2.3.2.4	Mori-Tanaka (1973) .....	60
2.3.3	Encadrement analytique .....	61
2.3.3.1	Bornes d'ordre zéro .....	61
2.3.3.2	Bornes du premier ordre .....	61
2.3.3.3	Bornes du second ordre [Dirrenberger, 2012] .....	63
2.4	Estimations analytiques des propriétés thermiques .....	66
2.4.1	Modèles analytiques de changement d'échelles .....	67
2.4.1.1	Problème de l'inclusion d'Eshelby .....	67
2.4.1.2	Schéma des distributions diluées .....	67
2.4.1.3	Modèle auto-cohérent .....	67



2.4.1.4	Schéma de Mori-Tanaka.....	68
2.4.2	Estimations théoriques .....	69
2.4.2.1	Estimation de Maxwell-Garnett.....	69
2.4.2.2	Modèle auto-cohérent de Bruggeman.....	70
2.4.3	Encadrements analytiques des propriétés thermiques.....	71
2.4.3.1	Bornes d'ordre zéro.....	71
2.4.3.2	Bornes du premier ordre.....	71
2.4.3.3	Bornes du deuxième ordre.....	72
2.5	Synthèse .....	73

### 3. Evaluation des propriétés élastiques effectives des microstructures à plusieurs morphologies. 74

3.1	Introduction .....	74
3.2	Représentation de la microstructure.....	75
3.2.1	Description de la microstructure .....	75
3.3	Outils numériques .....	84
3.3.1	Technique du maillage utilisé.....	84
3.3.2	Détermination de la densité du maillage .....	86
3.3.3	Propriétés physiques utilisées.....	87
3.4	Propriétés élastiques apparentes et effectives .....	87
3.4.1	Fraction apparente et volume réel de la phase d'inclusion.....	87
3.4.2	Propriétés élastiques obtenues.....	90
3.4.2.1	Propriétés élastiques pour $p^a = 10\%$ .....	91
3.4.2.2	Propriétés élastiques pour $p^a = 30\%$ .....	93
3.4.2.3	Propriétés élastiques pour $p^a = 50\%$ .....	95
3.4.2.4	Propriétés mécaniques pour toutes les morphologies .....	98
3.5	Synthèse .....	103

<b>4. Construction d'un modèle analytique itératif d'homogénéisation des matériaux hétérogènes.</b>	105
4.1 Introduction .....	105
4.2 Rappel sur les propriétés élastiques .....	107
4.2.1 Elasticité à trois dimensions .....	107
4.2.2 Elasticité à deux dimensions (plane) .....	109
4.2.2.1 Déformation plane .....	110
4.2.2.2 Contrainte plane .....	111
4.3 Théorie des modules effectifs .....	112
4.3.1 Bornes du premier ordre : Voigt et Reuss .....	112
4.3.2 Bornes du second ordre : Hashin-Shtrickman .....	113
4.3.2.1 Bornes pour le module de compressibilité $K$ .....	114
4.3.2.2 Bornes pour le module de cisaillement $\mu$ .....	115
4.3.2.3 Bornes pour la conductivité $\lambda$ .....	116
4.4 Le schéma itératif de la solution .....	117
4.5 Comparaison des résultats et discussions .....	119
4.5.1 Résultats obtenus pour un contraste de 23 pour le module d'Young et 25 pour la conductivité thermique .....	121
4.5.1.1 Cas d'un problème en deux dimensions .....	121
4.5.1.2 Cas d'un problème en trois dimensions .....	122
4.5.2 Résultats obtenus pour un contraste égale à 100 .....	124
4.5.2.1 Cas d'un problème en deux dimensions .....	126
4.5.2.2 Cas d'un problème en trois dimensions .....	126
4.5.3 Résultats obtenus pour un contraste égale à 1000 .....	128
4.5.3.1 Cas d'un problème en deux dimensions .....	128
4.5.3.2 Cas d'un problème en trois dimensions .....	129
4.6 Synthèse .....	131
<b>5. Conclusion</b>	133
Annexe	136
Bibliographie	140

# Liste des figures

1.1	Exemple des matériaux hétérogènes multiphasiques obtenu par tomographie.....	7
1.2	Composites hétérogènes de renforts : (a) fibres et (b) particules.....	8
1.3	Matériaux hétérogènes poreux : (a) milieu poreux à l'échelle microscopique (CNRS Photothèque/ISM), (b) une mousses métalliques réelle et (c) une mousse simulée.....	8
1.4	Matériaux de génie civil : (a) roche et (b) béton, Escoda (2012).....	9
1.5	Echelles et tailles des constituants dans un matériau de construction, Musielak et al. (2013).....	10
1.6	Principe d'homogénéisation d'une microstructure hétérogène.....	12
1.7	Conditions d'échelle sur une microstructure hétérogène : $d \ll l \ll L$ .....	13
1.8	Exemple de VERs d'une microstructure hétérogène, Gitman et al. (2007).....	14
1.9	Modélisation de l'élément de volume représentatif. Terada et al., (2000).....	15
1.10	V.E.R.s, (a) Image échantillonnée avec plusieurs zones à sélectionner - modèle numérisé (32-32 pixels). (b) Image de la microstructure avec sélection de la région cellulaire unitaire. Terada et al. (2000).....	16
1.11	Convergence associée à l'orthotropie et à l'isotropie pour une matrice d'élasticité homogénéisée. Terada et al. (2000).....	16
1.12	Détermination du VER, (a) Valeurs moyennes et intervalles de confiance sur la valeur moyenne du module d'élasticité. (b) Module de cisaillement, en fonction de la taille du domaine. Kanit et al., (2003). .....	17
1.13	Modèles VER de composites renforcés de particules sphériques réparties aléatoirement pour une fraction volumique de 60% avec différentes tailles de particules sphériques (Kari et al. 2007).....	18
1.14	Variation des propriétés effectives moyennes et de l'erreur en fonction de la taille du VER (Kari et al. 2007). .....	18
1.15	(a) Homogénéisation des sous-régions d'un composant du composite hétérogène. (b) Valeur moyenne de la contrainte du modèle EF avec 20 particules mesurés aux extrémités supérieures et inférieures (coins) des cubes. (Khan et al., 2011).....	19
1.16	Images 3D des systèmes de sable utilisés (S1, S2, S3 et S4) pour l'analyse du VER. Les diamètres et les hauteurs des images sont variables entre 23 à 31mm. Al-Raoush et Papadopoulos, (2010).....	20
1.17	Module de compressibilité k en fonction de la fraction volumique (a) contraste c=4, (b) contraste c=100. Dirrenberger, (2012).....	24
1.18	Conductivité thermique $\lambda$ en fonction de la fraction volumique (a) contraste c=4, (b) contraste c=100. Dirrenberger, (2012).....	25
1.19	Méthodologie de l'utilisation de l'approche numérique.....	26

1.20	Microstructures virtuelles utilisées pour la simulation : (a) González et al. (2004), (b) Guo et al. (2014), (c) Kari et al. (2007b) et (d) Tawerghi and Yi, (2009).....	27
1.21	Variation des propriétés effectives d'une distribution aléatoire de sphères noyées dans une matrice élastique en fonction de la fraction volumique. Segurado and Llorca (2002).....	28
1.22	Microstructures de morphologie complexe pour l'approche numérique, (a) Kanit et al. (2003). (b) Simulation à deux échelles de polycristaux multiphasés Barbe and al. (2001a). (c) Une tessellation de Voronoi de 3000 grains Quey et al. (2011).....	28
1.23	(a) Structure cellulaire des mousses d'aluminium, (b) échantillon et section bidimensionnelle reconstruite avec une tomographie aux rayons X (l'arête de l'échantillon mesure 10 cm). Forest et al. (2002).....	29
1.24	La microstructure du THTZ (a) tomographiques pour analyses morphologiques sur les THTZ en 3D, (b) parties connexes de la zircone contenue dans le ZS, (c) parties connexes de la phase vitreuse contenue dans le ZS. Ding (2012).....	30
1.25	(a) Maillage 3D d'un agrégat de THTZ avec 12% de phase vitreuse en volume, (b) découpage en 24 sous-domaines du maillage 3D du matériau (chaque couleur correspond à un sous-domaine). Madi, (2006).....	31
1.26	Structure 3D d'un extrudé d'amidon (A46) révélé par tomographie RX. Chiad et al. (2009).....	31
1.27	(a) Détermination du VER et (b) Evolution du module de Young en fonction de la densité relative pour les extrudés étudiés. Chiad et al. (2009).....	32
1.28	Imagerie 3D : (a) échantillon SA3 (phase polycristalline, glace) et (b) échantillon SB1 (phase polymère gras, crème) Kanit et al. (2006). (c) Béton renforcé de fibres Altendorf (2011).....	32
1.29	Préparation d'une microstructure réelle pour la simulation.....	33
1.30	Elaboration d'un cliché MET numérique. (a) Volume de côté 1600nm, (b) Extraction d'une lamelle, (c) Projection dans le plan (microstructure 2D).....	34
1.31	Différents choix possibles de la cellule unité sur un tableau hexagonal Michel et al. (1999).....	35
1.32	Comparaison entre les estimations de Bergman pour le module de compressibilité effectif $k_0$ , le module de cisaillement effectif $\mu_0$ et les calculs FFT d'un réseau périodique de vides sphériques. Willot et Jeulin (2009).....	35
1.33	Valeurs moyennes et intervalles de variation pour le module de cisaillement en fonction de la taille du domaine, pour trois conditions aux limites différentes (polycristaux de cuivre) El Houdaigui, 2006.....	37
1.34	Distributions de nœuds identiques sur les faces opposées afin d'appliquer des conditions périodiques autour de la cellule unité, Grasset-Bourdel, (2011).....	37
2.1	Illustration de la convergence de la propriété $Z$ pour les différentes conditions aux limites.....	51
2.2	Problème formulé par Eshelby. Eshelby, 1957.....	57
2.3	Illustration du principe de la solution diluée.....	57
2.4	Illustration du principe du schéma Auto-cohérent.....	58
3.1	Différentes formes des pores dans les microstructures étudiées : (a) Circulaire; (b) Carrée ; (c) Triangulaire ; (d) Pentagonale (e) Elliptique ( $r=1/2$ ) ; (f) Elliptique ( $r=1/3$ ) ; (g) Elliptique ( $r=1/4$ ).....	76

3.2	Microstructures aléatoires 2D : (a) schéma Booléen et (b) schéma de sphères dures.....	77
3.3	Mosaïque de Voronoï généré par le processus de Poisson : a) microstructure avec 8000 grain et (b) maillage de la microstructure, Kanit (2003).....	78
3.4	Microstructure virtuelle d'un élastomère chargé de particules, générée par le processus de Poisson et son maillage, Jean (2009).....	78
3.5	Microstructures à 50 inclusions pour une fraction $P = 10\%$ . (a) Ellipse $r = 1/2$ ; (b) Ellipse $r = 1/3$ et (c) Ellipse $r = 1/4$ .....	80
3.6	Microstructures à 50 inclusions pour une fraction $P = 10\%$ . (a) Cercle; (b) Carré; (c) Triangle et (d) pentagone.....	80
3.7	Microstructures à 50 inclusions pour $P = 30\%$ . (a) Ellipse $r = 1/2$ ; (b) Ellipse $r = 1/3$ et (c) Ellipse $r = 1/4$ .....	81
3.8	Microstructures à 50 inclusions pour une fraction $P = 30\%$ . (a) Cercle; (b) Carré; (c) Triangle et (d) Pentagone.....	81
3.9	Microstructures à 50 inclusions pour une fraction $P = 30\%$ . (a) Ellipse $r = 1/2$ ; (b) Ellipse $r = 1/3$ et (c) Ellipse $r = 1/4$ . .....	82
3.10	Microstructures à 50 inclusions pour une fraction $P = 50\%$ . (a) Cercle; (b) Carré; (c) Triangle et (d) Pentagone.....	82
3.11	Microstructures à inclusions elliptiques $r = 1/2$ : (a) 100 inclusions; (b) 500 inclusions et (c) 1000 inclusions.....	83
3.12	Microstructures à 50 inclusions elliptiques $r = 1/2$ pour une fraction $P = 30\%$ . (a) 6 inclusions; (b) 20 inclusions; (c) 50 inclusions et (d) 100 inclusions.....	83
3.13	Principe du maillage régulier. (a) Grille régulière de densité 200 x 200 ; (b) microstructure à 50 inclusions pour $p^a = 50\%$ et $r = 0,5$ et (c) Microstructure maillée avec 40000 EF.....	85
3.14	Densité de maillage, (a) Convergence du coefficient de compressibilité $k$ en fonction de la densité du maillage. (b) Temps de calcul correspondant à chaque cas de maillage.....	86
3.15	Fraction volumique réelle $P$ des inclusions pour : (a) $p^a = 10\%$ , (b) $p^a = 30\%$ . et (c) $p^a = 50\%$ ...	89
3.16	Echantillons des réalisations pour les inclusions de forme circulaire à 10%. (a) 6 inclusions ; (b) 20 inclusions ; (c) 50 inclusions ; (d) 100 inclusions ; (e) 200 inclusions ; (g) 500 inclusions ; (h) 1000 inclusions.....	91
3.17	Propriétés mécaniques en fonction du nombre d'inclusions de forme circulaire pour la fraction volumique $p^a = 10\%$ (a) KUBC et (b) PBC.....	92
3.18	Echantillons des réalisations pour les inclusions de forme circulaire à 30%. (a) 6 inclusions ; (b) 20 inclusions ; (c) 50 inclusions ; (d) 100 inclusions ; (e) 200 inclusions ; (g) 500 inclusions ; (h) 1000 inclusions.....	93
3.19	Propriétés mécaniques périodique (PBC) en fonction du nombre d'inclusions de forme circulaire pour la fraction volumique $p^a = 30\%$ (a) KUBC et (b) PBC.....	94
3.20	Echantillons des réalisations pour les inclusions de forme circulaire à 50%. (a) 6 inclusions ; (b) 20 inclusions ; (c) 50 inclusions ; (d) 100 inclusions ; (e) 200 inclusions ; (g) 500 inclusions ; (h) 1000 inclusions. ....	

	95
3.21 Propriétés mécaniques périodique (PBC) en fonction du nombre d'inclusions de forme circulaire pour la fraction volumique $p^a = 50\%$ (a) KUBC et (b) PBC .....	96
3.22 Propriétés mécaniques $k$ et $\mu$ en fonction du nombre d'inclusions pour les fractions volumiques d'inclusions de forme circulaire : (a) $p^a = 10\%$ , (b) $p^a = 30\%$ . et (c) $p^a = 50\%$ .....	98
3.24 Propriétés mécaniques Périodique (KUBC) en fonction du nombre d'inclusions pour le cas de toutes les morphologies. : (a) $p^a = 10\%$ , (b) $p^a = 30\%$ . et (c) $p^a = 50\%$ .....	99
3.33 Propriétés mécaniques Périodique (PBC) en fonction du nombre d'inclusions pour le cas de toutes les morphologies. : (a) $p^a = 10\%$ , (b) $p^a = 30\%$ . et (c) $p^a = 50\%$ .....	101
4.1 Interprétations géométriques des bornes du premier ordre a) <i>Voigt</i> , b) <i>Reuss</i> . .....	118
4.2 Organigramme de résolution du schéma itératif. ....	118
4.3 Résultats obtenus pour un matériau hétérogène de contraste 23, cas 2D : (a) Module de compressibilité $K$ , (b) Module de cisaillement $\mu$ , (c) Conductivité thermique $\lambda$ (contraste 25).....	122
4.4 Résultats obtenus pour un matériau hétérogène de contraste 23, cas 3D : (a) Module de compressibilité $K$ , (b) Module de cisaillement $\mu$ , (c) Conductivité thermique $\lambda$ (contraste 25).....	123
4.5 Résultats obtenus pour un matériau hétérogène de contraste 100, cas 2D : (a) Module de compressibilité $K$ , (b) Module de cisaillement $\mu$ , (c) Conductivité thermique $\lambda$ .....	125
4.6 Résultats obtenus pour un matériau hétérogène de contraste 100, cas 3D : (a) Module de compressibilité $K$ , (b) Module de cisaillement $\mu$ , (c) Conductivité thermique $\lambda$ .....	124
4.7 Résultats obtenus pour un matériau hétérogène de contraste 1000, cas 2D : (a) Module de compressibilité $K$ , (b) Module de cisaillement $\mu$ , (c) Conductivité thermique $\lambda$ .....	129
4.8 Résultats obtenus pour un matériau hétérogène de contraste 1000, cas 3D : (a) Module de compressibilité $K$ , (b) Module de cisaillement $\mu$ , (c) Conductivité thermique $\lambda$ .....	130

# Liste des tableaux

1.1	Définitions de VER proposées par les scientifiques.....	14
1.2	Expression mathématique des approches d'homogénéisation analytique pour le coefficient de compression $k$ .....	23
1.3	Expression mathématique des approches d'homogénéisation analytique pour le coefficient de cisaillement $\mu$ .....	23
3.1	Nombre de réalisations $n$ en fonction du nombre d'inclusion $N$ .....	79
3.2	Pertes de fraction de volume des inclusions.....	90
3.3	Les valeurs des simulations numériques, les bornes de Voigt, Les bornes de Hashin-Shtrikman HS +, le modèle auto-cohérent (AC) pour et l'erreur relative entre la simulation et le modèle auto-cohérent pour : (a) $p^a = 10\%$ , (b) $p^a = 30\%$ . et (c) $p^a = 50\%$ .....	103
4.1	Les données d'entrée pour les différents matériaux considérés dans le programme itératif, cas 2D : (a) Module de Young $E$ , (b) Module de compressibilité $K$ , (c) Module de cisaillement $\mu$ , (d) Conductivité thermique $\lambda$ .....	118
4.2	Les données d'entrée pour les différents matériaux considérés dans le programme itératif, cas 3D : (a) Module de Young $E$ , (b) Module de compressibilité $K$ , (c) Module de cisaillement $\mu$ , (d) Conductivité thermique $\lambda$ .....	120

# Introduction

Pendant des siècles, les démarches de la construction ont été faites selon les règles de l'art, grâce à un savoir-faire transmis de génération en génération, des connaissances plus ou moins empiriques, des descriptions intuitives des lois de la physique et des considérations esthétiques. Ces démarches ont prouvé leur efficacité en nous cédant nombre de chefs-d'œuvre architecturaux ayant résisté à l'épreuve du temps. Mais les critères actuels d'efficacité et de sécurité ne sont plus compatibles avec de telles démarches, qui ont ainsi cédé le pas à une approche plus rationnelle et prédictive. C'est ainsi qu'est né le calcul des structures qui, sans renoncer aux connaissances du passé, a permis de les approfondir, de mieux les maîtriser, de les enrichir, et a ouvert la voie vers de nouvelles techniques. Si aujourd'hui les avions volent, les trains à grande vitesse roulent et les ponts tiennent de plus en plus loin, c'est aussi parce que les constructeurs sont devenus ingénieurs et en particulier spécialistes en calcul des structures. La description du comportement mécanique des matériaux constitutifs des structures s'avère souvent trop pauvre et donc peu représentative de la réalité, les propriétés ne peuvent être déterminées qu'approximativement par des essais longs et coûteux. L'ingénieur se retrouve alors dans l'habit de l'homme de l'art, contraint à se fier à son intuition, à essayer, essayer à nouveau, pour, en fin de compte, souvent écarter les solutions audacieuses et novatrices.

C'est là qu'intervient la micromécanique, science, qui prétend réintroduire des concepts plus cartésiens dans la description du comportement des matériaux : pourquoi ne pas tenter de prévoir ce dernier à partir de la connaissance de la structure fine des matériaux ? Peut-être le calcul des microstructures à l'aide de la science computationnelle des matériaux permettra-t-il à l'ingénieur de franchir un nouveau pas, qui lui donnera accès à de nouveaux matériaux, qui rendront possibles de nouvelles structures.



Au cours des dernières décennies, la science computationnelle des matériaux a suscité un grand intérêt chez de nombreux chercheurs. Plusieurs théories et méthodes basées généralement sur l'analyse par éléments finis ont été développées avec succès afin d'étudier le comportement de matériaux homogènes. De nombreux modèles sophistiqués ont été établis pour obtenir la solution optimale du comportement des matériaux en tenant compte de nombreux paramètres. Ces méthodes sont limitées lorsque l'on considère l'aspect microscopique des matériaux liés à la complexité de leur comportement et aux différentes phases de leur microstructure.

Les modèles constitutifs traditionnels ne donnent pas une solution réaliste pour cette catégorie de matériaux. Ces dernières années, la méthode d'homogénéisation est de plus en plus utilisée pour étudier le comportement de matériaux hétérogènes, ce concept étant considéré comme la meilleure solution pour établir un pont entre les échelles microscopiques et macroscopiques.

De grands progrès ont été réalisés depuis les travaux pionniers de Hill [[Hill, 1963](#)] sur le concept du VER (Volume Élémentaire Représentatif) qui contient un nombre suffisant d'hétérogénéités pour être représentatif de l'ensemble de la microstructure. Une définition plus importante est donnée plus tard par Sab [[Sab, 1992](#)] indiquant que le VER n'est représentatif que si la solution obtenue est indépendante des conditions aux limites. Récemment, de nombreux travaux ont été publiés sur l'homogénéisation numérique pour différents types de matériaux tels que les matériaux composites élastiques-plastiques du point de vue du comportement et pour étudier le renforcement de l'effet des composites sur la réponse globale, la conductivité thermique, la réponse des matériaux poreux, en termes de conductivité thermique et l'effet de la forme du vide quand un milieu poreux est considéré.

L'autre méthode d'homogénéisation est celle connue sous le nom de méthode « analytique » qui consiste à utiliser des modèles de frontière basés sur des bornes supérieures et inférieures pour établir un intervalle qui contient la solution exacte.

Parmi les différentes méthodes analytiques disponibles, on peut citer les premières théories mathématiques de l'homogénéisation qui utilisent des développements asymptotiques des propriétés mécaniques [Beran, 1968], [Bensoussan, 1978]. Il existe également de nombreuses limites largement utilisées en mécanique des solides et en science physique pour cerner les propriétés de matériaux hétérogènes. Il existe plusieurs types de limites qui sont différenciés par la précision de la description de la microstructure. Les limites inférieures et supérieures sont plus proches lorsque la connaissance de la microstructure est meilleure. Les limites les plus utilisées sont les limites supérieures de Voigt [Voigt, 1889] et inférieures de Reuss [Reuss, 1929] et celles de Hashin-Shtrikman [Hashin-Shtrikman, 1962]. Enfin, les estimations théoriques permettent, avec hypothèses, l'évaluation des propriétés effectives des matériaux hétérogènes. Ils présentent l'avantage d'approcher avec plus de précision les propriétés effectives des matériaux hétérogènes par rapport aux limites. Une estimation peut être obtenue à partir d'une approche micromécanique comme le modèle autocohérent [Berveiller, M., and Zaoui, A., 1979], ou à partir de principes variationnels [Ponte-Castaneda, P., 1989].

L'objectif principal de notre travail est la détermination des propriétés mécaniques élastiques et thermiques des matériaux poreux en utilisant l'homogénéisation, ensuite percevoir l'influence de la morphologie des pores sur ces derniers. La connaissance de la structure fine des matériaux, accessible par l'observation, et de celle des mécanismes physiques plus simples qui gouvernent le comportement de la matière à cette échelle-là, au même titre que l'on sait prévoir la réponse d'une structure dont on connaît la géométrie et le comportement des matériaux qui la constituent ? Peut-être le calcul des microstructures permettra-t-il à l'ingénieur de franchir un nouveau pas, qui lui donnera accès à de nouveaux matériaux, qui rendront possibles de nouvelles structures. . .

Cet objectif est motivé par cet espoir et prétend apporter une nouvelle pierre, certes modeste, à l'édifice micromécanique. La question traitée est celle des relations entre les constituants d'un matériau hétérogène avec ses propriétés mécaniques et physiques : comment définir cette morphologie, quelle est son influence réelle,

comment mieux la prendre en compte dans un modèle de prévision de la réponse d'un matériau dont on connaît la microstructure et comment enfin chercher à modifier cette dernière pour améliorer cette réponse et adapter le matériau à l'utilisation auquel on le destine.

Cette thèse s'articule autour de quatre chapitres. Le premier chapitre est constitué principalement de généralités et de littératures sur l'homogénéisation des milieux hétérogènes. La notion de volume élémentaire représentatif est introduite, [Kanit and al., 2003], [Gitman et al., 2007] et [Khan et al., 2011].

Le deuxième chapitre décrit l'approche de l'homogénéisation, les techniques d'homogénéisation des matériaux hétérogènes sont abordées ainsi que la théorie des méthodes analytiques et numériques.

Le troisième chapitre est consacré à la détermination des propriétés mécaniques élastiques des matériaux hétérogènes avec différentes morphologies des inclusions. Comme outil numérique, nous avons utilisé le code de calcul par éléments finis *Zebulon*. Pour contourner plusieurs configurations possibles de ces matériaux, des microstructures virtuelles ont été créées grâce à des scripts (programmes) élaborés en Matlab en se basant sur l'approche statistique numérique qui a été proposée dans l'étude de Kanit [Kanit and al., 2003]. L'étude est réalisée sur une matrice poreuse à sept formes de porosité (inclusion) différentes et pour trois fractions volumiques  $P=10\%$ ,  $P=30\%$  et  $P=50\%$ .

Le quatrième chapitre présente la construction d'un modèle analytique itératif d'homogénéisation des matériaux hétérogènes biphasés, un schéma de la procédure et un programme en Fortran ont été élaborés. Nous avons proposé une nouvelle approche basée sur les limites supérieures et inférieures de différents ordres pour approcher la solution numérique obtenue à partir de l'analyse par éléments finis afin d'obtenir les propriétés mécaniques et thermiques globales des matériaux hétérogènes de manière efficace et rapide. Nous avons varié le contraste de 23, 100 et 1000 pour les deux cas bidimensionnels et tridimensionnels, afin de pouvoir comparer les résultats provenant de l'homogénéisation numérique, les résultats ont été présentés et commentés.

Enfin, une conclusion générale vient clôturer ce travail.

# Chapitre 1

# Chapitre 1

## 1. Généralités et littérature

*Dans ce chapitre, on vise à exposer des généralités sur les matériaux hétérogènes, des questions liées à leurs échelles et la problématique liée au passage entre un comportement microstructural et macrostructural. En plus de l'intérêt d'une approche d'homogénéisation permettant de prévoir le comportement global à partir de celui des hétérogénéités, on présente aussi les deux approches, numériques et analytiques, de caractérisation d'une microstructure hétérogène. Des comparaisons entre les modèles analytiques classiques sont présentées pour différents types de matériaux hétérogènes. Les expressions analytiques de ces approches sont données dans le chapitre 2.*

### 1.1 Introduction

Le développement de nouveaux matériaux est soumis aux besoins des utilisateurs (constructeurs) qui veulent toujours des matériaux plus performants, plus économiques et qui durent plus longtemps. Les chercheurs sont le plus souvent amenés à optimiser les solutions déjà utilisées, mais dans certains cas, ils doivent complètement repenser le problème et envisager de « nouveaux matériaux ». En effet, on ne découvre plus de nouveaux matériaux, mais on crée plutôt des nouvelles associations de matériaux. Un des grands besoins des chercheurs mécaniciens est de pouvoir prévoir les propriétés des matériaux sans même les produire, à partir des propriétés des constituants élémentaires. Cette quête a conduit à la croissance récente de modèles théoriques permettant de trouver le comportement homogénéisé d'un matériau hétérogène. Leur mise au point nécessite une réflexion approfondie sur les conditions aux limites, sur l'influence de la fraction volumique des phases, de leur distribution volumique et de leur morphologie.

Nous sommes en face des phénomènes multi physiques complexes, l'outil incontournable pour la modélisation des ces phénomènes à toutes les échelles est la simulation numérique, elle intègre dans un même modèle plusieurs échelles de représentation afin de prédire l'influence du comportement des petites échelles sur le comportement de toute la structure à l'échelle macroscopique. Aujourd'hui, l'évolution de la simulation numérique a autorisé aussi le déploiement d'un grand nombre de méthodes de changement d'échelles, dites méthodes d'homogénéisation.

Deux approches d'homogénéisation sont présentées dans cette étude. Une approche numérique basée sur la méthode des éléments finis et une approche analytique basée sur les bornes et les modèles analytiques. Pour les méthodes numériques, nous présentons la méthode des éléments finis basée sur la notion du volume élémentaire représentatif (V.E.R), ce dernier doit respecter des conditions spécifiques, en contrainte ou en déformation pour les problèmes d'élasticité, ou en flux de chaleur et gradient de température pour la conductivité thermique afin de permettre une bonne représentation de la microstructure réelle. Pour l'approche analytique, parmi les méthodes disponibles dans la littérature, nous avons retenu les bornes absolues de *Voigt-Reuss*, les bornes d'ordre 2 de *Hashin-Shtrikman*, et le modèle auto-cohérent généralisé de *Christensen et Lo*. On termine par une présentation des différentes méthodes approchées d'homogénéisation qui fournissent des expressions analytiques du comportement effectif en élasticité et en thermique.

## 1.2 Généralités sur les matériaux hétérogènes

Les matériaux hétérogènes sont des matériaux qui possèdent deux (biphasée) ou plusieurs phases (multi phase), figure 1.1. L'avantage essentiel de ce type de matériaux est les propriétés structurales importantes, que leurs constituants élémentaires ne possèdent pas individuellement, pour leur permettre de remplir de nombreuses fonctions techniques. Les exemples sont nombreux : les composites fibreux ou particuliers, les matériaux poreux, les matériaux granulaires, les mousses métalliques ou céramiques, les matériaux de construction en génie civil et les matériaux vivants.

Pratiquement tous les matériaux hétérogènes sont constitués d'éléments discontinus appelés hétérogénéités, noyés dans une phase continue appelée matrice.

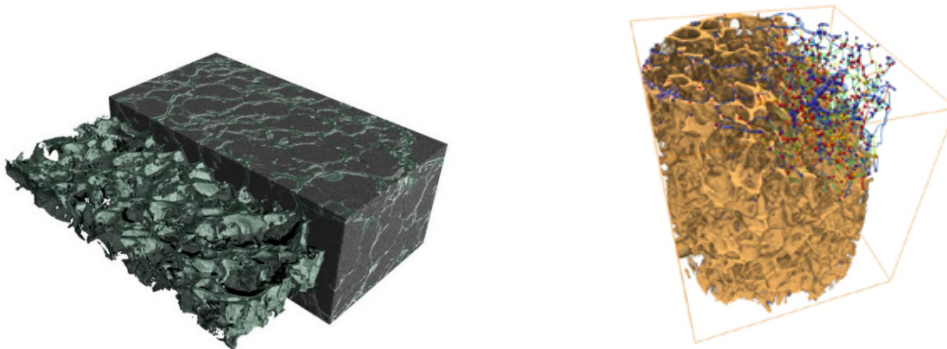


FIGURE 1.1. Exemple des matériaux hétérogènes multiphasiques obtenu par tomographie.

### 1.2.1 Matériaux composites

Ce type de matériaux consiste à associer plusieurs matériaux de propriétés différentes, dites phases. Une phase matrice, généralement continue, les autres, dites renforts, sont habituellement dures, de forme différente. La figure 1.2 schématise un exemple de composites hétérogènes biphasés avec différentes formes de renforts. Dans un composite, on distingue deux types de renforts, fibre ou sous forme particule. Ils ont le caractère d'être compatibles avec la matrice afin d'avoir un comportement global homogène. Ces matériaux composites possèdent des microstructures simples ou complexes couvrant un large spectre d'échelles de longueur, qui déterminent leurs propriétés et les performances macroscopiques [Christensen, 1979]; [Torquato, 2002].

Les composites permettent d'améliorer la qualité des matériaux pour une certaine utilisation, du fait de leur légèreté, rigidité, etc. En raison de la large utilisation de ces composites, un effort particulier est fait pour la réduction des coûts, l'augmentation de la durée de vie, la prévention de leur rupture et l'optimisation des propriétés d'usage. Aussi les requêtes grandissantes en matière de durabilité universelle, la sécurité et les énergies renouvelables ont soulevé de grands défis dans le développement de matériaux multifonctionnels qui peuvent atteindre une performance optimale dans des conditions extrêmes [Millar, 2012].

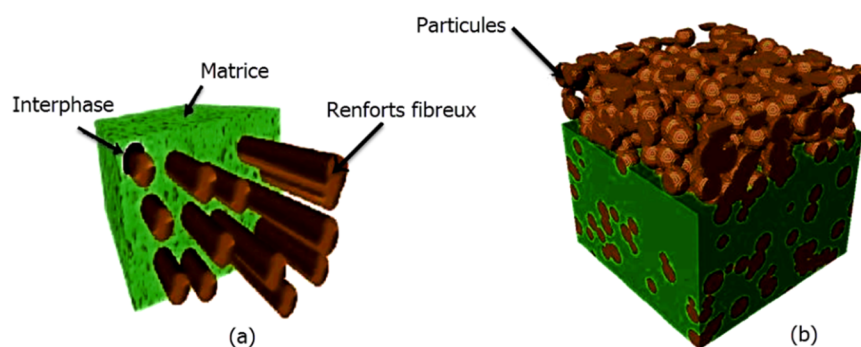


FIGURE 1.2. Composites hétérogènes de renforts : (a) fibres et (b) particules.

### 1.2.2 Matériaux poreux

Un milieu poreux est un matériau hétérogène biphasé constitué d'une phase solide et d'une phase de vide nommée "pore". À l'échelle globale, ces matériaux sont caractérisés comme un milieu continu en introduisant l'effet de la porosité. Cette porosité peut prendre différentes formes : de type sphérique, allongée, aplatie, etc. La figure I.3 montre des exemples de matériaux hétérogènes poreux à différentes échelles d'observation. La description géométrique montre qu'on peut envisager deux échelles d'espace distinctes, c'est à dire l'échelle à laquelle on distingue les domaines occupés par le solide et le fluide. Cependant, cette échelle est plus fine que l'échelle macroscopique pour les applications pratiques. Il est à noter que dans le cas d'un matériau avec une porosité très élevée (en général 70 à 95 % du volume), on a affaire à ce qu'on appelle une mousse. Ces mousses hétérogènes sont définies par [Kovacic et Simancik, 1998] comme un milieu poreux de microstructure complexe avec une fraction volumique des pores très élevée, ce qui les a rendues ultralégères. Ce genre de matériaux conserve certaines propriétés physiques de leur matériau de base.

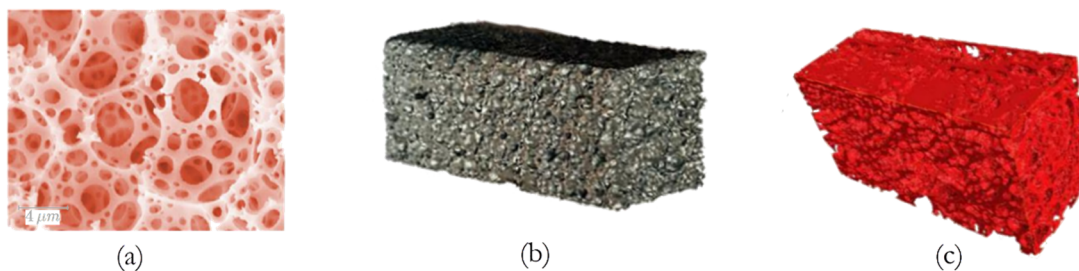


FIGURE 1.3. Matériaux hétérogènes poreux : (a) milieu poreux à l'échelle microscopique (CNRS Photothèque/ISM), (b) une mousse métallique réelle et (c) une mousse simulée.



### 1.2.3 Matériaux de génie civil

Les matériaux de génie civil, roches, bétons, etc., sont en général des matériaux hétérogènes solides. Les roches sont formées par un assemblage de minéraux (poly minérales) ou parfois d'une seule espèce (monominérales). Le béton est un composite fabriqué à partir des granulats (sables) et un liant (ciment, argile). Il faut noter que la taille des granulats influence les propriétés physiques du matériau hétérogène. La figure 1.4 montre des exemples des matériaux hétérogènes de génie civil. Lors de la caractérisation de ce genre de matériaux, plusieurs paramètres interviennent, comme la taille, la forme et la distribution des grains et le nombre de phases.



FIGURE 1.4. Matériaux de génie civil : (a) roche et (b) béton, Escoda (2012).

D'une façon générale, ces matériaux hétérogènes possèdent une structure de taille différente. C'est évident que la taille et la nature des constituants jouent un rôle important pour la détermination du comportement global. Ceci parce que les petites échelles peuvent donner lieu à des différences marquées dans la connaissance d'une réponse macroscopique. Dans ce qui suit, la description de l'échelle des constituants sera abordée. Par conséquent, pour comprendre le comportement global d'un matériau hétérogène, nous devons comprendre le comportement et l'échelle des constituants de la microstructure et les processus qui s'y déroulent.

## 1.3 Effet d'échelles dans les matériaux hétérogènes

On présente dans cette section la méthodologie et les concepts généraux de l'approche de changement d'échelle et les lois de comportement entre les différentes échelles d'une microstructure hétérogène. Une microstructure peut être décrite dans le cadre de la mécanique par trois échelles :

- Échelle dite macroscopique où le comportement est homogène;
- Échelle mésoscopique (intermédiaire) où le comportement est hétérogène;
- Échelle microscopique où le comportement est hétérogène.

Ce type de description semble être particulièrement adapté aux matériaux hétérogènes qui sont caractérisés par leur nature multiéchelle qui permet de distinguer successivement l'échelle de la structure, l'échelle du renfort ou de l'hétérogénéité et finalement l'échelle des constituants figure 1.5.

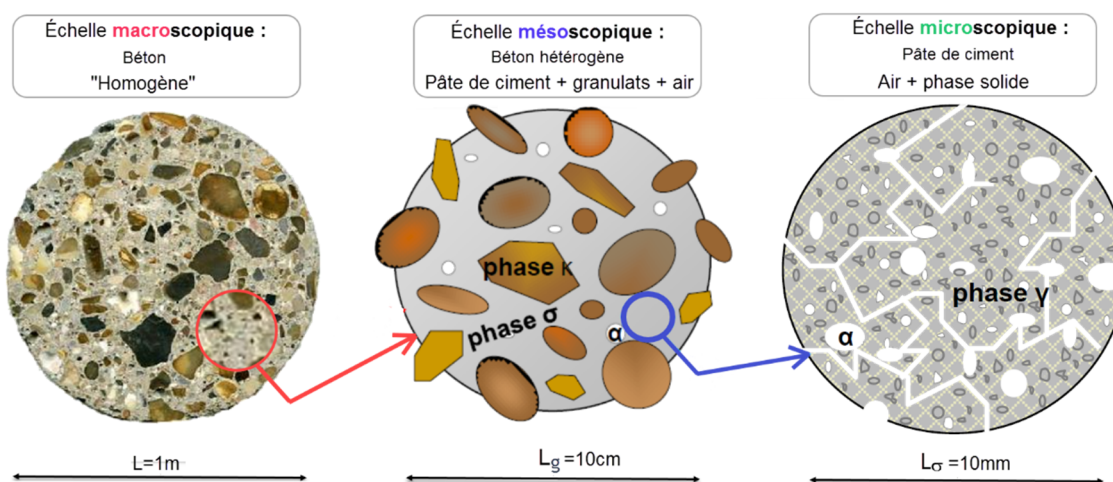


FIGURE 1.5. Echelles et tailles des constituants dans un matériau de construction, Musielak (2013).

Sur cette figure, on présente le cas d'un matériau en béton avec ses échelles de caractérisation. On présente aussi les constituants et les compositions de chaque échelle. On remarque que la composition du matériau hétérogène dépend généralement des dimensions de l'échantillon. Il faut d'abord pouvoir distinguer trois échelles de variation.

La première, dite microscopique, c'est-à-dire l'échelle locale. Cette échelle permet de suivre les particules dans leurs distributions, orientations, contacts, etc. Cette échelle doit être suffisamment faible pour ne pas gommer les éléments de la microstructure responsables des propriétés macroscopiques. Également, aussi élevée pour que les outils classiques de la mécanique des milieux continus soient utilisables. Il faut noter qu'il n'existe pas de critères universels pour fixer cette dimension.

La seconde échelle est de nature mésoscopique dont laquelle l'effet des particules sur la réponse globale reste mineur par rapport à l'échelle microscopique. À cette échelle, on trouve les microstructures dans lesquelles on parle de grain, fibre, pore ou charge.

La troisième dimension est la taille du volume à partir duquel le comportement macroscopique est calculé en tenant compte des informations mésoscopiques ou microscopiques disponibles. Cette échelle est l'échantillon dans son état naturel.

Le passage d'une échelle vers une autre plus grande nécessite l'opération d'homogénéisation. Cette opération est définie par plusieurs étapes chacune gouvernée par un ensemble d'équations. Dans ce qui suit, on présente le principe, les techniques et la méthodologie de l'homogénéisation d'un matériau hétérogène.

## 1.4 Objectif de l'homogénéisation

L'homogénéisation regroupe l'ensemble des opérations de moyenne et de détermination du comportement effectif équivalent du matériau hétérogène. Elle consiste à déterminer le comportement d'un matériau hétérogène à partir des comportements de ses différents constituants élémentaires. Cette opération est connue sous le nom du passage Micro-Macro. La figure 1.6 montre la description de l'approche d'homogénéisation, les éléments nécessaires pour le passage Micro-Macro et l'analyse multiéchelle. On note bien que la méthode d'homogénéisation consiste à substituer un matériau hétérogène par un matériau homogène, dit matériau homogène équivalent (M.H.E), qui répond globalement à un chargement quelconque de la même façon. Bien sûr, ces méthodes s'appliquent à de nombreux problèmes de la physique tels que la conduction thermique, l'élasticité linéaire, la plasticité, la viscoplasticité, l'électromagnétisme, etc.

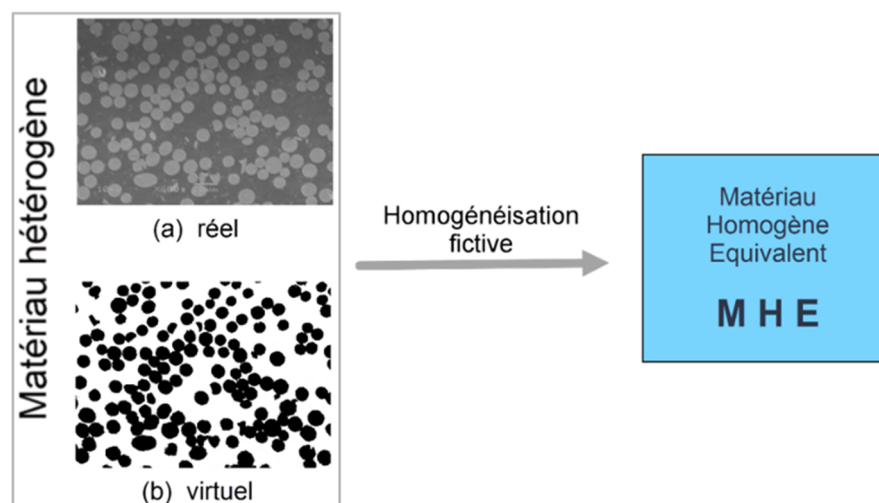


FIGURE 1.6. Principe d'homogénéisation d'une microstructure hétérogène.

## 1.5 Méthodologie de l'homogénéisation

La procédure d'homogénéisation repose sur le choix d'un plus petit volume élémentaire qui doit être représentatif du comportement macroscopique du point de vue microscopique. Ce volume est appelé volume élémentaire représentatif (VER) qui est un concept introduit par [Hill, 1963] et qui est décrit par [Chaboche et Suquet, 1998] selon les conditions d'échelles suivantes. Si  $d$  est la taille caractéristique des hétérogénéités, et  $L$  la taille caractéristique de la structure macroscopique considérée figure 1.7, 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.
- $l$  : doit représenter un comportement macroscopique homogène global malgré son hétérogénéité méso/microscopique.

Ces étapes sont définies par [Zaoui, 1999] puis [Bornert., 2001] comme suivant :

L'étape de la représentation consiste à décrire le volume du matériau hétérogène considéré. Tout d'abord, le nombre de phases entourées par un VER, la constitution interne de chaque phase, la disposition des phases, les propriétés mécaniques, le comportement mécanique associé à chaque phase et enfin la fraction volumique de chacune d'entre elles. Après la représentation et la détermination des dimensions du VER, l'autre étape pour une caractérisation globale d'un matériau hétérogène, et celle de la localisation.

La localisation consiste à décrire la réponse mécanique de cet ensemble à diverses sollicitations. Trouver les relations de passage entre l'état mécanique local et l'état mécanique macroscopique dans le VER : quels sont les champs de contraintes, de déformations, comment sont-ils déterminés et pour quelles conditions aux limite ?

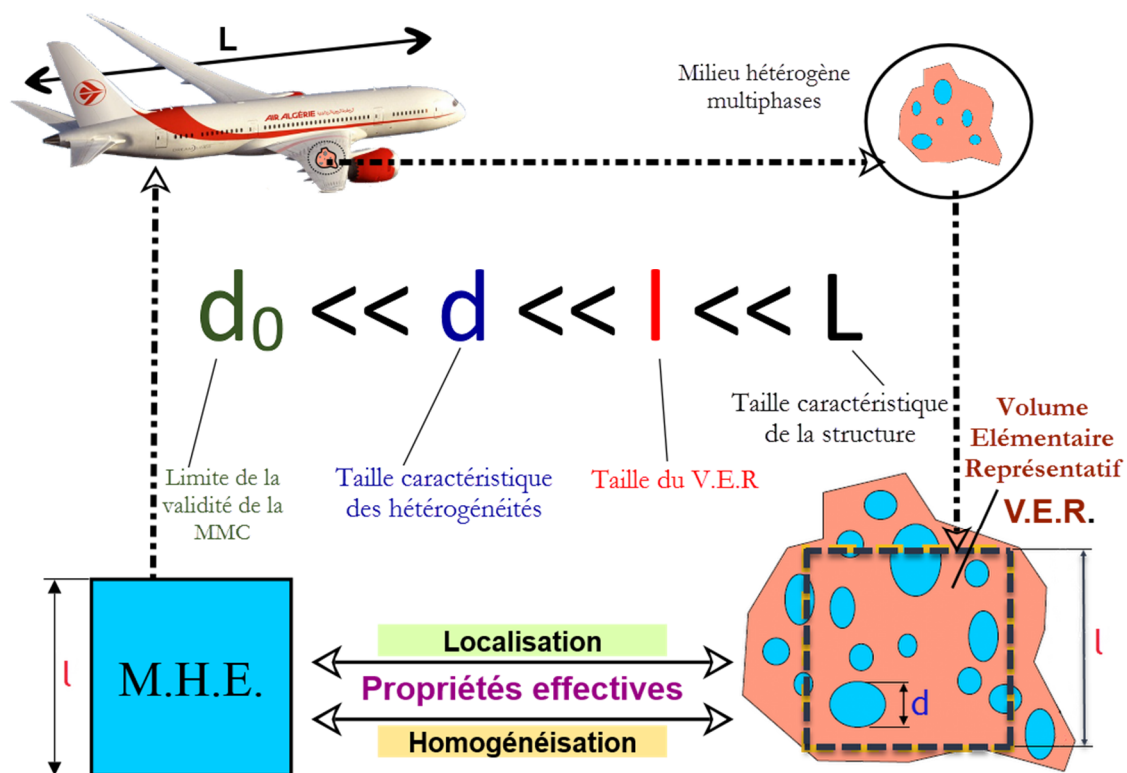


FIGURE 1.7. Conditions d'échelle sur une microstructure hétérogène :  $d \ll l \ll L$ .

Le VER joue un rôle important pour l'estimation de la réponse globale dans un matériau hétérogène. La connaissance de la taille du VER représente un élément incontournable pour la détermination des propriétés effectives. Cette taille dépend de la nature et des constituants du matériau.

## 1.6 Notion de VER dans un matériau hétérogène

Plusieurs définitions ont été proposées pour le concept VER. Ces définitions sont regroupées dans le travail de [Gitman et al., 2007]. Par exemple, la taille du VER se doit d'être beaucoup plus grande que la plus grosse des hétérogénéités et négligeable aussi devant la taille de la microstructure.

Il faut noter ici que l'utilisation des méthodes d'homogénéisation nécessite la connaissance de la taille du VER. La figure 1.8 montre des exemples de VERs dans une microstructure biphasique étudiée par [Gitman et al., 2007]. Dans la même microstructure on peut distinguer plusieurs situations, dites réalisations (R), pour représenter la taille d'un VER. La différence entre ces réalisations est le nombre des hétérogénéités entouré par le volume, sa forme, leur disposition et finalement la distribution et la nature.

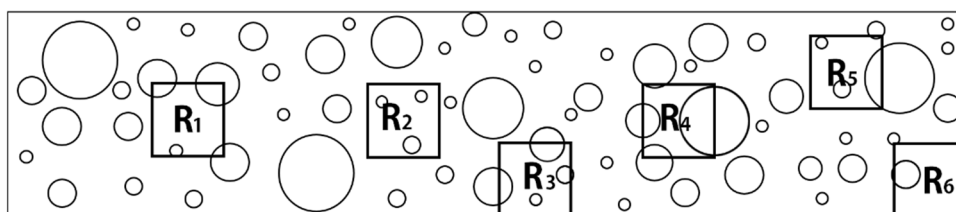


FIGURE 1.8. Exemple de VERs d'une microstructure hétérogène, Gitman, (2007).

Cependant, afin de répondre à des questions sur l'existence et la définition d'un VER, on présente sur le tableau 1.1 quelques définitions proposées dans la littérature :

Références	Définitions
Hashin Z, (1983)	<i>Le VER doit être suffisamment grand pour contenir suffisamment d'informations sur la microstructure afin d'être représentatif, mais il doit être beaucoup plus petit que le corps macroscopique.</i>
Sab, (1992)	<i>C'est un volume suffisamment grand pour que la détermination des propriétés effectives à partir de ce volume ne dépend pas du type de conditions aux limites utilisées.</i>
Drugan et Willis, (1996)	<i>C'est le plus petit élément de volume de matériau du composite pour lequel la représentation constitutive macroscopique du module global spatial est un modèle suffisamment précis pour représenter la réponse constitutive moyenne.</i>
Van Mier, (1997)	<i>C'est le volume minimal de l'échantillon à l'échelle du laboratoire, de sorte que les résultats obtenus avec cet échantillon puissent encore être considérés comme représentatifs d'un ensemble d'éléments homogènes.</i>
Terada et Kikuchi, (1998)	<i>C'est un volume cubique suffisamment grand par rapport à la microstructure et suffisamment petit par rapport à l'échelle macroscopique.</i>
Evesque, (2000)	<i>Le VER doit être assez grand par rapport à la taille des grains afin de définir les quantités globales telles que la contrainte ou la déformation, mais cette dimension devrait être également assez petite pour ne pas cacher l'hétérogénéité macroscopique</i>
Kanit et al., (2003)	<i>Une définition purement statistique et numérique. La taille est liée aux paramètres morphologiques, mécaniques et statistiques de la microstructure ; comme la fraction volumique, le contraste, les propriétés mécaniques (élasticités et plasticités) et l'erreur absolue.</i>

Tableau 1.1. Définitions de VER proposées par les scientifiques.

Les méthodes d'homogénéisation numérique ne peuvent s'en passer de l'étape de la définition du VER. Celui-ci est défini comme le prototype contenant le minimum d'hétérogénéités, pour obtenir les propriétés effectives du matériau contenant un plus grand nombre d'hétérogénéités.

Dans le cas de l'homogénéisation élastique linéaire, [Terada et al., 2000] se sont basés sur les travaux de [Hill, 1963] qui a alors justifié que « la relation entre la déformation moyenne et la contrainte est la même pour les deux types de conditions aux limites » lorsque la taille de l'hétérogénéité  $\delta$  est suffisamment grande. Statistiquement, on s'attend à ce qu'il y ait une certaine valeur  $\delta_0$  où les propriétés effectives obtenues à partir de ces deux conditions aux limites sont presque réciproques. Afin d'introduire a priori l'homogénéité statistique dans les milieux, on fait souvent l'hypothèse de la périodicité locale de la géométrie microstructurale. Ensuite, l'élément volumique est choisi de manière à contenir une seule inclusion dans une phase matricielle et est donc appelé cellule unitaire de taille  $\varepsilon$  avec le moins d'hétérogénéités (figure 1.9).

La simplification découlant de cette hypothèse réduit grandement l'effort de modélisation numérique et le temps de calcul car la cellule unitaire a été choisie comme une cellule cubique contenant des informations morphologiques minimales. Néanmoins, même si le milieu est périodique, les approches standard en mécanique des matériaux pourraient prédire les mêmes propriétés élastiques globales en prenant une taille du VER suffisamment grande.

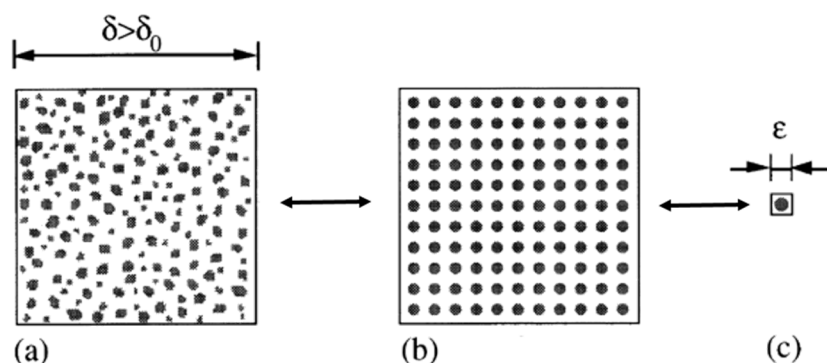


FIGURE 1.9. Modélisation de l'élément de volume représentatif. Terada, (2000).

La technique de modélisation DIB est la plus appropriée pour construire le modèle de cellule unitaire FE car elle permet la modélisation systématique des hétérogénéités.

En fait, le programme informatique développé dans [Terada et al.,1997] facilite la construction du modèle de la même fraction volumique pour le VER de la figure 1.10.

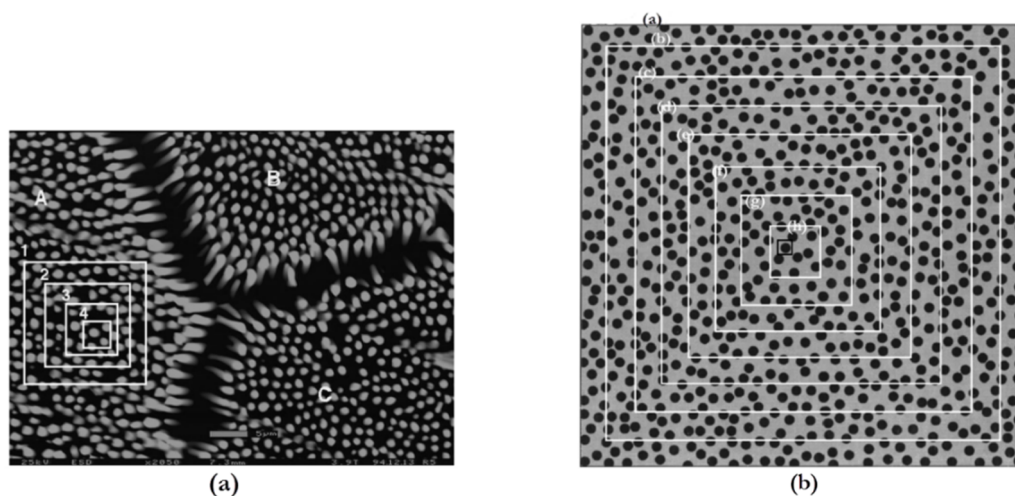


FIGURE 1.10. V.E.R.s, (a) Image échantillonnée avec plusieurs zones à sélectionner - modèle numérisé (32-32 pixels). (b) Image de la microstructure avec sélection de la région cellulaire unitaire: (a) 1024x1024; (b) 896x896; (c) 768x 768; (d) 640x 640; (e) 512x 512; (f) 384x 384; (g) 256x 256; (h) 128x 128 (pixels). Terada, (2000).

La figure 1.11 montre la tendance de convergence de deux normes. Ici, la longueur caractéristique sur la figure indique l'échelle de longueur normalisée par celle du modèle de 32 x 32 pixels (générés par le procédé de traitement d'image à partir de la structure réelle). On peut voir sur la figure que les deux normes de matrices d'élasticité homogénéisées obtenues en utilisant des conditions aux limites périodiques sont limitées par celles des deux autres conditions aux limites. Ce résultat concorde avec ceux obtenus en utilisant des microstructures réellement périodiques. De plus, toutes les valeurs deviennent proches les unes des autres à mesure que la taille du VER augmente quelles que soient les conditions aux limites.

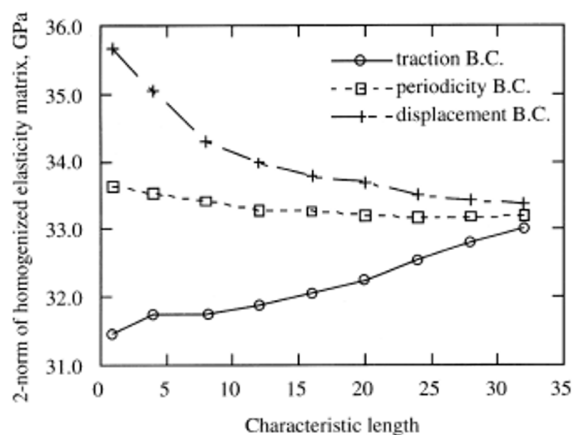


FIGURE 1.11. Convergence associée à l'orthotropie et à l'isotropie pour une matrice d'élasticité homogénéisée. Terada, (2000).



La définition du VER est donnée par [Kanit et al., 2003] suite à une étude statistique qui a permis d'obtenir les propriétés effectives en effectuant un nombre suffisant d'analyses avec des prototypes différents à chaque réalisation.

Il convient de rappeler que les résultats présentés par [Kanit et al., 2003] sont compatibles dans le cas des bornes de Hashin-Strikman [Hashin et Shtrikman, 1963] et les estimations autocohérentes de Christensen-Lo [Christensen et Lo, 1979] pour la détermination du VER dans de nombreuses tailles d'échantillons.

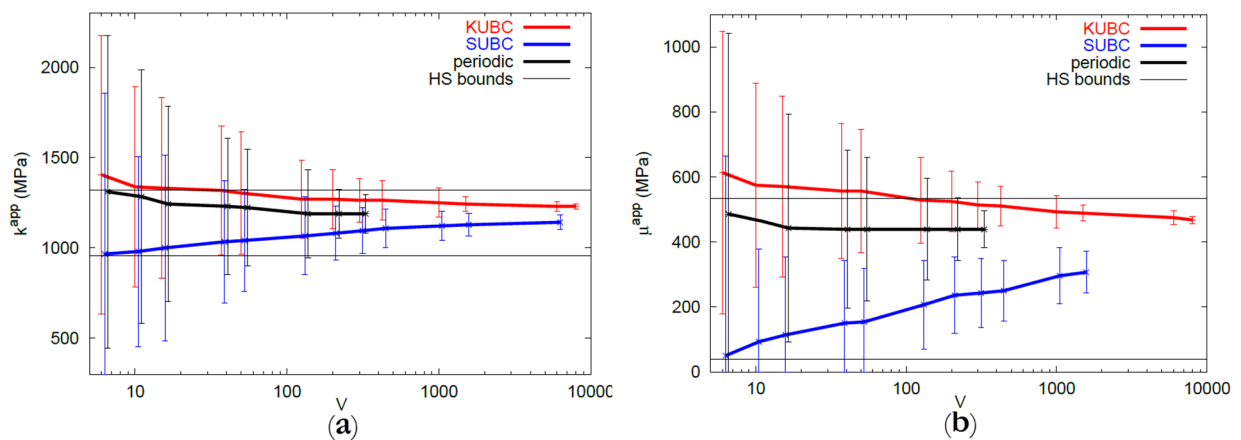


FIGURE 1.12. Détermination du VER, (a) Valeurs moyennes et intervalles de confiance sur la valeur moyenne du module d'élasticité. (b) Module de cisaillement, en fonction de la taille du domaine. Kanit, (2003).

Pour évaluer les propriétés effectives des composites renforcés par des particules sphériques élastiques dans une matrice élastique pour différentes fractions volumiques jusqu'à 60%, [Kari et al., 2007] ont utilisé la notion du VER pour obtenir les propriétés effectives en s'appuyant sur l'algorithme d'addition séquentielle aléatoire RSA [Wang, 1998] pour générer des prototypes de tailles différentes qui représentaient la microstructure figure 1.13. Ils ont effectué 5 réalisations pour 5 tailles différentes de modèles pour déterminer le module d'Young effectif d'un composite avec une fraction volumique de renforts de 30%. Les résultats de cette analyse sont présentés sur la figure 1.14 où on note que les propriétés effectives ne varient plus significativement lorsque la taille du VER est augmentée au-delà de la troisième taille.

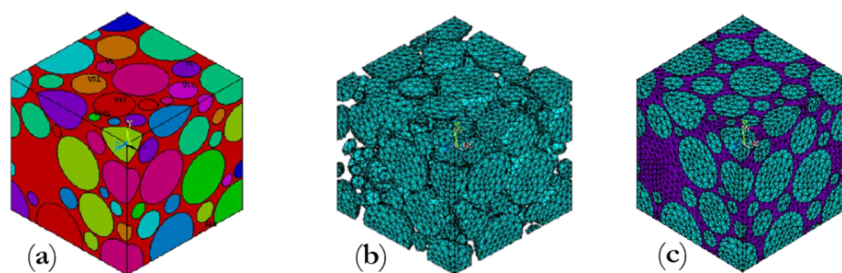


FIGURE 1.13. Modèles VER de composites renforcés de particules sphériques réparties aléatoirement pour une fraction volumique de 60% avec différentes tailles de particules sphériques. (a) Géométrie, (b) seulement des particules maillées et (c) VER complet maillé, Kari, (2007).

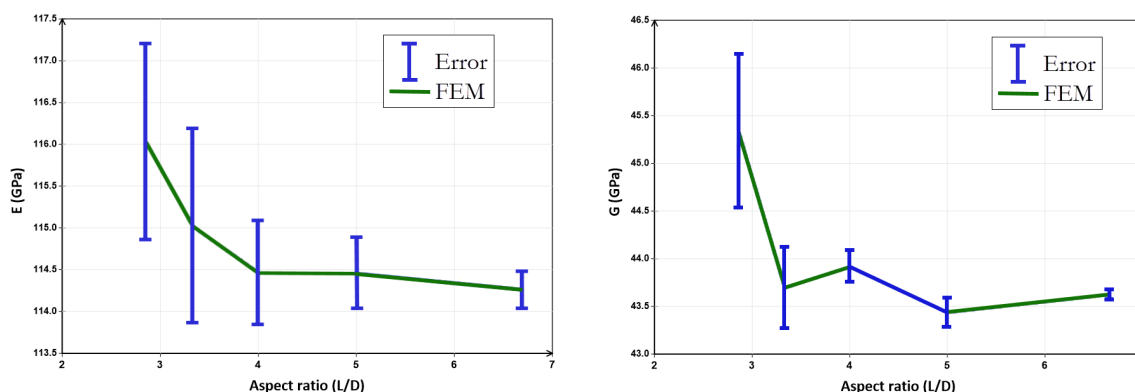


FIGURE 1.14. Variation des propriétés effectives moyennes et de l'erreur en fonction de la taille du VER. Kari, (2007).

Une définition étendue du VER pour composite hétérogène est introduite par [Khan et al., 2011], le nombre d'hétérogénéités dans un volume fixe qui donne la même réponse effective considérée pour le composite étudié lorsqu'il est soumis à des conditions de chargement et conditions aux limites similaires. Pour chaque fraction volumique de particules, les modèles EF de composites hétérogènes avec différentes tailles et arrangements de particules sont générés de sorte que ces modèles représentent des éléments de volume réalistes "découpés" à partir d'un composite particulaire.

La taille du VER est mesurée en termes d'inhomogénéités qu'elle contient, l'une des techniques utilisées pour obtenir sa taille est d'utiliser une homogénéisation numérique basée sur la MEF. Puisque les particules sont distribuées selon une distribution statistique, chaque maille ou réalisation sera différente. Par conséquent, chaque réalisation devrait conduire à des propriétés effectives différentes (avec une certaine exactitude).

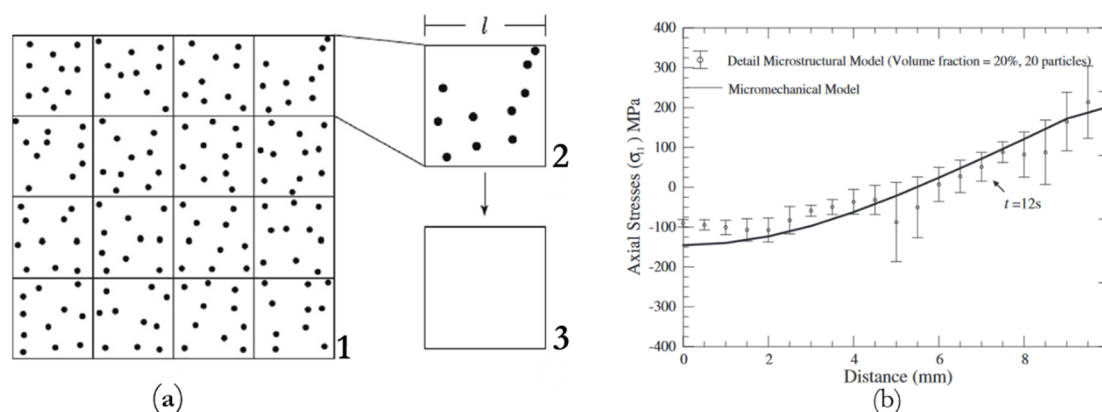


FIGURE 1.15. (a) Homogénéisation des sous-régions d'un composant du composite hétérogène. (b) Valeur moyenne de la contrainte du modèle EF avec 20 particules mesurés aux extrémités supérieures et inférieures (coins) des cubes. Khan, (2011).

Le calcul d'un intervalle de confiance sur ces données pourrait donner une estimation des propriétés effectives du composite et de sa précision pour un nombre donné de renforcements. La précision relative (par exemple le module de Young est estimé à  $x \pm y\%$ ) peut être ajustée en faisant varier le nombre de réalisations figure 1.15. Si beaucoup de réalisations sont effectuées, l'intervalle de confiance peut être ajusté à la largeur désirée. [Kanit et al., 2003] mentionnent que pour les microstructures contenant de nombreux renforcements, un plus petit nombre de réalisations est nécessaire pour estimer la propriété globale recherchée dans la précision souhaitée. Le nombre de particules après lequel la réponse effective ne change plus est appelé élément de volume représentatif.

Expérimentalement, de nombreuses tentatives ont été réalisées afin de déterminer la taille du VER [Romero et Masad, 2001], sur un échantillon d'un matériau hétérogène (béton bitumineux) et à l'aide d'une approche d'analyse d'image (technique de tomographie à rayons X) et une vérification par des tests mécaniques (le *Superpave Shear Tester*). Les échantillons de laboratoire avaient des dimensions à la fois plus petites et plus grandes que la taille représentative théorique. L'analyse statistique indique que la variabilité des résultats est une fonction du mécanisme de chargement utilisé dans le *Superpave Shear Tester*. En général, la taille représentative requise augmente considérablement lorsque la taille nominale des hétérogénéités est supérieure à 25mm.

Dans l'analyse expérimentale de [Al-Raoush et Papadopoulos, 2010], dans les milieux hétérogènes complexes (par exemple, des sols), la porosité est couramment utilisée pour définir le VER d'un échantillon donné. La tomographie par rayons X a été utilisée pour obtenir des images 3D (c'est-à-dire des volumes) de systèmes de sable naturel (milieux hétérogènes complexes) avec différentes distributions de tailles de particules. Des volumes 3D de quatre systèmes différents ont été obtenus figure 1.16 et une analyse VER a été effectuée pour ces paramètres en utilisant des algorithmes 3D robustes. Les résultats ont révélé que le VER minimal pour la porosité peut ne pas être suffisant pour être considéré comme un VER pour les paramètres tels que la distribution granulométrique, le taux de vide local et le nombre de coordination. L'hétérogénéité des systèmes a été jugée facteur important pour déterminer le VER.

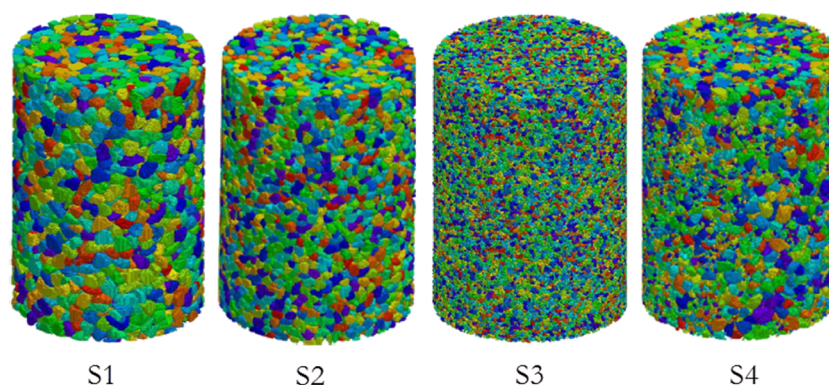


FIGURE 1.16. Images 3D des systèmes de sable utilisés (S1, S2, S3 et S4) pour l'analyse du VER. Les diamètres et les hauteurs des images sont variables entre 23 à 31mm.  
Al-Raoush et Papadopoulos, (2010).

Enfin, le VER est un paramètre qui est d'une importance fondamentale pour l'étude numérique des matériaux hétérogènes. Il est de nature élémentaire parce qu'il est considéré comme un point matériel du milieu équivalent et représentatif parce qu'il est possible de déterminer un seul comportement macroscopique unique pour ce volume. Pour être représentatif, ce VER doit contenir le maximum des hétérogénéités, et pour être élémentaire, le volume doit être petit devant la structure.

## 1.7 Méthodes d'homogénéisation analytique et numérique

Une présentation générale des différentes approches et méthodes d'homogénéisation sera exposée dans ce qui suit. On choisit de classer ces méthodes en deux grandes familles, les méthodes d'homogénéisation analytiques et les méthodes d'homogénéisation numériques.

### 1.7.1 Homogénéisation analytique

Les méthodes analytiques sont disponibles pour évaluer les propriétés des matériaux hétérogènes. Ils contiennent généralement des hypothèses concernant la microstructure. En mécanique, les expansions asymptotiques [Sanchez et Palencia, 1974], [Bensoussan et al., 1978] et les limites variationnelles [Hashin et Shtrikman, 1962], [Beran, 1968] sont des exemples d'approches analytiques. Pour un matériau élastique hétérogène, l'homogénéisation consiste à résoudre le problème micromécanique de localisation. Formellement, cela signifie résoudre une équation intégrale implicite de type Lippmann-Schwinger. Cela peut être fait numériquement ou analytiquement en utilisant certaines hypothèses. C'est ainsi que les estimations et les limites ont été développées, elles permettent, sous certaines hypothèses spécifiques, d'évaluer les propriétés effectives d'un matériau hétérogène. Aussi, elles présentent l'avantage d'approcher avec plus de précision le comportement du matériau hétérogène contrairement aux bornes qui fournissent un encadrement.

On peut écrire une estimation à partir d'une approche micromécanique comme dans la littérature, telle que la solution diluée présentée dans [Aboudi, 1991], le modèle auto-cohérent de [Mori et Tanaka, 1973] (MT), [Berveiller et Zaoui, 1979] et le modèle auto-cohérent généralisé de [Christensen et Lo 1979] (GSC) ou à partir de principes variationnels [Ponte Castaneda, 1989]. On rappelle que dans le cas d'un matériau hétérogène avec  $n$  phases, l'expression des approches est donnée dans [Tucker et Liang, 1999], [Zaoui, 1999] et [Bornert et al. 2001].

Dans l'homogénéisation analytique, on se retrouve avec deux groupes d'approches, les bornes et les modèles. Les estimations proposées dans la littérature sont données pour divers matériaux hétérogènes et pour des formes d'inclusions bien spécifiques, et peuvent donc être notées comme des estimations asymptotiques. L'intérêt est donc d'utiliser des solutions analytiques tant que la géométrie reste simple. Pour les fractions volumiques assez importantes, on observe souvent une divergence entre les modèles analytiques. Cette divergence serait liée à l'augmentation des interactions entre les inclusions à cause de la diminution de leurs espacements. Ils ne sont donc pas adaptés au cas des configurations plus complexes avec des fractions volumiques plus élevées. De ce point de vue, les approches numériques basées sur la notion du VER constituent une alternative du fait de l'important développement des outils de calculs.

Nous présentons les expressions de quelques bornes et modèles utilisés pour la modélisation analytique. On se limite au cas d'un matériau hétérogène biphasé renforcé par des inclusions de comportement linéaire discontinu et de fraction volumique  $p$ , dispersées dans une matrice homogène linéaire et continue de module de compression  $k_m$ , de module de cisaillement  $\mu_m$ , de coefficient de poisson  $\nu_m$  et d'un module de Young  $E_m$  renforcé par une distribution aléatoire des inclusions de modules  $k_i$ ,  $\mu_i$ ,  $\nu_i$  et  $E_i$ . Nous donnons les expressions des bornes de différents ordres, les bornes d'ordre 0, les bornes d'ordre 1 de [Voigt, 1889] et [Reuss, 1929], les bornes d'ordre 2 de [Hashin et Shtrikman, 1963] (HS).

Nous regroupons dans les tableaux 1.2 et 1.3 les expressions de quelques approches analytiques utilisées pour l'estimation du module de compression  $k$  et du module de cisaillement  $\mu$ . La description générale de chaque approche et les démonstrations mathématiques de chaque approche, mécanique ou thermique, ainsi que les constantes ( $A$ ,  $B$ ,  $C$ ,  $\alpha$  et  $\beta$ ) sont présentées dans le livre intitulé « *Micromechanics of heterogeneous materials* », par [Buryachenko, 2006].

		Nom des Modèles	Expression mathématique
<b>Bornes</b>	Ordre 0		$\min(k_i, k_m) < k < \max(k_i, k_m)$
	Ordre 1	Voigt-Reuss (VR)	$k^{Voigt} = pk_i + (1-p)k_m$ $k^{Reuss} = \frac{k_i k_m}{(1-p)k_i + pk_m}$
	Ordre 2	Hashin-Strikman (HS)	$k^{HS^-} = k_m + \frac{p}{1 / (k_i - k_m) + 3(1-p) / (3k_m + 4\mu_m)}$ $k^{HS^+} = k_i + \frac{1-p}{1 / (k_m - k_i) + 3p / (3k_m + 4\mu_i)}$
<b>Modèles</b>	Mori-Tanaka (MT)		$k^{MT} = k_m \left(1 + \frac{p(k_i - k_m)}{k_m + \alpha(1-p)(k_i - k_m)}\right)$
	Dilué		$k^{SD} = k_m \left(1 + \frac{p(k_i - k_m)}{k_m + \alpha(k_i - k_m)}\right)$
	Auto cohérent généralisé (GSC)		$k^{GSC} = k_m + \frac{p(k_i - k_m)}{1 + (1-p) \frac{k_i - k_m}{k_m + \frac{3}{4}\mu_m}}$

Tableau 1.2. Expressions mathématiques des approches d'homogénéisation analytique pour le module de compression  $k$ .

		Nom des Modèles	Expression mathématique
<b>Bornes</b>	Ordre 0		$\min(\mu_i, \mu_m) < \mu < \max(\mu_i, \mu_m)$
	Ordre 1	Voigt-Reuss (VR)	$\mu^{Voigt} = p\mu_i + (1-p)\mu_m$ $\mu^{Reuss} = \frac{\mu_i \mu_m}{(1-p)\mu_i + p\mu_m}$
	Ordre 2	Hashin-Strikman (HS)	$\mu^{HS^-} = \mu_m + \frac{p}{1 / (\mu_i - \mu_m) + 6(1-p)(k_m + 2\mu_m) / 5\mu_m(3k_m + 4\mu_m)}$ $\mu^{HS^+} = \mu_i + \frac{1-p}{1 / (\mu_m - \mu_i) + 6p(k_i + 2\mu_i) / 5\mu_i(3k_i + 4\mu_i)}$
<b>Modèles</b>	Mori-Tanaka (MT)		$\mu^{MT} = \mu_m \left(1 + \frac{p(\mu_i - \mu_m)}{\mu_m + \beta(1-p)(\mu_i - \mu_m)}\right)$
	Dilué		$\mu^{SD} = \mu_m \left(1 + \frac{p(\mu_i - \mu_m)}{\mu_m + \beta(\mu_i - \mu_m)}\right)$
	Auto cohérent généralisé (GSC)		$A\left(\frac{\mu}{\mu_m}\right)^2 + B\left(\frac{\mu}{\mu_m}\right) + C = 0$

Tableau 1.3. Expressions mathématiques des approches d'homogénéisation analytique pour le module de cisaillement  $\mu$ .

Dans le travail de [Dirrenberger, 2012], des comparaisons des résultats issus des différentes méthodes d'homogénéisation sont présentées dans le cas de matériaux hétérogènes constitués de deux phases. La figure 1.17 donne un exemple de variation du module de compression  $k$ , en fonction de la fraction volumique des inclusions. L'ensemble des calculs obtenus par les différentes approches analytiques a été déterminé pour des contrastes  $c = 100$  et  $c = 4$ . La figure 1.18 donne un exemple de variation de la conductivité thermique  $\lambda$ , en fonction de la fraction volumique des inclusions, aussi pour des contrastes  $c = 100$  et  $c = 4$ . A partir des résultats, on remarque que les bornes d'ordre 0 et 1 n'estiment pas les propriétés mais encadrent les modules élastiques et la conductivité thermique. En effet, ces bornes fournissent une valeur maximale et une autre minimale des propriétés effectives. Il faut noter aussi que, les bornes inférieure et supérieure sont d'autant plus resserrées que la connaissance de la microstructure est fine.

Une vaste littérature existe sur le sujet de l'homogénéisation analytique, pour une revue complète, les lecteurs devraient consulter ces références: [Besson et al., 2001], [Bornert et al., 2001], [Jeulin et Ostoja-Starzewski, 2001], [Torquato, 2002], [Milton, 2002]. Milton a proposé des bornes de quatrième ordre pour les propriétés élastiques basées sur des fonctions de corrélation à quatre points dans [Milton et Phan-Thien, 1982]. Dans ce qui suit, nous n'utiliserons pas de bornes d'ordre supérieures à 2.

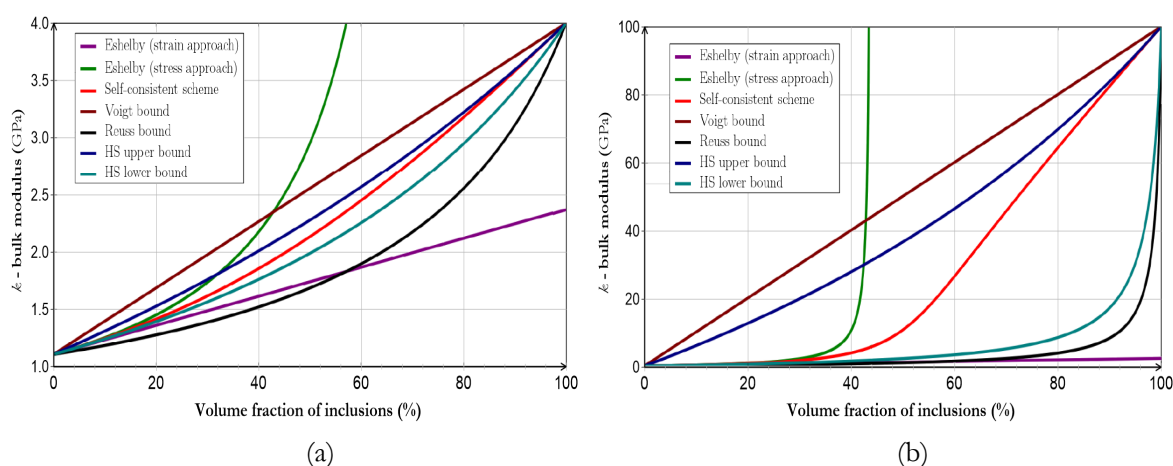


FIGURE 1.17. Module de compressibilité  $k$  en fonction de la fraction volumique (a) contraste  $c=4$ , (b) contraste  $c=100$ . Dirrenberger, (2012).



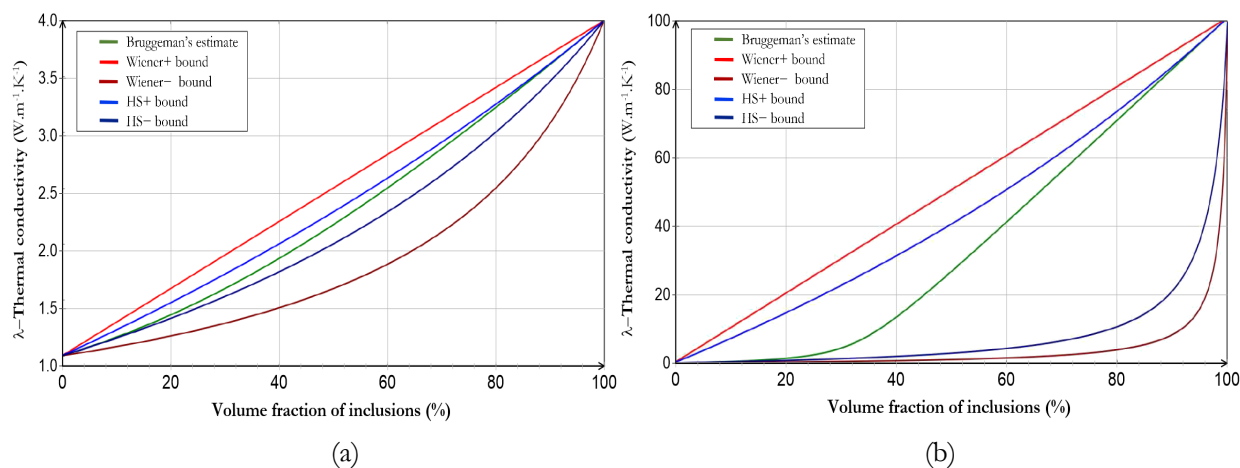


FIGURE 1.18. Conductivité thermique  $\lambda$  en fonction de la fraction volumique (a) contraste  $c=4$ , (b) contraste  $c=100$ . Dirrenberger, (2012).

Le travail de [Tucker et Liang, 1999] donne une description générale des modèles analytiques utilisés pour le comportement linéaire d'un matériau hétérogène, comme par exemple les bornes de Voigt-Reuss (VR), les bornes de Hashin-Shtrikman (HS) et les modèles auto cohérents, Eshelby, MT, GSC, etc. Nous rappelons que le choix d'un modèle est gouverné par plusieurs conditions comme par exemple la géométrie du milieu, le contraste entre les propriétés, la fraction volumique, la distribution et l'orientation des inclusions et le comportement de chaque phase comme l'expliquent [Gilormini et Bréchet, 1998] dans leur travail "*Which material for which model ? Which model for which material ?*",

## 1.7.2 Homogénéisation numérique

Les progrès incessants des ordinateurs en terme de puissance de calcul permettent de réaliser des modélisations numériques des structures de plus en plus complexes. La mécanique des matériaux hétérogènes (La modélisation du comportement des matériaux) profite également de ces progrès, ce qui favorise l'utilisation de la simulation numérique. Nous présentons la méthodologie et le principe de l'homogénéisation numérique basée sur la notion du VER sur la figure 1.19. Après la sélection et le choix du VER, on définit la géométrie globale du matériau ensuite le maillage de la structure et enfin la simulation du comportement.

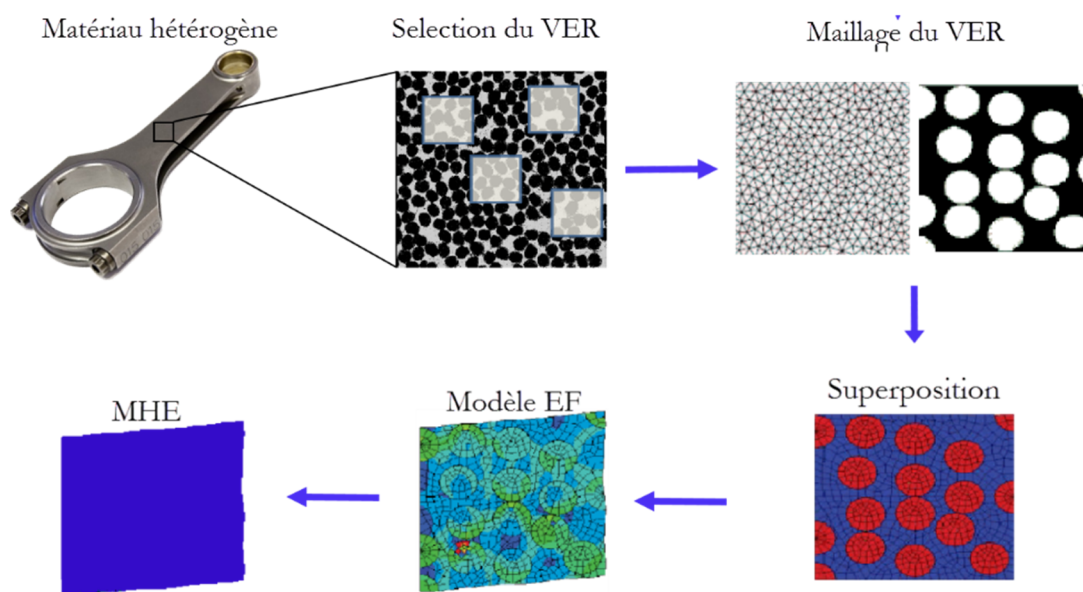


FIGURE 1.19. Méthodologie de l'utilisation de l'approche numérique.

### 1.7.2.1 Approches numériques basées sur les microstructures virtuelles

Ces approches consistent à modéliser explicitement les microstructures des matériaux par des outils numériques [Forest, 2006]. Les algorithmes de génération de ces microstructures permettant de faciliter l'étude du comportement de ces derniers, de représenter les différents phénomènes physiques au sein du matériau et d'établir des liens entre la microstructure et les propriétés des matériaux. La réalisation des microstructures est basée sur la connaissance de la morphologie de leurs constituants qui sont en général de différentes formes (simples et complexes). Pour l'obtention de ces formes, il existe plusieurs techniques : la reconstitution à partir d'un tomographe, la méthode de génération dite d'addition séquentielle aléatoire (*RSA*) et la dynamique moléculaire.

La combine la plus utilisée pour générer des microstructures en 2D ou 3D est le recours aux outils numériques et aux logiciels, du fait que les méthodes par micro tomographie sont relativement lourdes et coûteuses. Les logiciels les plus connus sont *Digmat*, *Abaqus* et les scripts avec des langages comme *Matlab*, *C+* et *Java*.

Les travaux de [Segurado et Llorca, 2002], [Minshnaevsky Jr, 2004], [Kari et al., 2007], pour l'étude du comportement mécanique des milieux hétérogènes par les approches numériques sont basées sur la notion du VER. Ces travaux se sont intéressés plus particulièrement au comportement élastique des matériaux renforcés par des particules sphériques dures ou sous forme de vide (pores). Ils mettent en évidence le fait que la taille du VER et de la fraction volumique ont une influence remarquable sur les propriétés effectives comparées aux autres paramètres de la microstructure. L'étude se fait sur des volumes du matériau finis contenant une vingtaine des particules sphériques figure 1.20.

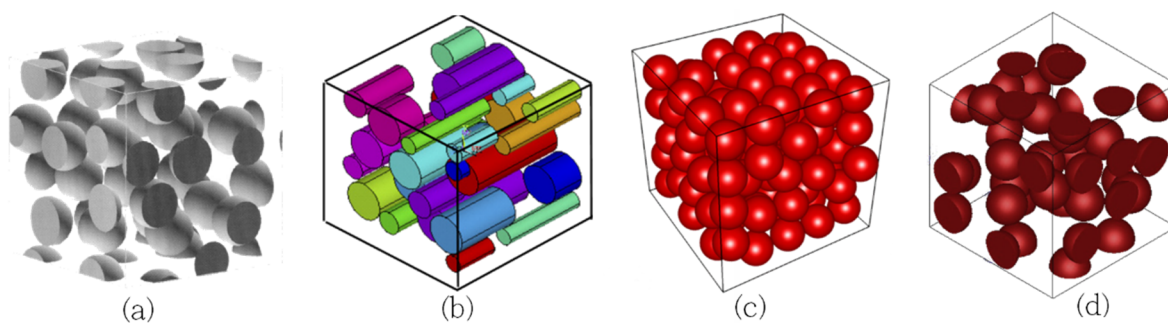


FIGURE 1.20. Microstructures virtuelles utilisées pour la simulation : (a) González, (2004), (b) Kari, (2007b), (c) Tawerghi, (2009) et (d) Guo, (2014),

L'effet de la nature des particules sur le comportement élastique des matériaux hétérogènes a été identifié par [Segurado et Llorca, 2002]. Deux types de particules sphériques ont été considérés : particules rigides et d'autres sous forme des pores.

La variation des modules élastiques en fonction de la proportion des particules a été étudiée. La figure 1.21 présente des résultats obtenus par la simulation, on remarque que dans le cas des sphères rigides, les propriétés élastiques augmentent avec l'augmentation de la fraction volumique. A l'inverse des pores où le comportement macroscopique diminue en fonction de la proportion.

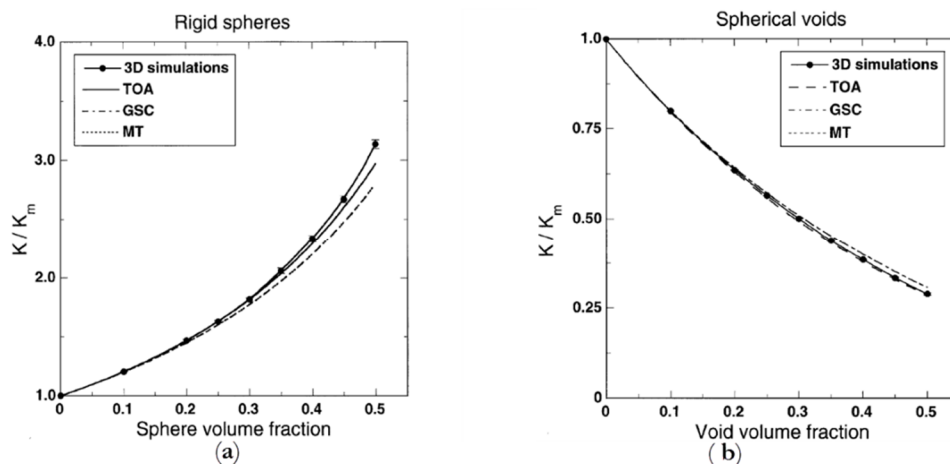


FIGURE 1.21. Variation des propriétés effectives d'une distribution aléatoire de sphères noyées dans une matrice élastique en fonction de la fraction volumique. (a) sphères rigides, (b) sphères vides (poreuses). Segurado et Llorca (2002).

Dans d'autres recherches, l'influence de la distribution des inclusions sur les propriétés effectives a été envisagée par [Han et al., 2001] puis [Segurado et Llorca, 2003] en utilisant les approches numériques. La distribution des particules est purement aléatoire, aucun contact entre les sphères voisines n'est considéré. Les simulations numériques ont montré que l'influence de la distribution des inclusions sur le comportement macroscopique est faible. De même dans [Segurado et Llorca, 2006], la distribution spatiale des particules sur le comportement élastoplastique du matériau a une influence négligeable.

On peut, cependant, noter que les approches numériques basées sur la méthode des éléments finis ont été utilisées pour d'autres types de microstructures virtuelles, comme le cas des mosaïques de Voronoi étudié par [Kanit et al., 2003], et l'étude de la plasticité macroscopique des polycristaux par [Barbe et al., 2001a] et [Barbe et al., 2001b] et une tessellation de Voronoi de 3000 grains [Quey et al., 2011], figure 1.22.

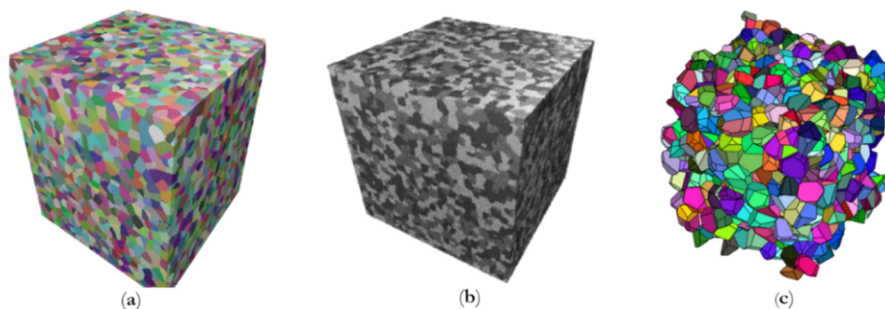


FIGURE 1.22. Microstructures de morphologie complexe pour l'approche numérique, (a) Kanit et al. (2003). (b) Simulation à deux échelles de polycristaux multiphasés Barbe et al. (2001a). (c) Une tessellation de Voronoi de 3000 grains Quey et al. (2011).

### 1.7.2.2 Approches numériques basées sur les microstructures réelles

Les observations microscopiques (optiques ou électroniques à balayage) fournissent généralement des vues bidimensionnelles de la distribution des hétérogénéités au sein de la microstructure, qui peuvent parfois être suffisantes pour prédire son influence sur le comportement mécanique résultant. Dans le cas général toutefois, des informations tridimensionnelles sont nécessaires pour obtenir une représentation réaliste de la microstructure.

Le volume du matériau étudié contient un grand nombre d'hétérogénéités cachées au cœur du volume. L'observation de la morphologie des phases et de leur distribution dans l'espace est une difficulté majeure qui souvent reste sans solution ou exige des efforts considérables. Le polissage successif d'un volume de polycristal est possible mais c'est une méthode destructive.

Cependant, des techniques spécifiques d'imagerie tridimensionnelle sont d'ores-et-déjà disponibles. Si les phases ont des densités très différentes, *la tomographie aux rayons X* peut être utilisée. C'est le cas par exemple des mousses métalliques, matériaux qui ont suscité un intérêt scientifique et industriel considérable dans les dix dernières années, pour des applications dans le domaine de l'absorption d'énergie, [Badiche et Forest, 2000]. Un échantillon de mousse d'aluminium est présenté sur la figure 1.23 avec une section reconstruite d'après la tomographie 3D. La forte hétérogénéité de répartition des tailles de cellules est clairement visible.

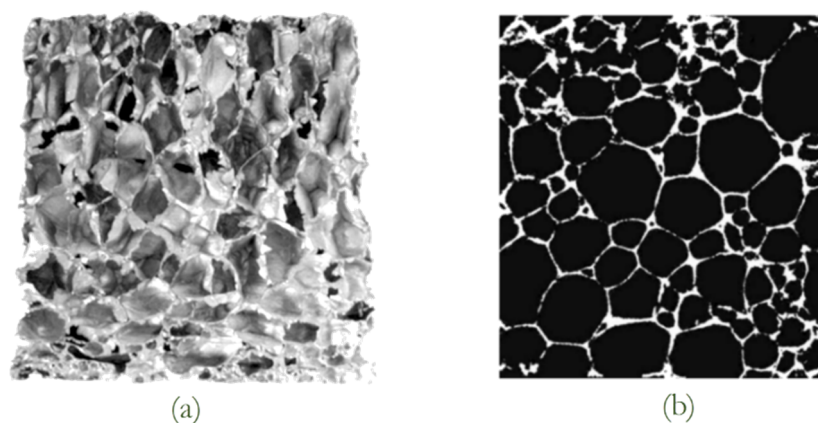


FIGURE 1.23. (a) Structure cellulaire des mousses d'aluminium, (b) échantillon et section bidimensionnelle reconstruite avec une tomographie aux rayons X (l'arête de l'échantillon mesure 10 cm). Forest, (2002).

Les calculs par éléments finis constituent une méthode efficace pour analyser les mécanismes physiques de création des contraintes internes et un outil actif pour orienter le développement de nouveaux matériaux. L'influence de facteurs tels que la température, la vitesse de refroidissement, les contraintes internes créées pendant le refroidissement peut être estimée par simulation numérique. [Madi, 2006] a utilisé la simulation par éléments finis pour réaliser des calculs de contraintes dans la microstructure du THTZ (réfractaires électro-fondus possédant une très haute teneur en zircone). Pour ce faire il a utilisé le code Zebulon, développé par MINES-ParisTech. [Madi, 2006] a premièrement sélectionné un VER (volume élémentaire représentatif) du matériau dans l'image tomographique. Il a segmenté ensuite ce VER pour différencier la zircone du verre figure 1.24, puis l'a maillé. Pour certains calculs de grande taille, la méthode de calcul parallèle par un cluster a été utilisée. Pour ce faire, le maillage a été découpé en plusieurs sous-domaines figure 1.25, pour pouvoir attribuer à chaque processeur son propre maillage. Cette méthode a permis de rendre compte de l'évolution de l'endommagement de la phase vitreuse dans le THTZ pendant le refroidissement.

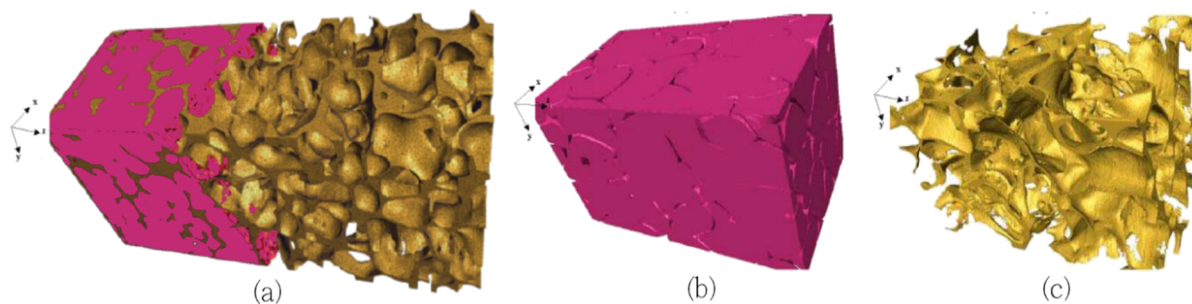


FIGURE 1.24. La microstructure du THTZ (a) tomographiques pour analyses morphologiques sur les THTZ en 3D, (b) parties connexes de la zircone contenue dans le ZS, (c) parties connexes de la phase vitreuse contenue dans le ZS. Ding (2012).

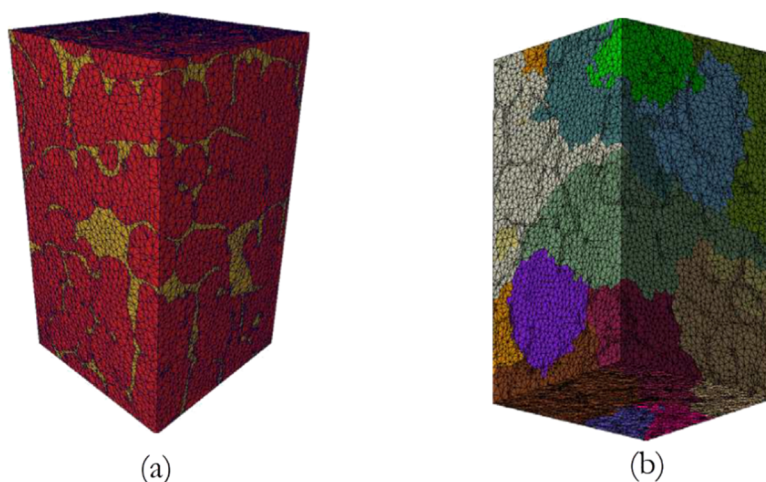


FIGURE 1.25. (a) Maillage 3D d'un agrégat de THTZ avec 12% de phase vitreuse en volume, (b) découpage en 24 sous-domaines du maillage 3D du matériau (chaque couleur correspond à un sous-domaine). Madi, (2006).

Les propriétés mécaniques des produits alimentaires sont essentielles pour leur perception sensorielle et leur devenir nutritionnel. C'est particulièrement le cas de mousses solides telles que les produits céréaliers (à base d'amidon) extrudés. Une démarche de type micromécanique numérique est proposée dans l'étude de [Chiad et al., 2009]. Les images du réseau tridimensionnel poreux des extrudés ont été obtenues par tomographie RX figure 1.26. Le calcul éléments finis réalisé suivant deux démarches (conversion voxel/élément, méthode X-FEM) montre une influence importante de la porosité sur le module d'élasticité figure 1.27. Pour des taux de porosité similaires, les calculs montrent également une dispersion de cette propriété due à l'influence de l'architecture cellulaire.

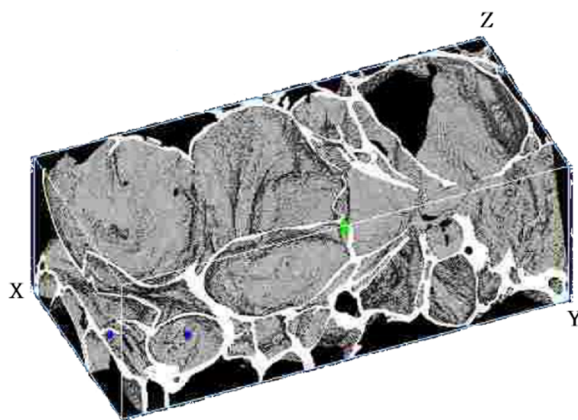


FIGURE 1.26. Structure 3D d'un extrudé d'amidon (A46) révélé par tomographie RX. Chiad, (2009).

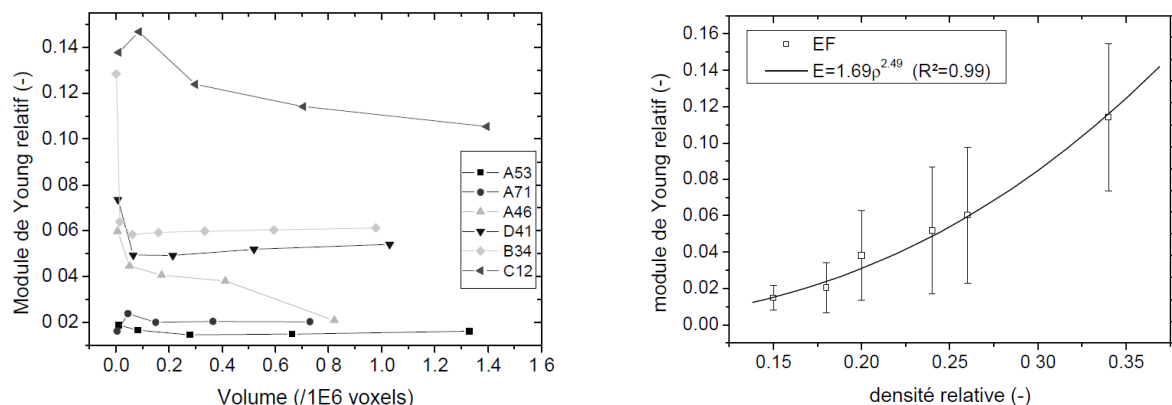


FIGURE 1.27. (a) Détermination du VER et (b) Evolution du module de Young en fonction de la densité relative pour les extrudés étudiés. Chiad, (2009).

Dans le cas des travaux de [Kanit et al., 2006], qui s'intéressent à la modélisation numérique des microstructures hétérogènes de la crème glacée, les microstructures réelles sont obtenues par des mesures expérimentales. L'image 3D de la crème est obtenue par le polissage successif des éprouvettes. Ils ont proposé une nouvelle démarche pour estimer les propriétés apparentes et effectives en utilisant des approches numériques couplées avec les moyennes des paramètres statistiques.

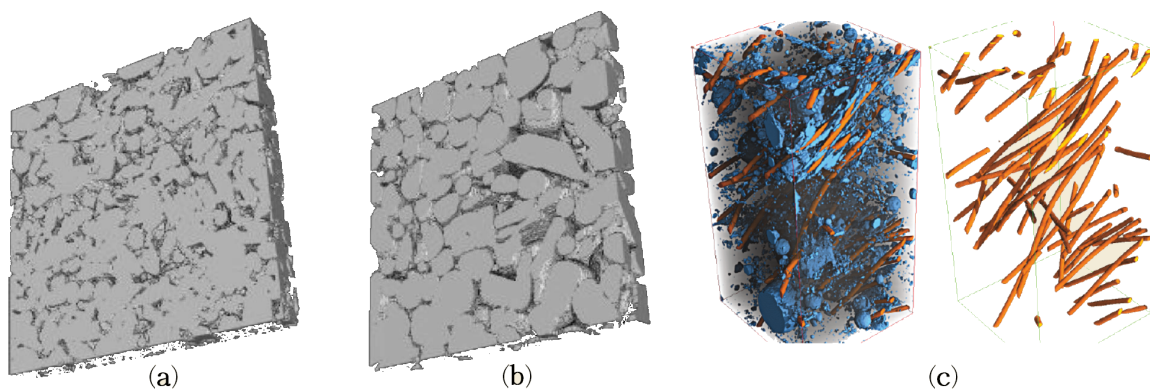


FIGURE 1.28. Imagerie 3D : (a) échantillon SA3 (phase polycristalline, glace), (b) échantillon SB1 (phase polymère gras, crème) Kanit, (2006), (c) Béton renforcé de fibres Altendorf,(2011).

Pour introduire les microstructures réelles dans une approche numérique, un ensemble d'étapes de binarisation et de segmentation est nécessaire, en utilisant des algorithmes dédiés à l'amélioration des images réelles. La figure 1.29 montre l'ensemble des opérations pour préparer une microstructure réelle pour effectuer une simulation numérique.



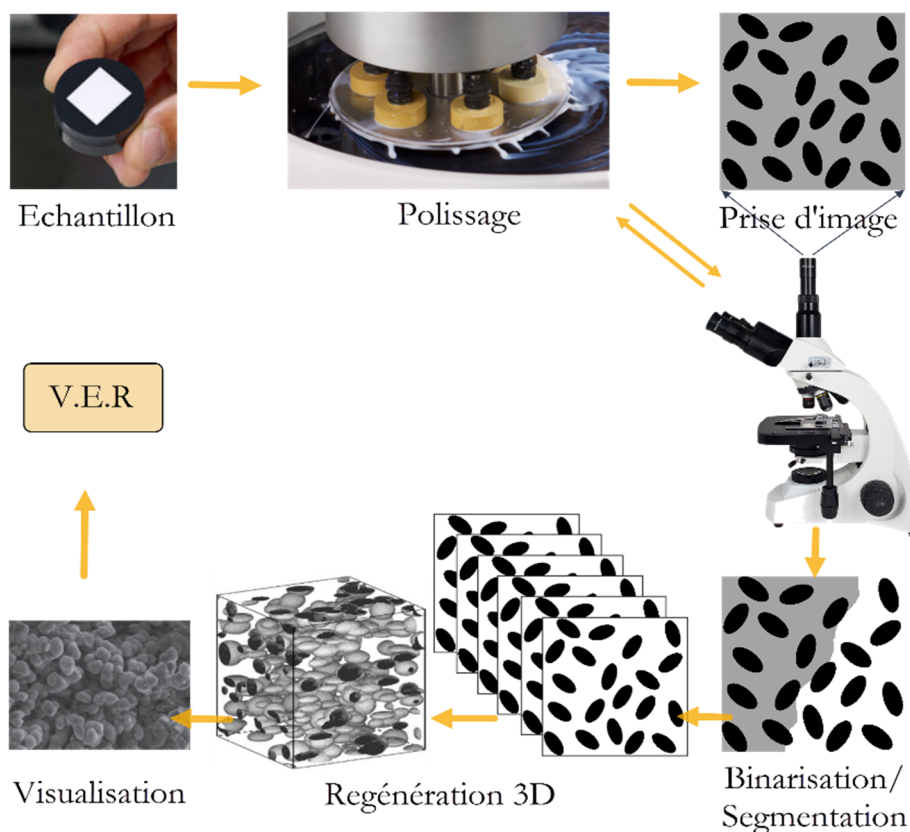


FIGURE 1.29. Préparation d'une microstructure réelle pour la simulation.

Dans sa thèse, [Jean, 2000] s'est intéressé au cas des élastomères chargés par le noir du carbone, de la nanostructure au macro-comportement global. Un nombre suffisant d'échantillons a été prévu afin d'obtenir une caractérisation représentative de la morphologie. Dans cette investigation, deux types de microstructures ont été modélisés par les approches numériques. La première est réelle obtenue par le microscope à transmission (MET), et la seconde est obtenue par les modèles aléatoires de type schéma Booléen. La taille du VER numérique de l'élastomère, dans les deux microstructures, a été déterminée en utilisant des lois statistiques.

La figure 1.30 montre un exemple de microstructures réelles (VER) obtenues par la MET. L'étape de segmentation qui vient après la prise des images transforme une image décrite en nuances de gris (16 bits) en image binaire (8 bits) en vue de l'analyser. L'algorithme de segmentation doit prendre en considération la qualité des images et chercher à minimiser la perte d'informations sur la microstructure engendrée par la simplification de l'image due à la transformation.

Après avoir analysé les images MET binarisées, il a simulé des coupes épaisses de 40nm d'épaisseur appelées images MET numériques qui sont projetées ensuite dans le plan en les modélisant par des outils de la morphologie mathématique.

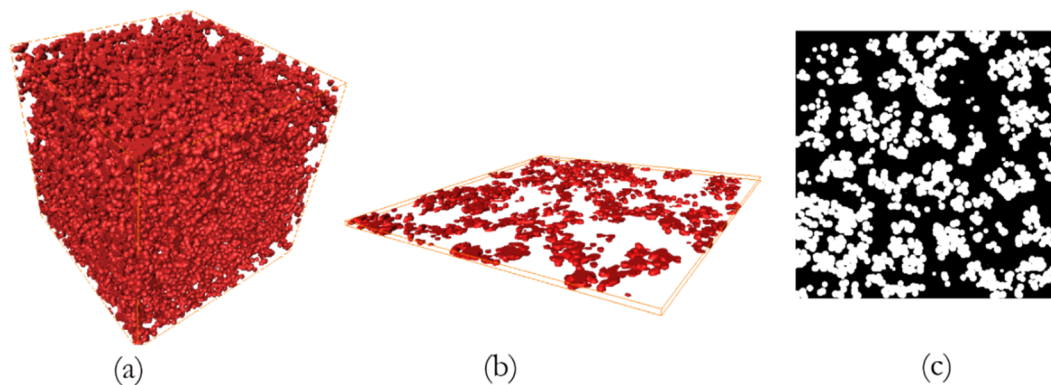


FIGURE 1.30. Elaboration d'un cliché MET numérique. (a) Volume de côté 1600nm, (b) Extraction d'une lamelle, (c) Projection dans le plan (microstructure 2D).

### 1.7.2.3 Approche numérique basée sur les microstructures périodiques

Les raisons pour l'intérêt donné aux matériaux hétérogènes à microstructure périodique sont variées, la première raison principale est que la périodicité se rencontre fréquemment dans les composites manufacturés, la seconde raison est que les microstructures périodiques se prêtent bien aux approches numériques, sur des volumes élémentaires finis. Les calculs se font sur des cellules élémentaires qui permettent de reconstituer par translation le matériau à l'infini.

Le milieu périodique est défini par une cellule et trois vecteurs de translation. La forme de la cellule pour la modélisation n'est pas définie de façon unique, [Michel et al., 1999]. Comme le montre la figure 1.31, on peut distinguer dans un réseau hexagonal, trois cellules 1, 2 et 3, de forme différente. Le comportement effectif est calculé à partir de différentes cellules unitaires de la microstructure qui devraient coïncider. Le choix de la cellule est souvent motivé par les symétries géométriques qui peuvent être utilisées pour simplifier le calcul numérique. Dans le réseau hexagonal représenté sur la figure 1.31, la cellule unité la plus simple est celle numérotée par 1.

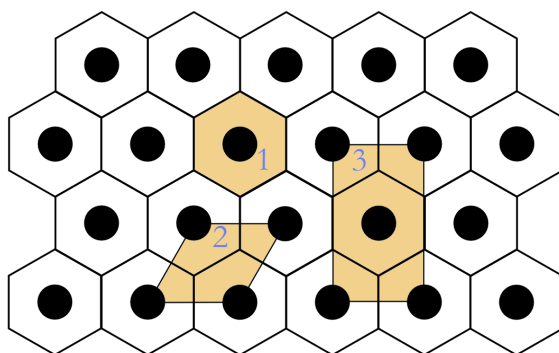


FIGURE 1.31. Différents choix possibles de la cellule unité sur un tableau hexagonal Michel, (1999).

Certains travaux développent d'autres approches numériques hors EF, comme l'utilisation de la transformée de Fourier rapide (FFT). C'est le cas par exemple de [Willot et Jeulin, 2009] concernant les microstructures contenant des pores de forme sphérique figure 1.32.

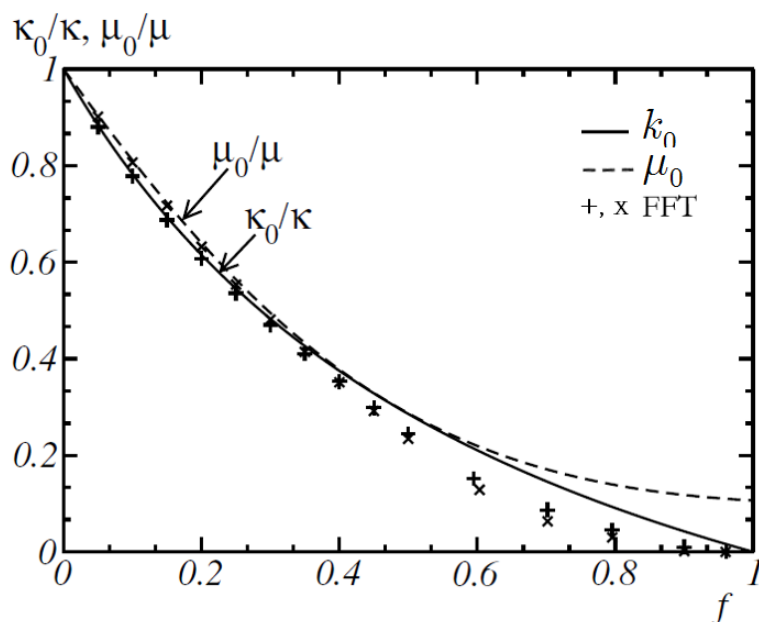


FIGURE 1.32. Comparaison entre les estimations de Bergman pour le module de compressibilité effectif  $k_0$ , le module de cisaillement effectif  $\mu_0$  et les calculs FFT d'un réseau périodique de vides sphériques. Willot et Jeulin (2009).

### 1.7.3 Choix des conditions aux limites pour l'approche numérique

Les approches numériques, dans l'homogénéisation des microstructures hétérogènes, ne dépendent pas uniquement de la taille du VER de la microstructure, mais aussi du choix des conditions aux limites appliquées sur les volumes. On distingue les conditions aux limites homogènes au contour de type statique (SUBC) ou cinématique (KUBC), les conditions périodiques (PBC) et les conditions mixtes (CLM). La comparaison entre les différentes conditions a été présentée dans plusieurs travaux, spécialement dans [Huet, 1990] et [Hazanov et Huet, 1994], où ils ont montré que les variations des propriétés estimées par les CLM sont entre les résultats de KUBC et SUBC. Plusieurs contributions ont été réalisées autour de ce sujet.

Pour les microstructures aléatoires, [Kanit et al., 2003] puis [EL Houdaigui et al., 2006] et [Nguyen et al., 2011] ont étudié l'influence de KUBC, SUBC et PBC sur les propriétés effectives des matériaux fortement hétérogènes. On remarque que pour les petits volumes, les résultats obtenus par SUBC convergent vers la borne analytique de Reuss, et ceux obtenus par KUBC convergent vers la borne analytique de Voigt. Ils ont montré aussi qu'entre les deux conditions, on trouve les résultats de PBC qui convergent rapidement figure 1.33. Il apparaît que dans un volume contenant un grand nombre d'hétérogénéités (un VER), les trois conditions aux limites donnent la même valeur de la propriété effective.

Dans le travail d'[El Houdaigui et al., 2006], on se retrouve avec une autre application importante est la modélisation du comportement mécanique des revêtements polycristallins qui n'ont souvent qu'un seul grain dans l'épaisseur. Dans ce cas, des conditions mixtes périodiques KUBC-SUBC devraient être développées pour inclure l'effet de contrainte du substrat. Cependant, les valeurs convergent vers une constante asymptotique  $\mu^{eff}$  à mesure que la taille du volume augmente, comme prévu.

Une caractéristique frappante de ces résultats est la convergence très rapide de la solution périodique et, au contraire, la convergence très lente associée aux conditions aux limites homogènes. L'estimation périodique est délimitée par les estimations KUBC et SUBC. Des résultats similaires ont été obtenus par [Jean, 2009] dans le cas de calcul de la conductivité thermique sur des microstructures réelles et virtuelles.

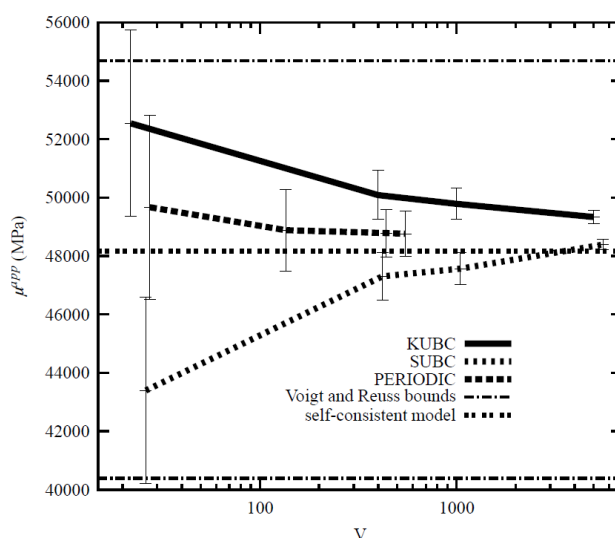


FIGURE 1.33. Valeurs moyennes et intervalles de variation pour le module de cisaillement en fonction de la taille du domaine, pour trois conditions aux limites différentes (polycristaux de cuivre) El Houdaigui, 2006.

L'application des conditions aux limites périodiques (PBC) sur les maillages des microstructures permet d'avoir une convergence rapide. Les maillages qui ne sont pas périodiques nécessitent un traitement pour les rendre périodiques, cette étape consiste à créer une correspondance entre les nœuds d'une facette et de son opposée homologue dans le même volume. Un exemple de cette correspondance est présenté sur la figure 1.34.

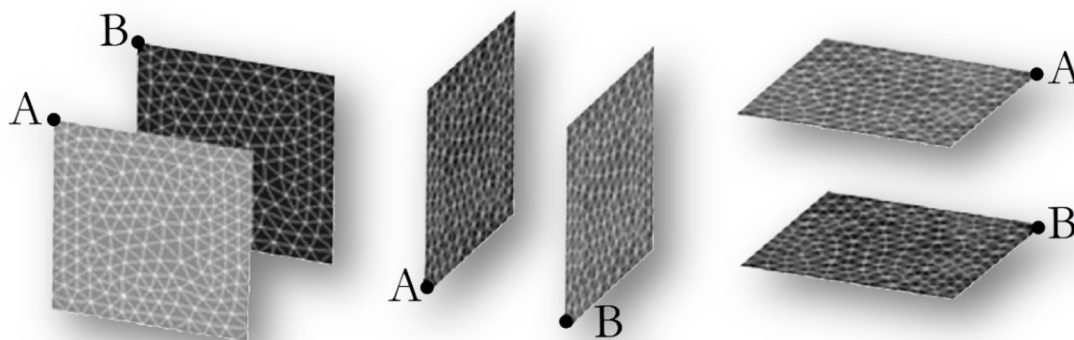


FIGURE 1.34. Distributions de nœuds identiques sur les faces opposées afin d'appliquer des conditions périodiques autour de la cellule unité, Grasset-Bourdel, (2011).

## 1.8 Synthèse

La première partie de cette thèse est constituée principalement de rappels bibliographiques, de généralités et de remarques préliminaires concernant l'homogénéisation de milieux hétérogènes. Les méthodes de changement d'échelle et la notion du VER ont été discutées à partir de définitions provenant de la littérature. Nous avons présenté quelques approches en micromécaniques ainsi que leurs expressions analytiques. Les bornes encadrent les propriétés effectives, et les modèles donnent des estimations approchées. Il existe plusieurs types de bornes qui se différencient par la finesse de description des échelles. Les estimations analytiques permettent, sous certaines hypothèses, d'estimer les propriétés effectives, pour quelques types de matériau hétérogènes.

Afin de pouvoir comparer les résultats provenant de l'homogénéisation numérique, les conditions aux limites des problèmes d'homogénéisation, les estimateurs et autres bornes analytiques sont aussi introduits. Enfin, l'implémentation de l'homogénéisation numérique en utilisant la méthode des éléments finis, est présentée. Toutes ces notions sont mises à contribution dans les applications des chapitres 3 et 4.

# Chapitre 2

## Chapitre 2

### 2. Approches de l'homogénéisation

*Ce chapitre est consacré à la présentation des différentes méthodes approchées d'homogénéisation qui fournissent des expressions analytiques du comportement effectif en élasticité et en thermique. Les approches de l'homogénéisation sont présentées ainsi que des rappels de base théoriques qui serviront pour les différentes applications des chapitres 3 et 4.*

#### 2.1 Introduction

Ce chapitre vise à présenter une étude générale sur les matériaux hétérogènes, Il montre aussi l'intérêt de disposer, à côté de l'approche classique, d'une approche d'homogénéisation permettant de prévoir le comportement global à partir de celui des hétérogénéités. Les techniques d'homogénéisation des matériaux hétérogènes sont présentées dans cette étude. Pour l'approche numérique, nous présentons une technique d'homogénéisation basée sur la notion du volume élémentaire représentatif (V.E.R) en utilisant la méthode des éléments finis pour la résolution. Des conditions aux limites spécifiques, en contrainte ou en déformation pour les problèmes d'élasticité, ou en flux de chaleur et gradient de température pour la conductivité thermique sont appliquées. L'application de cette technique est assurée par une bonne représentation de la microstructure réelle.

Pour l'approche analytique, parmi les méthodes disponibles dans la littérature, nous avons retenu les bornes absolues de *Voigt-Reuss*, les bornes d'ordre 2 de *Hashin-Shtrikman*, les bornes d'ordre 3 de *Beran* et le modèle auto-cohérent généralisé de *Christensen et Lo*.



On termine par une présentation des différentes méthodes approchées d'homogénéisation qui fournissent des expressions analytiques explicites du comportement effectif en élasticité et en thermique.

## 2.2 Technique d'homogénéisation des matériaux hétérogènes

Comme il a été cité dans la première partie de cette thèse, les techniques d'homogénéisation sont classées en deux grandes catégories, les méthodes analytiques et les méthodes numériques [Jean, 2009].

### 2.2.1 Les Méthodes analytiques

Parmi les nombreuses méthodes analytiques, on peut citer les premières théories mathématiques de l'homogénéisation qui utilisent des développements asymptotiques des grandeurs mécaniques telles que la contrainte et la déformation [Beran, 1968], [Sanchez-Palencia, 1974], [Bensoussan et Papanicolaou, 1978].

Il existe également un ensemble de bornes et estimations largement utilisé par les mécaniciens et les physiciens. Les bornes (*supérieure et inférieure*) encadrent les propriétés d'un matériau hétérogène. Il existe plusieurs types de bornes qui se différencient par la finesse de description des échelles. En effet, les bornes inférieure et supérieure sont d'autant plus resserrées que la connaissance de la microstructure est fine.

Enfin les estimations théoriques permettent, sous certaines hypothèses spécifiques, d'évaluer les propriétés effectives d'un matériau hétérogène. Elles présentent l'avantage d'approcher avec plus de précision le comportement du matériau hétérogène contrairement aux bornes qui fournissent un encadrement. On peut écrire une estimation à partir d'une approche micromécanique comme dans le cas du modèle auto-cohérent [Berveiller et Zaoui, 1979], ou à partir de principes variationnels [Ponte Castaneda, 1989].

## 2.2.2 Les Méthodes numériques

Les méthodes numériques sont connues sous deux grandes classes, les méthodes intégrées et les méthodes séquencées.

### 2.2.2.1 Les Méthodes intégrées

Les méthodes intégrées consistent à prendre en compte simultanément les deux échelles, microscopique et macroscopique, dans le calcul par éléments finis. La méthode FE2 [Feyel et Chaboche, 2000] est la méthode la plus citée dans la littérature. C'est une méthode qui présente plusieurs niveaux de calculs par éléments finis caractérisant différentes échelles physiques.

### 2.2.2.2 Les Méthodes séquencées

Pour les méthodes séquencées, on cherche à estimer les propriétés macroscopiques d'un matériau en effectuant un ou plusieurs calculs d'une description pertinente de la microstructure correspondante. La plupart des travaux ont été menés sur des cas bidimensionnels, par exemple le cas de fibres de carbone dans une matrice polymère [Zeman et Sejnoha, 2001]. Essayant de s'approcher avec plus de précision de la morphologie réelle de la microstructure, dans le domaine des polycristaux, une modélisation tridimensionnelle utilisant les polygones de Voronoï est utilisée. Pour estimer correctement les propriétés macroscopiques, la description de la microstructure doit être suffisamment riche et réaliste. Dans certains cas, la modélisation de la microstructure est très difficile, l'utilisation des images tridimensionnelles obtenues par micro tomographie s'avère indispensable [Madi et al., 2007], [Burteau et al., 2007].

Les propriétés effectives d'un matériau hétérogène sont déterminées en moyennant les champs locaux sur un Volume Élémentaire Représentatif (*V.E.R*) caractérisé par la taille et une description géométrique suffisante de la microstructure. La taille du *V.E.R* n'est à priori pas connue, sa détermination est assurée par une méthode statistique [Kanit et al., 2003]. Cette méthode consiste à calculer les propriétés apparentes de microstructures de tailles croissantes avec plusieurs réalisations de la microstructure à taille donnée, et à caractériser la représentativité statistique de la grandeur mesurée vis-à-vis de la taille et du nombre de réalisations. Pour le calcul par éléments finis de microstructures, on impose des conditions aux limites qui sont propres à l'homogénéisation.

### 2.2.2.3 Elasticité linéaire

En élasticité, le comportement microscopique de chaque phase « *ph* » est donné par :

$$\left(\sigma_{ij}\right)_{ph} = \left(c_{ijkl}\right)_{ph} \left(\varepsilon_{kl}\right)_{ph} \quad (2.1)$$

et

$$\left(\varepsilon_{ij}\right)_{ph} = \left(s_{ijkl}\right)_{ph} \left(\sigma_{kl}\right)_{ph} \quad (2.2)$$

avec

$$\left(c_{ijkl}\right)_{ph} = \left(s_{ijkl}^{-1}\right)_{ph} \quad (2.3)$$

où :  $\left(\sigma_{ij}\right)_{ph}$  et  $\left(\varepsilon_{ij}\right)_{ph}$  représentent respectivement les tenseurs de contraintes et de déformations locales de chaque phase « *ph* ».

$\left(c_{ijkl}\right)_{ph}$  et  $\left(s_{ijkl}\right)_{ph}$  sont respectivement les tenseurs d'ordre 4 de rigidité et de souplesse de chaque phase « *ph* ».

### 2.2.2.4 Conductivité thermique

Dans le cas de la conductivité thermique, si on considère  $g_i$  et  $q_i$  les vecteurs gradients de température et du flux de chaleur de chaque phase respectivement, le comportement local en thermique linéaire stationnaire d'un matériau hétérogène s'écrit :

$$\left(g_i\right)_{ph} = -\left(\lambda_{ij}\right)_{ph} \left(g_j\right)_{ph} \quad (2.4)$$

et

$$\left(g_i\right)_{ph} = -\left(\rho_{ij}\right)_{ph} \left(q_j\right)_{ph} \quad (2.5)$$

où  $\lambda_{ij}$  et  $\rho_{ij}$  sont les tenseurs de conductivité thermique et de résistivité thermique respectivement tel que :

$$\lambda_{ik} \cdot \rho_{kj} = I_{ij} \quad (2.6)$$

où :  $I_{ij}$  est le tenseur identité d'ordre 2.

### 2.2.3 Localisation

Cette deuxième étape consiste à relier les grandeurs microscopiques locales, définies dans l'étape de représentation, aux grandeurs macroscopiques.

#### 2.2.3.1 Elasticité linéaire

En élasticité linéaire , on définit les relations entre les déformations moyennes locales de chaque phase  $\langle \varepsilon_{ij} \rangle_{ph}$  et le tenseur des déformations macroscopiques  $E_{kl}$  imposées par :

$$\langle \varepsilon_{ij} \rangle_{ph} = \left(A_{ijkl}\right)_{ph} E_{kl} \quad (2.7)$$

où :  $\left(A_{ijkl}\right)_{ph}$  désigne le tenseur de localisation des déformations de la phase «  $ph$  ».

avec :

$$\langle \varepsilon_{ij} \rangle_{ph} = \frac{1}{V_{ph}} \int_{V_{PH}} \left(\varepsilon_{ij}\right)_{ph} \cdot dV \quad (2.8)$$

De même, on définit les relations entre les contraintes moyennes locales de chaque phase  $\langle \sigma_{ij} \rangle_{ph}$  et les contraintes macroscopiques  $E_{kl}$  imposées par :

$$\langle \sigma_{ij} \rangle_{ph} = \left(B_{ijkl}\right)_{ph} \Sigma_{kl} \quad (2.9)$$

où :  $\left(B_{ijkl}\right)_{ph}$  désigne le tenseur d'ordre 4 de concentration des contraintes.

avec :

$$\langle \sigma_{ij} \rangle_{ph} = \frac{1}{V_{ph}} \int_{V_{PH}} \left(\sigma_{ij}\right)_{ph} \cdot dV \quad (2.10)$$

### 2.2.3.2 Conductivité thermique

Pour la conductivité thermique, cette étape permet de lier les moyennes des gradients de températures locales de chaque phase  $\langle g_i \rangle_{ph}$  au vecteur gradient de température macroscopique  $G_i$  imposé.

$$\langle g_i \rangle_{ph} = \langle \nabla T \rangle_{ph} = \left( a_{ij} \right)_{ph} G_j \quad (2.11)$$

De même, la relation reliant les moyennes de flux de chaleur locaux de chaque phase  $\langle q_i \rangle_{ph}$  au vecteur flux de chaleur macroscopique  $Q_i$  imposé s'écrit :

$$\langle q_i \rangle_{ph} = \left( b_{ij} \right)_{ph} Q_j \quad (2.12)$$

où :  $a_{ij}$  et  $b_{ij}$  sont les tenseurs de localisation du gradient de température et de concentration des flux de chaleur respectivement.

## 2.2.4 Homogénéisation

La dernière étape consiste à déterminer le comportement équivalent du matériau hétérogène.

### 2.2.4.1 Elasticité linéaire

Dans cette étape, le tenseur moyen des contraintes sur tout le V.E.R est exprimé par :

$$\langle \sigma_{ij} \rangle = \sum_{ph=1}^N P_{ph} \langle \sigma_{ij} \rangle_{ph} \quad (2.13)$$

De même le tenseur moyen des déformations sur tout le V.E.R est exprimé par :

$$\langle \varepsilon_{ij} \rangle = \sum_{ph=1}^N P_{ph} \langle \varepsilon_{ij} \rangle_{ph} \quad (2.14)$$

Le comportement apparent sera détaillé dans la section 2.2.6.3 après avoir développé les conditions au limites.

### 2.2.4.2 Conductivité thermique

En conductivité thermique, on exprime le tenseur moyen des gradients de températures sur tout le V.E.R par :

$$\langle g_i \rangle = \langle \nabla T \rangle = \sum_{ph=1}^N P_{ph} \langle g_i \rangle_{ph} \quad (2.15)$$

Et le tenseur moyen des flux de chaleur sur tout le V.E.R par :

$$\langle q_i \rangle = \sum_{ph=1}^N P_{ph} \langle q_i \rangle_{ph} \quad (2.16)$$

### 2.2.5 Condition de HILL

En élasticité linéaire, la condition de HILL impose l'égalité entre le travail macroscopique et la moyenne des travaux microscopiques [Bornert M., 2010] :

$$\frac{1}{2} \langle \varepsilon_{ij} \sigma_{ij} \rangle = \frac{1}{2} E_{ij} \Sigma_{ij} \quad (2.17)$$

cela est assuré par l'égalité :

$$\langle \varepsilon_{ij} \rangle = E_{ij} \text{ et } \langle \sigma_{ij} \rangle = \Sigma_{ij} \quad (2.18)$$

Dans le cas de la conductivité thermique équivalente et par analogie au comportement élastique, la condition de HILL s'écrit :

$$\langle -q_i \nabla T \rangle = Q_i G_i \quad (2.19)$$

ce qui est assuré par :

$$\langle q_i \rangle = Q_i \text{ et } \langle \nabla T \rangle = G_i \quad (2.20)$$

Ainsi, pour assurer la condition de HILL et l'équivalence du comportement effectif, des conditions aux limites particulières aux bords du V.E.R sont nécessaires.

### 2.2.6 Conditions aux limites et moyenne des champs locaux

Pour calculer les propriétés effectives du matériau homogène équivalent (MHE) et étudier la convergence des propriétés apparentes, plusieurs conditions aux limites peuvent être appliquées; Les plus classiquement proposées dans la littérature ([Zaoui, 1999]; [Bornert M., 2010]) sont : les conditions homogènes sur le contour en déformation (KUBC), les conditions homogènes sur le contour en contraintes (SUBC) et les conditions périodiques (PBC).

D'une façon analogue, les conditions aux limites du gradient de température homogène sur le contour (UGT), les conditions aux limites du flux de chaleur homogène sur le contour (UHF) et les conditions aux limites périodiques (CLP) sont imposées pour le cas des propriétés thermiques.

### 2.2.6.1 Elasticité linéaire

On considère une microstructure de volume  $V$ . Pour déterminer les propriétés effectives de ce volume, on impose des conditions aux limites sur sa frontière notée  $\partial V$ . On présente dans ce qui suit les trois types de conditions aux limites utilisés dans les calculs par éléments finis pour la détermination des propriétés effectives.

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

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

$$\begin{cases} u_i = E_{ij} \cdot x_j & \forall x_i \in \partial V \\ E_{ij} = \langle \varepsilon_{ij} \rangle = \frac{1}{V} \int_V \varepsilon_{ij} \cdot dV \end{cases} \quad (2.21)$$

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

$$\Sigma_{ij} = \langle \sigma_{ij} \rangle = \frac{1}{V} \int_V \sigma_{ij} \cdot dV \quad (2.22)$$

#### - Conditions homogènes sur le contour en contraintes (*SUBC*)

Dans ce cas, on applique sur la surface extérieure  $\partial V$  du volume  $V$  un effort volumique  $\sigma \cdot n$  qui s'écrit à partir du tenseur des contraintes homogénéisées  $\Sigma_{ij}$  correspondant à la moyenne des contraintes locales dans le volume par :

$$\begin{cases} \sigma_{ij} \cdot n = \Sigma_{ij} \cdot n & \forall x_i \in \partial V \\ \Sigma_{ij} = \langle \sigma_{ij} \rangle = \frac{1}{V} \int_V \sigma_{ij} \cdot dV \end{cases} \quad (2.23)$$

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

$$E_{ij} = \langle \varepsilon_{ij} \rangle = \frac{1}{V} \int_V \varepsilon_{ij} \cdot dV \quad (2.24)$$

### - Conditions aux limites périodiques (PBC)

Dans ces conditions, on applique sur tous les nœuds de la surface extérieure  $\partial V$  du volume  $V$  du déplacement  $u$  qui s'écrit à partir du tenseur des déformations homogénéisées  $E_{ij}$  et d'une fluctuation périodique  $v_i$  par :

$$\begin{cases} u_i = E_{ij} \cdot x_j + v_i & \forall x_i \in \partial V \\ E_{ij} = \langle \varepsilon_{ij} \rangle = \frac{1}{V} \int_V \varepsilon_{ij} \cdot dV \end{cases} \quad (2.25)$$

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.

#### 2.2.6.2 Conductivité thermique

Pour les problèmes thermiques, la température, le vecteur gradient de température et le flux de chaleur sont notés  $T$ ,  $\nabla T$  et  $q$  respectivement. Le flux de chaleur et le gradient de température sont liés pour le cas isotrope, d'après la loi de Fourier, par :

$$q = -\lambda \cdot \nabla T \quad (2.26)$$

où :  $\lambda$  est la conductivité thermique pour la phase considérée.



- **Conditions aux limites du gradient de température homogène sur le contour (UGT)**

On applique sur le volume extérieur  $\partial V$  du volume  $V$  un gradient de température  $\nabla T$  qui correspond à la moyenne des gradients locaux dans le volume ainsi :

$$\begin{cases} T = G_i \cdot x_i & \forall x_i \in \partial V \\ G_i = \langle \nabla T \rangle = \frac{1}{V} \int_V \nabla T \cdot dV \end{cases} \quad (2.27)$$

où  $G_i$  est un tenseur d'ordre 1 constant indépendant de  $x$ .

Le vecteur flux macroscopique est alors obtenu par la moyenne des flux locaux dans tout le volume  $V$  :

$$Q_i = \langle q_i \rangle = \frac{1}{V} \int_V q_i \cdot dV \quad (2.28)$$

- **Conditions aux limites du gradient de température homogène sur le contour (UHF)**

Dans ce cas on applique sur le volume extérieur  $\partial V$  du volume  $V$  un flux de chaleur  $Q_i$  correspondant à la moyenne des flux locaux  $q_i$  dans le volume par :

$$\begin{cases} q_i \cdot n = Q_i \cdot x_i & \forall x_i \in \partial V \\ Q_i = \langle q_i \rangle = \frac{1}{V} \int_V q_i \cdot dV \end{cases} \quad (2.29)$$

Le vecteur gradient de température macroscopique  $G_i$  est alors obtenu par la moyenne des gradients locaux  $g_i$  :

$$G_i = \langle g_i \rangle = \langle \nabla T \rangle = \frac{1}{V} \int_V \nabla T \cdot dV \quad (2.30)$$

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

Dans ce cas, la température prend la forme :

$$\begin{cases} T = G_i \cdot x_i + t & \forall x_i \in \partial V \\ G_i = \langle \nabla T \rangle = \frac{1}{V} \int_V \nabla T \cdot dV \end{cases} \quad (2.31)$$

où la fluctuation  $t$  de la température est périodique.

### 2.2.6.3 Propriétés apparentes et effectives

#### - Elasticité linéaire

A partir des conditions aux limites décrites précédemment, les déformations et les contraintes locales vérifient les relations :

$$E_{ij} = \langle \varepsilon_{ij} \rangle \quad (2.32)$$

et

$$\sum_{ij} = \langle \sigma_{ij} \rangle \quad (2.33)$$

Par conséquent, les tenseurs  $A_{ijkl}$  et  $B_{ijkl}$  représentent les propriétés suivantes :

$$\sum_{ph=1}^N P_{ph} (A_{ijkl})_{ph} = I_{ijkl} \quad (2.34)$$

et

$$\sum_{ph=1}^N P_{ph} (B_{ijkl})_{ph} = I_{ijkl} \quad (2.35)$$

où  $I_{ijkl}$  est le tenseur unité d'ordre 4.

La relation constitutive pour le matériau hétérogène est donnée par :

$$\langle \sigma_{ij} \rangle = C_{ijkl}^{app} \langle \varepsilon_{kl} \rangle \quad (2.36)$$

D'après les équations 2.1, 2.7 et 2.13 on a :

$$\begin{aligned} \sum_{ph=1}^N P_{ph} \langle \sigma_{ij} \rangle_{ph} &= C_{ijkl}^{app} \langle \varepsilon_{kl} \rangle \\ \Leftrightarrow \sum_{ph=1}^N P_{ph} (c_{ijkl})_{ph} \langle \varepsilon_{kl} \rangle_{ph} &= C_{ijkl}^{app} E_{kl} \\ \Leftrightarrow \sum_{ph=1}^N P_{ph} (c_{ijmn})_{ph} (A_{mnkl})_{ph} E_{kl} &= C_{ijkl}^{app} E_{kl} \\ \Rightarrow C_{ijkl}^{app} &= \sum_{ph=1}^N P_{ph} (c_{ijmn})_{ph} (A_{mnkl})_{ph} \end{aligned} \quad (2.37)$$

Où  $C_{ijkl}^{app}$  et  $S_{ijkl}^{app}$  sont respectivement les tenseurs apparents d'élasticité et de souplesse pour un volume  $V$ .

On obtient ainsi le tenseur de rigidité équivalent  $C_{ijkl}^{app}$  exprimé en fonction des tenseurs de rigidité  $(C_{ijkl})_{ph}$  et des tenseurs de localisation  $(A_{mnkl})_{ph}$  de la déformation dans chaque phase «  $ph$  ».

Dans le cas particulier d'un milieu hétérogène constitué de  $N$  phases de type inclusions noyées dans une matrice dominante, et grâce à l'égalité sur la moyenne des tenseurs de localisation 2.34 et 2.35, les tenseurs apparents d'élasticité et de souplesse peuvent être écrits, en notant  $m$  l'indice de la phase constituant la matrice, par :

$$C_{ijkl}^{app} = (C_{ijkl})_m + \sum_{ph=1}^N P_{ph} ((C_{ijmn})_{ph} - (C_{ijmn})_m) (A_{mnkl})_{ph} \quad (2.38)$$

et

$$S_{ijkl}^{app} = (S_{ijkl})_m + \sum_{ph=1}^N P_{ph} ((S_{ijmn})_{ph} - (S_{ijmn})_m) (B_{mnkl})_{ph} \quad (2.39)$$

Il a été observé pratiquement que les résultats apparents diffèrent d'une condition aux limites à l'autre, mais convergent avec l'augmentation de la taille du  $V.E.R$  en se rapprochant de la taille du  $V.E.R$  ([Kanit et al., 2003] ; [Qi, 2006] ; [Kari et al., 2007]). Cette convergence est plus ou moins lente selon le cas étudié. Ainsi, il est démontré que les conditions homogènes  $KUBC$  et  $SUBC$  fournissent un encadrement du comportement apparent [Huet, 1991] exprimé par :

$$S_{ijkl\Sigma}^{app-1} \leq C_{ijkl}^{eff} \leq C_{ijklE}^{app} \quad (2.40)$$

Et que les conditions aux limites périodiques ( $CLP$ ) donnent une meilleure estimation des propriétés apparentes par rapport aux conditions homogènes -  $KUBC$ ,  $SUBC$  ([Hazanov et Huet, 1994] ; [Kanit et al., 2003]) données par :

$$S_{ijkl\Sigma}^{app-1} \leq S_{ijkl\Sigma_{per}}^{app-1} \leq C_{ijkl}^{eff} \leq C_{ijklE_{per}}^{app} \leq C_{ijklE}^{app} \quad (2.41)$$

Lorsque le  $V.E.R$  est suffisamment grand (voir figure 2.1), les propriétés apparentes du matériau hétérogène ne dépendent plus du type de conditions aux limites et coïncident avec les propriétés effectives [Sab, 1992].

$$S_{ijkl\Sigma}^{app-1} = S_{ijkl\Sigma_{per}}^{app-1} = C_{ijkl}^{eff} = C_{ijklE_{per}}^{app} = C_{ijklE}^{app} \quad (2.42)$$

Pour les propriétés isotropiques effectives il y a des cas spéciaux des conditions aux limites  $KUBC$ ,  $SUBC$  et  $PBC$  pour lesquelles on choisit les valeurs de  $E_{ij}$  et  $\Sigma_{ij}$ .

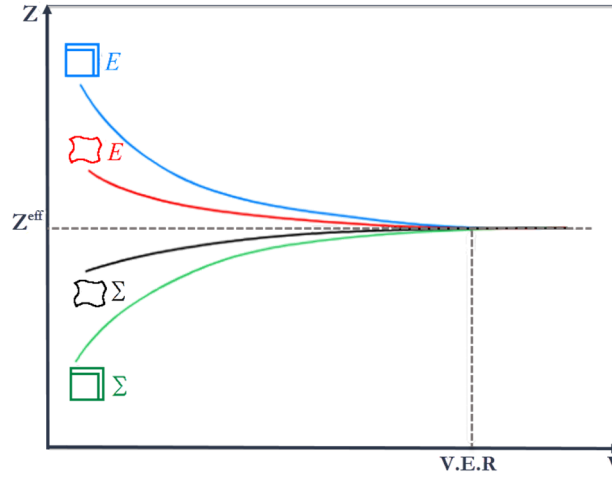


FIGURE 2.1. Illustration de la convergence de la propriété  $Z$  pour les différentes conditions aux limites.

### - Propriétés élastiques

Pour la détermination du module de compressibilité  $k^{app}$  sur le volume  $V$  et pour résoudre les problèmes micromécaniques  $KUBC$ , le tenseur des déformations macroscopiques  $E_{ij}^k$  suivant est appliqué :

$$E_{ij}^k = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{3} \end{pmatrix} \quad (2.43)$$

et pour la détermination du module de cisaillement  $\mu^{app}$  sur le volume  $V$ , le tenseur des déformations macroscopiques  $E_{ij}^\mu$  suivant est appliqué :

$$E_{ij}^\mu = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.44)$$

Le module de compressibilité  $k^{app}$  et le module de cisaillement  $\mu^{app}$  peuvent être définis comme :

$$k^{app} = \langle \sigma_{ij} \rangle E_{ij}^k = \frac{1}{3} \text{trace} \langle \sigma_{ij} \rangle \quad (2.45)$$

$$\mu^{app} = \langle \sigma_{ij} \rangle E_{ij}^\mu = \text{trace} \langle \sigma_{ij} \rangle \quad (2.46)$$

pour le cas de la condition aux limites *SUBC*, on prend :

$$E_{ij}^k = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.47)$$

et

$$E_{ij}^\mu = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.48)$$

dans ce cas le module de compressibilité  $k^{app}$  et le module de cisaillement  $\mu^{app}$  peuvent être définis comme suit :

$$\frac{1}{k^{app}} = E_{ij}^k \langle \varepsilon_{ij} \rangle \text{trace} \langle \varepsilon_{ij} \rangle \quad (2.49)$$

$$\frac{1}{\mu^{app}} = E_{ij}^\mu \langle \varepsilon_{ij} \rangle = 2 \langle \varepsilon_{12} \rangle \quad (2.50)$$

### - Conductivité thermique

En thermique, par analogie avec l'élasticité et à partir des conditions aux limites décrites précédemment, le flux de chaleur et le gradient de température locaux vérifient les relations :

$$G_i = \langle g_i \rangle = \langle \nabla T \rangle \quad (2.51)$$

et

$$Q_i = \langle q_i \rangle \quad (2.52)$$

La relation constitutive pour le matériau hétérogène est donnée par :

$$\langle q_i \rangle = -\lambda_{ij}^{app} \langle g_i \rangle \quad (2.53)$$

D'après les équations 1.4, 1.11 et 1.16, on aura :

$$\begin{aligned}
& \sum_{ph=1}^N P_{ph} \langle q_i \rangle_{ph} = -\lambda_{ij}^{app} \langle g_i \rangle \\
& \Leftrightarrow \sum_{ph=1}^N P_{ph} (\lambda_{ij})_{ph} \langle g_i \rangle_{ph} = \lambda_{ij}^{app} G_i \\
& \Leftrightarrow \sum_{ph=1}^N P_{ph} (\lambda_{in})_{ph} (a_{nj})_{ph} G_i = \lambda_{ij}^{app} G_j \\
& \Rightarrow \lambda_{ij}^{app} = \sum_{ph=1}^N P_{ph} (\lambda_{in})_{ph} (a_{nj})_{ph} \tag{2.54}
\end{aligned}$$

On obtient le tenseur de la conductivité thermique équivalente qui s'exprime en fonction des conductivités thermiques  $(\lambda_{ij})_{ph}$  et des tenseurs de localisation  $(a_{ij})_{ph}$  de chaque phase.

Dans le cas particulier d'un milieu hétérogène constitué de  $n$  phases en inclusions noyées dans une matrice dominante, les tenseurs apparents de conductivité et de résistivité thermique peuvent être écrits, en notant  $m$  l'indice de la phase constituant la matrice, par :

$$\lambda_{ij}^{app} = (\lambda_{ij})_m + \sum_{ph=1}^N P_{ph} (\lambda_{ij})_{ph} - (\lambda_{ij})_m (a_{mn})_{ph} \tag{2.55}$$

et

$$\rho_{ij}^{app} = (\rho_{ij})_m + \sum_{ph=1}^N P_{ph} (\rho_{ijmn})_{ph} - (\rho_{ijmn})_m (b_{mn})_{ph} \tag{2.56}$$

et ceci pour les problèmes *UGT* et *UHF* respectivement.

Selon la condition aux limites imposée, le tenseur de conductivité apparent peut être défini par :

$$\lambda_{ijG}^{app} = \langle \lambda_{im} \cdot a_{mj} \rangle \tag{2.57}$$

et

$$\lambda_{ijQ}^{app-1} = \langle \rho_{im} \cdot b_{mj} \rangle \tag{2.58}$$

Là encore, sur un volume hétérogène  $V$ , en faisant un calcul pour chaque condition aux limites, on peut encadrer la conductivité thermique effective par les conductivités apparentes associées à chaque condition aux limites.

$$\rho_{ijQ}^{app-1} = \rho_{ijQper}^{app-1} = \lambda_{ij}^{eff} = \lambda_{ijGper}^{app} = \lambda_{ijG}^{app} \quad (2.60)$$

Pour le cas des propriétés effectives isotropes, le gradient de température et le flux de température sont donnés par :

$$G_i = (111)^T \quad (2.61)$$

et

$$Q_i = (111)^T \quad (2.62)$$

Ainsi les conductivités thermiques apparentes peuvent être déterminées par :

$$\lambda^{app} = \frac{1}{3} trace \langle q_i \rangle \quad (2.63)$$

$$\lambda^{app-1} = \frac{1}{3} trace \langle \nabla T \rangle \quad (2.64)$$

## 2.3 Estimations analytiques des propriétés élastiques

Les méthodes d'analyse sont disponibles pour estimer les propriétés des matériaux hétérogènes. Elles impliquent généralement des hypothèses concernant la microstructure. Dans le domaine de la mécanique, les développements asymptotiques [Sanchez-Palencia, 1974], [Bensoussan et Papanicolaou, 1978] et les bornes variationnelles [Hashin et Shtrikman, 1962], [Beran, 1968] sont des exemples des approches analytiques. Pour un matériau élastique hétérogène, l'homogénéisation consiste à résoudre le problème micromécanique de localisation (cas de déformation imposée) ou de concentration (cas de contrainte imposée). Cela peut se faire numériquement ou analytiquement en utilisant certaines hypothèses. C'est ainsi que les estimations et les bornes ont été développées. Nous présenterons dans la section suivante quelques estimations et bornes pour les propriétés élastiques et thermiques.

## 2.3.1 Estimations analytiques

### 2.3.1.1 Einstein (1906-1911)

La première et la plus simple des estimations évoquées ici est celle d'Einstein [Einstein, 1906] et [Einstein, 1911] qui estima les propriétés d'un fluide visqueux de type plasma contenant des particules sphéroïdales incompressibles et isolées en suspension par :

$$\mu_{Einstein} = \mu_m(1 + 2.5P_i) \quad (2.65)$$

### 2.3.1.2 Smallwood (1944)

Smallwood [Smallwood, 1944] utilisa la même approche qu'Einstein pour décrire le module d'Young en petites déformations d'un matériau solide renforcé par des particules sphériques rigides. Cette estimation ne reste valable que pour de faibles fractions volumiques de particules.

$$E_{Smallwood} = E_m(1 + 2.5P_i) \quad (2.66)$$

### 2.3.1.3 Guth-Gold (1938)

Guth et Gold [Guth et Gold, 1938], contrairement aux estimations d'Einstein et de Smallwood, proposèrent de prendre en compte les phénomènes d'interaction entre particules et pour de plus fortes fractions volumiques ils ajoutent un terme quadratique à l'équation 2.66 :

$$E_{Guth-Gold} = E_m(1 + 2.5P_i + 14.1P_i^2) \quad (2.67)$$

### 2.3.1.4 Budiansky (1965)

Une estimation auto-cohérente du module de Young a été développée par Budiansky [Budiansky, 1965] qui s'applique dans le cas de particules rigides dans une matrice incompressible :

$$E_{Budiansky} = \frac{E_m}{(1 - 2.5P_i)} \quad (2.68)$$



## 2.3.2 Modèles analytiques de changement d'échelles

Cette section est consacrée à la présentation des modèles théoriques de changement d'échelles, destinés à l'estimation des propriétés effectives d'un matériau hétérogène, dérivés de la solution du problème de l'inclusion hétérogène d'*Eshelby*. Nous commençons par la présentation de la solution du problème de l'inclusion hétérogène d'*Eshelby*, suivie des différents modèles qui en sont dérivés, à citer : la solution diluée, la méthode auto-cohérente et le modèle de *Mori-Tanaka*.

### 2.3.2.1 Problème de l'inclusion d'Eshelby

Dans une première étape, *Eshelby* a résolu le problème de l'équilibre mécanique d'une inclusion de forme ellipsoïdale plongée dans une matrice infinie, possédant les mêmes propriétés mécaniques que la matrice et soumise à une déformation libre [Eshelby, 1957].

Par analogie à cette première solution, il a donné la solution du problème de l'inclusion hétérogène. Si on considère une inclusion de rigidité  $C_{ph}$  plongée dans une matrice infinie de rigidité  $C_m$ , l'expression de la matrice de localisation dans l'hétérogénéité sera :

$$A_{ph} = (I + S^E : C_m^{-1} : (C_{ph} - C_m))^{-1} \quad (2.69)$$

où  $S^E$  est le tenseur d'ordre 4, appelé tenseur d'Eshelby, dépendant des propriétés mécaniques de la matrice  $C_m$  et de la forme de l'inclusion.

Donc, le comportement apparent est obtenu grâce à l'équation 2.38 et devient :

$$C_{ijkl}^{app} = (C_{ijkl})_m + \sum_{ph=1}^N P_{ph} ((C_{ijmn})_{ph} - (C_{ijmn})_m (A_{mnkl})_{ph}) \quad (2.70)$$

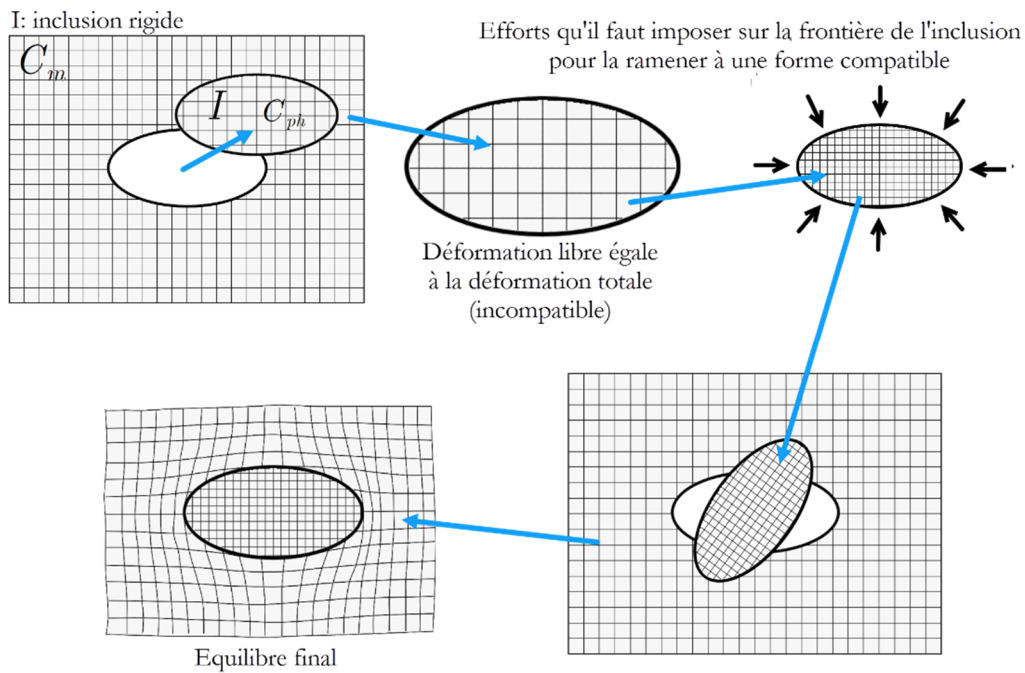


FIGURE 2.2. Problème formulé par Eshelby. Eshelby, 1957.

### 2.3.2.2 Schéma des distributions diluées

Dans cette solution, chaque inclusion est considérée comme une seule entité noyée dans une matrice infinie. La solution diluée est valable si les inclusions sont suffisamment éloignées les unes des autres, donc, aucune interaction entre les inclusions n'est considérée. Par conséquent, elle s'applique seulement aux matériaux hétérogènes contenant une faible fraction volumique  $P$ .

Il s'agit donc d'appliquer le résultat du problème de l'hétérogénéité, équation 2.69, à chaque inclusion afin d'obtenir les tenseurs de localisation de chaque phase :

$$\text{MHE} = \begin{matrix} C_m \\ \text{O} \\ C_1 \end{matrix} + \begin{matrix} C_m \\ \text{O} \\ C_2 \end{matrix} + \begin{matrix} C_m \\ \text{O} \\ C_3 \end{matrix} + \dots + \begin{matrix} C_m \\ \text{O} \\ C_N \end{matrix}$$

FIGURE 2.3. Illustration du principe de la solution diluée.

$$A_{ph} = (I + S_{ph}^E : C_m^{-1} : (C_{ph} - C_m))^{-1} \quad (2.71)$$

Le comportement (homogénéisé) est obtenu grâce au tenseur des rigidités effectives exprimé par :

$$C_{ijkl}^{app} = (C_{ijkl})_m + \sum_{ph=1}^N P_{ph} ((C_{ijmnr})_{ph} - (C_{ijmn})_m (A_{mnkl})_{ph}) \quad (2.72)$$

Pour un composite à 2 phases, avec des inclusions sphériques noyées dans une matrice, les modules de compressibilité  $k$  et de cisaillement  $\mu$  équivalents sont donnés par :

$$k^{dl} = k_m + P_i \frac{(k_i - k_m)(3k_m + 4\mu_m)}{(3k_i + 4\mu_m)} \quad (2.73)$$

$$\frac{\mu^{dl}}{\mu_m} = 1 - \frac{15P_i(1 - \frac{\mu_i}{\mu_m})(1 - \nu_m)}{7 - 5\nu_m + 2(4 - 5\nu_m)\frac{\mu_i}{\mu_m}} \quad (2.74)$$

avec  $m$  l'indice attribué à la matrice et  $i$  à l'inclusion.

### 2.3.2.3 Modèle auto-cohérent

Dans cette méthode, chaque phase du matériau est successivement assimilée à une inclusion ellipsoïdale noyée dans un milieu infini possédant les caractéristiques du matériau homogénéisées recherchées.

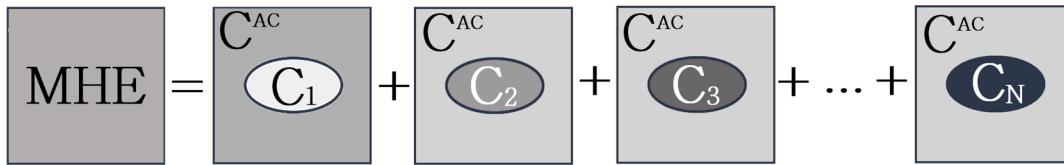


FIGURE 2.4. Illustration du principe du schéma auto-cohérent.

Le tenseur de localisation de chaque phase  $ph$  est exprimé par :

$$A_{ph} = \left[ I + S_{ph}^E : (C^{AC})^{-1} : (C_{ph} - C^{AC}) \right]^{-1} \quad (2.75)$$

Le tenseur de rigidité homogénéisé sera :

$$C^{AC} = \sum_{ph}^N P_{ph} C_{ph} : \left[ I + S_{ph}^E : (C^{AC})^{-1} : (C_{ph} - C^{AC}) \right]^{-1} \quad (2.76)$$

où la solution de cette équation implicite est, généralement, obtenue numériquement.

Pour un composite biphasé, avec des inclusions sphériques, une solution analytique permet d'exprimer les caractéristiques élastiques recherchées [Aboudi, 1991], à savoir :

$$k^{AC} = k_m + P_i \frac{(k_i - k_m)(3k^{AC} + 4\mu^{AC})}{(3k_i + 4\mu^{AC})} \quad (2.77)$$

$$\mu^{AC} = \mu_m + P_i (\mu_i - \mu_m) \frac{15(1 - \nu^{AC})}{\mu^{AC}(7 - 5\nu^{AC}) + 2(4 - 5\nu^{AC})\mu_i} \quad (2.78)$$

Pour des problèmes à deux dimensions, [Herve et Zaoui, 1995] ont proposé une expression du module de compressibilité effectif  $k^{AC}$  pour des composites biphasés donné par :

$$k^{AC} = \frac{k_1(\mu_1 + k_2) + \mu_1 P(k_2 - k_1)}{(\mu_1 + k_2) + P(k_1 - k_2)} \quad (2.79)$$

Le module de cisaillement  $\mu^{AC}$  a été proposé par [Christensen et Lo, 1979] par l'expression :

$$\mu^{AC} = \mu_1 \left( 1 + \frac{P}{\frac{\mu_m}{\mu_i - \mu_m} + \frac{k_m + \frac{7}{3}\mu_m}{(2k_m + \frac{8}{3}\mu_m)}(1 - P)} \right) \quad (2.80)$$

### 2.3.2.4 Mori-Tanaka (1973)

Le schéma de Mori et Tanaka [Mori et Tanaka, 1973] ; [Benveniste, 1987] s'applique à des milieux hétérogènes constitués d'inclusions noyées dans une matrice. Les inclusions sont réparties de manière isotrope et se comportent, en moyenne, comme des inclusions isolées dans une matrice infinie, soumise, à l'infini à la déformation moyenne de la matrice  $\varepsilon_m$  (une inconnue du problème). La déformation de chaque inclusion est alors liée à la déformation moyenne de la matrice par des « pseudo-tenseurs de localisation »  $T_{ph}$  équation 2.81, solution du problème de l'hétérogénéité :

$$\varepsilon_{ph} = T_{ph} : \varepsilon_m \quad (2.81)$$

Le tenseur de localisation de chaque phase aura pour expression :

$$A_{ph} = T_{ph} : \left( \sum P_{ph} T_{ph} \right)^{-1} \quad (2.82)$$

et le tenseur de rigidité homogénéisé, aura pour expression :

$$C^{MT} = C_m + \sum_{ph=1}^N P_{ph} (C_{ph} - C_m) : T_{ph} : \left( \sum P_{ph} T_{ph} \right)^{-1} \quad (2.83)$$

Dans ce modèle, les interactions entre les inclusions sont prises en compte mais de manière simplifiée, et par conséquent, ce modèle n'est valable que pour des fractions volumiques inférieures à 25%. Pour un composite élastique linéaire à deux phases avec des inclusions sphériques, le module de compressibilité équivalent  $k^{MT}$  et le module de cisaillement équivalent  $\mu^{MT}$  sont définis par les relations suivantes :

$$k^{MT} = k_m + \frac{P_i(k_i - k_m)k_m}{(1 - P_i)(k_i - k_m)3.k_m + k_m} + k_m \quad (2.84)$$

$$\mu^{MT} = \mu_m + \frac{P_i(\mu_i - \mu_m)\mu_m}{(1 - P_i)(\mu_i - \mu_m) \frac{6(k_m + 2.\mu_m)}{5(3.k_m + 4.\mu_m)} + \mu_m} \quad (2.85)$$

Dans le cas de particules infiniment rigides, les estimations de *Mori-Tanaka* coïncident avec les bornes inférieures d'*Hashin-Shtrikman*.

### 2.3.3 Encadrement analytique

Nous allons maintenant nous concentrer sur les bornes rigoureuses qui peuvent être définies en se basant sur les principes variationnels et les informations statistiques sur la morphologie du matériau. Les propriétés effectives sont comprises entre deux de ces limites. Une limite analytique est considérée comme optimale si sa définition utilise toutes les données statistiques disponibles. Nous allons examiner les matériaux à  $n$  phases, bien que chaque borne sera spécialisée pour les matériaux à deux phases.

#### 2.3.3.1 Bornes d'ordre zéro

Considérons un matériau hétérogène multiphasique, sa propriété équivalente  $Z^H$  est bornée entre la propriété  $Z_d$  de la phase la plus dure et la propriétés  $Z_t$  de la phase la plus tendre telle que :

$$Z_t \leq Z^H \leq Z_d \quad (2.86)$$

Pour les modules de compressibilité  $k$  et de cisaillement  $\mu$  on aura :

$$k_t \leq k^H \leq k_d \quad (2.87)$$

$$\mu_t \leq \mu^H \leq \mu_d \quad (2.88)$$

Ces bornes sont les plus simples, car elles ne prennent en considération aucune information concernant la microstructure.

#### 2.3.3.2 Bornes du premier ordre

– *Borne supérieure de Voigt* [Voigt, 1889]

La borne de *Voigt* résulte d'une approche en déformation qui suppose que la déformation est constante dans toutes les phases et égale à la déformation macroscopique imposée  $E_{ij}$ :

$$\langle \varepsilon_{ij}(x) \rangle = E_{ij} \quad (2.89)$$

Le tenseur de localisation de la déformation est réduit partout au tenseur unité :

$$A_{ij}(x) = I_{ij} \quad (2.90)$$

Donc, l'expression du tenseur des rigidités équivalent sera :

$$C_{ijkl}^{Voigt} = \sum_{ph=1}^N P_{ph} (c_{ijkl})_{ph} \quad (2.91)$$

La borne de *Voigt* [Voigt, 1889] correspond au modèle en parallèle du composite pour lequel on considère les déformations uniformes dans le matériau. On obtient les relations suivantes reliant les fractions volumiques et les modules d'élasticité de chacune des phases :

$$k^{Voigt} = \sum_{ph=1}^N P_{ph} \cdot k_{ph} \quad (2.92)$$

$$\mu^{Voigt} = \sum_{ph=1}^N P_{ph} \cdot \mu_{ph} \quad (2.93)$$

Pour un matériau biphasé de type matrice-inclusions, ces expressions se réduisent à :

$$k^{Voigt} = P_m \cdot k_m + P_i \cdot k_i \quad (2.94)$$

$$\mu^{Voigt} = P_m \cdot \mu_m + P_i \cdot \mu_i \quad (2.95)$$

– **Borne inférieure de Reuss** [Reuss, 1929]

La borne de *Reuss* est l'approche en contrainte qui considère que celle-ci est constante dans toutes les phases et est égale à la contrainte macroscopique imposée  $\Sigma_{ij}$ .

$$\langle \sigma_{ij}(x) \rangle = \Sigma_{ij} \quad (2.96)$$

Le tenseur de localisation de contrainte est réduit partout au tenseur unité :

$$B_{ijkl}(x) = I_{ijkl} \quad (2.97)$$

Donc, l'expression du tenseur des souplesses équivalent sera :

$$S_{ijkl}^{Voigt} = \sum_{ph=1}^N P_{ph} (c_{ijkl})_{ph}^{-1} \quad (2.98)$$

La borne de *Reuss* correspond au modèle en série du composite pour lequel on considère les contraintes uniformes dans le matériau. On obtient les relations suivantes reliant les fractions volumiques et les modules d'élasticité de chacune des phases :

$$\frac{1}{k^{\text{Reuss}}} = \sum_{ph=1}^N P_{ph} \cdot \frac{1}{k_{ph}} \quad (2.99)$$

$$\frac{1}{\mu^{\text{Reuss}}} = \sum_{ph=1}^N P_{ph} \cdot \frac{1}{\mu_{ph}} \quad (2.100)$$

Pour un matériau biphasé de type matrice-inclusions, ces expressions se réduisent à :

$$k^{\text{Reuss}} = \frac{k_m k_i}{P_i k_m + P_m k_i} \quad (2.101)$$

$$\mu^{\text{Reuss}} = \frac{\mu_m \mu_i}{P_i \mu_m + P_m \mu_i} \quad (2.102)$$

*Voigt* et *Reuss* donnent deux bornes supérieure et inférieure du comportement équivalent. Ces bornes, associées à des lois de mélanges, sont des bornes du premier ordre. Elles n'admettent aucune information concernant la microstructure en dehors des fractions volumiques de chacun des constituants.

### 2.3.3.3 Bornes du second ordre [Dirrenberger, 2012]

Dans le cas où la répartition des phases est supposée isotrope au sein du matériau, il existe des bornes plus resserrées que les bornes de *Voigt* et *Reuss* dites bornes *d'Hashin-Shtrikman* [Hashin et Shtrikman, 1963]. Le schéma de *Hashin-Shtrikman-Walpole* (H.S.W) est le même que pour la méthode auto-cohérente où le matériau homogène équivalent entourant les différents constituants est remplacé par un matériau de comparaison. Si le matériau de comparaison est plus « dur », on retrouve la borne supérieure de la rigidité du composite, par contre, si le matériau de comparaison est plus « souple », on aboutit à la borne inférieure de la rigidité du composite.



Pour un matériau multiphasé et si le module le plus faible prend l'indice 1 et le plus fort prend l'indice  $n$  (On suppose donc que  $k_{N-1} \leq k_N$  et  $\mu_{N-1} \leq \mu_N$ ) les bornes de *Hashin-Shtrikman* sont définies par :

$$k^{HS-} = k_1 + \frac{B_1}{1 + \alpha_1 B_1} \quad (2.103)$$

$$k^{HS+} = k_N + \frac{B_N}{1 + \alpha_N B_N} \quad (2.104)$$

où  $\alpha_1$ ,  $\alpha_N$ ,  $B_1$  et  $B_N$  sont exprimés par :

$$\alpha_1 = \frac{3}{3k_1 + 4\mu_1} \quad (2.105)$$

$$\alpha_N = \frac{3}{3k_N + 4\mu_N} \quad (2.106)$$

et

$$B_1 = \sum_{ph=2}^N \frac{P_{ph}}{\frac{1}{k_{ph} - k_1} - \alpha_1} \quad (2.107)$$

$$B_N = \sum_{ph=1}^N \frac{P_{ph}}{\frac{1}{k_{ph} - k_N} - \alpha_N} \quad (2.108)$$

avec  $P_{ph}$  la fraction volumique de la phase.

On obtient l'encadrement suivant pour le module de compressibilité  $k^H$  homogénéisé :

$$k^{HS-} \leq k^H \leq k^{HS+} \quad (2.109)$$

– Le module de cisaillement  $\mu$  :

$$\mu^{HS-} = \mu_1 + \frac{1}{2} \left( \frac{D_1}{1 + \beta_1 D_1} \right) \quad (2.110)$$

$$\mu^{HS+} = \mu_N + \frac{1}{2} \left( \frac{D_N}{1 + \beta_N D_N} \right) \quad (2.111)$$

où  $\beta_1$ ,  $\beta_N$ ,  $D_1$  et  $D_N$  sont exprimés par :

$$\beta_1 = \frac{3(k_1 + 2\mu_1)}{5\mu_1(3k_1 + 4\mu_1)} \quad (2.112)$$

$$\beta_N = \frac{3(k_N + 2\mu_N)}{5\mu_N(3k_N + 4\mu_N)} \quad (2.113)$$

$$D_1 = \sum_{ph=2}^N \frac{P_{ph}}{\frac{1}{2(\mu_{ph} - \mu_1)} - \beta_1} \quad (2.114)$$

$$D_N = \sum_{ph=2}^{N-1} \frac{P_{ph}}{\frac{1}{2(\mu_{ph} - \mu_N)} - \beta_N} \quad (2.115)$$

On obtient l'encadrement suivant pour le module de cisaillement homogénéisé  $\mu^H$  :

$$\mu^{HS-} \leq \mu^H \leq \mu^{HS+} \quad (2.116)$$

Pour le cas d'un matériau biphasé à 3 dimensions, les deux modules sont exprimés par :

$$k^{HS-} = \frac{1}{\frac{P_i}{(k_i + \frac{4\mu_i}{3})} + \frac{P_m}{(k_m + \frac{4\mu_m}{3})}} - \frac{4\mu_i}{3} \quad (2.117)$$

$$k^{HS+} = \frac{1}{\frac{P_i}{(k_i + \frac{4}{3\mu_i})} + \frac{P_m}{(k_m + \frac{4}{3\mu_m})}} - \frac{4\mu_i}{3} \quad (2.118)$$

Le module de cisaillement :

$$\mu^{HS-} = \mu_m + \frac{P_i}{\frac{1}{(\mu_i - \mu_m)} + \frac{2(k_m + 2\mu_m).P_m}{5\mu_m(k_m + \frac{4}{3}.\mu_m)}} \quad (2.119)$$

$$\mu^{HS+} = \mu_i + \frac{P_m}{\frac{1}{(\mu_m - \mu_i)} + \frac{2(k_i + 2\mu_i).P_i}{5\mu_i(k_i + \frac{4}{3}.\mu_i)}} \quad (2.120)$$

et pour le cas 2 dimensions, les deux modules sont exprimés par :

– Le module de compressibilité :

$$k^{HS-} = k_m + \frac{P_i}{\frac{1}{(k_i - k_m)} + \frac{3.P_m}{(3.k_m + 4.\mu_m)}} \quad (2.121)$$

$$k^{HS+} = k_i + \frac{P_m}{\frac{1}{(k_m - k_i)} + \frac{3.P_i}{(3.k_i + 4.\mu_i)}} \quad (2.122)$$

– Le module de cisaillement :

$$\mu^{HS-} = \mu_m + \frac{P_i}{\frac{1}{(\mu_i - \mu_m)} + \frac{6(k_m + 2\mu_m).P_m}{5\mu_m(3.k_m + 4.\mu_m)}} \quad (2.123)$$

$$\mu^{HS+} = \mu_i + \frac{P_m}{\frac{1}{(\mu_m - \mu_i)} + \frac{6(k_i + 2\mu_i).P_i}{5\mu_i(3.k_i + 4.\mu_i)}} \quad (2.124)$$

A noter que pour une distribution isotrope d'inclusions sphériques dures diluées dans une matrice molle, la borne inférieure de *Hashin et Shtrikman* est équivalente à l'estimation de *Mori-Tanaka* [Mori et Tanaka, 1973].

## 2.4 Estimations analytiques des propriétés thermiques

De nombreux modèles analytiques permettent la détermination de la conductivité thermique effective  $\lambda_{eff}$  en fonction des conductivités thermiques des constituants et de leurs fractions volumiques. Dans le cas d'un matériau biphasé de type matrice inclusions, de conductivités thermiques  $\lambda_1$  et  $\lambda_{ph}$  de la matrice et de l'inclusion respectivement, les modèles les plus couramment utilisés sont présentés dans ce qui suit.

## 2.4.1 Modèles analytiques de changement d'échelles

### 2.4.1.1 Problème de l'inclusion d'Eshelby

Par analogie à l'élasticité, la solution du problème d'inhomogénéité d'*Eshelby* constitue une plateforme pour la construction des différents schémas d'estimation de la conductivité thermique effective.

### 2.4.1.2 Schéma des distributions diluées

Dans ce cas, la fraction volumique est considérée faible et les interactions entre les différentes hétérogénéités (phases) ne sont pas prises en compte. En conséquence, le tenseur de concentration moyen de chaque phase  $ph$  est donné par :

$$a_{ph} = \langle [I + (\lambda_{ph} - \lambda_1).H_{ph}]^{-1} \rangle \quad (2.125)$$

où  $H_i$  est le tenseur de HILL.

L'estimation des vecteurs de la conductivité thermique homogène sera exprimée par :

$$\lambda^{dl} = \lambda_1 + \sum_{ph=2}^N P_{ph}(\lambda_{ph} - \lambda_1).a_{ph} \quad (2.126)$$

### 2.4.1.3 Modèle auto-cohérent

Dans cette méthode, pour tenir compte de l'interaction entre les constituants du milieu hétérogène, on suppose que le milieu entourant chaque inclusion est un milieu infini possédant les caractéristiques du matériau homogénéisé recherché.

En supposant que le milieu équivalent soit soumis au gradient thermique homogène au contour, on obtient :

$$\langle \nabla T \rangle_{ph} = a_{ph}^{AC}.E \quad (2.127)$$

avec

$$a_{ph}^{AC} = \langle [I + (\lambda_{ph} - \lambda^{AC}).H_{ph}^{AC}]^{-1} \rangle \quad (2.128)$$

L'estimation des vecteurs de la conductivité thermique homogène est exprimée par :

$$\lambda^{AC} = \lambda_1 + \sum_{ph=2}^N P_{ph} (\lambda_{ph} - \lambda_1) \cdot a_{ph}^{AC} \quad (2.129)$$

#### 2.4.1.4 Schéma de Mori-Tanaka

Pour tenir compte de l'interaction des inclusions, le schéma de *Mori-Tanaka* [Mori et Tanaka, 1973] est utilisé. Le principe de ce schéma est de considérer l'inhomogénéité ellipsoïdale immergée dans la matrice soumise à un gradient thermique fictif  $G^0$ .

La solution du problème de l'inhomogénéité permet d'écrire :

$$\langle \nabla T \rangle_m = G^0 \quad (2.130)$$

$$\langle \nabla T \rangle_{ph} = a_{ph} G^0 \quad (2.131)$$

et en prenant en compte la valeur moyenne  $\langle \nabla T \rangle = G$ , on obtient la relation entre  $G_0$  et  $G$ .

$$G^0 = a_{int}^{MT} G \quad (2.132)$$

avec :

$$a_{int}^{MT} \left[ \left( 1 - \sum_{ph=2}^N P_{ph} \right) I + \sum_{ph=2}^N P_{ph} \cdot a_{ph} \right]^{-1} \quad (2.133)$$

Des équations 1.131 et 1.132, on obtient le tenseur de localisation de la phase «  $ph$  » comme :

$$a_{ph}^{MT} = a_{ph} \cdot a_{int}^{MT} \quad (2.134)$$

où :

$a_{ph}^{MT}$  est le tenseur de localisation de *Mori-Tanaka*

$a_{ph}$  est le tenseur de localisation de chaque phase

$a_{int}^{MT}$  est le tenseur de localisation de *Mori-Tanaka* intermédiaire.

L'estimation des vecteurs de la conductivité thermique homogène est exprimée par :

$$\lambda^{MT} = \lambda_1 + \sum_{ph=2}^N P_{ph} (\lambda_{ph} - \lambda_1) \cdot a_{ph} \left[ \left( 1 - \sum_{ph=2}^N P_{ph} \right) \cdot I + \sum_{ph=2}^N P_{ph} \cdot a_{ph} \right]^{-1} \quad (2.135)$$

## 2.4.2 Estimations théoriques

Les estimations les plus utilisées dans la littérature, dans le domaine de la conductivité thermique, sont explicitement présentées dans ce qui suit :

### 2.4.2.1 Estimation de Maxwell-Garnett

*J.C Maxwell* [[Maxwell Garnett, 1904](#)] a donné une approximation de la conductivité thermique effective d'une seule inclusion sphérique intégrée dans une matrice infinie. Sur la base de ce résultat, *J.C Maxwell-Garnett* a proposé une extension de  $d$  dimension à  $i$  inclusions sphériques de conductivité  $\lambda_i$  et de fraction volumique  $P$  dans une matrice infinie de conductivité  $\lambda_m$ , en supposant aucune interaction entre les inclusions [[Maxwell Garnett, 1904](#)].

Ainsi, par superposition de la contribution de chaque inclusion, il en résulte :

$$\frac{\lambda^{MG} - \lambda_m}{\lambda^{MG} + (d-1)\lambda_m} = P_V^i \left( \frac{\lambda_i - \lambda_m}{\lambda_i + (d-1)\lambda_m} \right) \quad (2.136)$$

qui peut être écrite comme suit pour  $d = 3$

$$\lambda^{MG} = \lambda_m \frac{\lambda_i(1 + 2P_i) - \lambda_m(2P_i - 2)}{\lambda_m(2 + P_i) + \lambda_i(1 - P_i)} \quad (2.137)$$

et pour  $d = 2$

$$\lambda^{MG} = \lambda_m \frac{\lambda_i(1 + \lambda_m) + P_i(\lambda_i - \lambda_m)}{(\lambda_m + \lambda_i) - P_i(\lambda_i - \lambda_m)} \quad (2.138)$$

En effet, les équations 2.136 et 2.137 coïncident avec les limites optimales *Hashin-Shtrikman* qui sont introduites dans la section 2.7.3.3. Comme l'estimation de *Maxwell-Garnett* ne tient pas compte de l'interaction entre les particules, sa validité est limitée à de petites fractions volumiques.

#### 2.4.2.2 Modèle auto-cohérent de Bruggeman

*Bruggeman* a proposé dans [Bruggeman, 1935] un modèle auto-cohérent destiné à déterminer la conductivité effective  $\lambda^{AC}$  sur un support constitué de  $n$  particules sphériques de différentes conductivités  $\lambda^j$  et de  $j$  volumes fractions volumiques  $P_j$  :

$$\sum_{ph=1}^N P_{ph} \frac{\lambda_{ph} - \lambda^{AC}}{\lambda_{ph} + (d-1)\lambda^{AC}} = 0 \quad (2.139)$$

Dans le cas d'un matériau biphasé à  $d$  dimensions, la solution de l'équation 1.139 sera :

$$\lambda^{AC} = \frac{\alpha + \sqrt{\alpha^2 + 4(d-1)\lambda_1\lambda_2}}{2(d-1)} \quad (2.140)$$

avec

$$\alpha = \lambda_1 (d.P_1 - 1) + \lambda_2 (d.P_2 - 1) \quad (2.141)$$

L'équation auto-cohérente a été étendue au cas à  $d$  dimensions d'une distribution d'inclusions sphériques de conductivités et de fractions volumiques  $P_i$  diluées dans une matrice de conductivité  $\lambda_m$  :

$$\frac{P_i(\lambda_i - \lambda^{AC})}{d.\lambda^{AC}} + \frac{(1 - P_i)(\lambda_m - \lambda^{AC})}{\lambda_m + (d-1)\lambda^{AC}} = 0 \quad (2.142)$$

Comme toutes les phases sont traitées de manière identique dans cette estimation auto-cohérente, son utilisation pour les composites fortement contrastés n'est pas recommandée. Pour le cas d'un matériau biphasé à deux dimensions, le modèle auto-cohérent est solution de l'équation :

$$\frac{\lambda_m - \lambda^{AC}}{\lambda_m + 2\lambda^{AC}} P_m + \frac{\lambda_i + \lambda^{AC}}{\lambda_i - +2\lambda^{AC}} P_i = 0 \quad (2.143)$$

### 2.4.3 Encadrements analytiques des propriétés thermiques

Comme pour le cas des propriétés élastiques, les bornes théoriques peuvent être définies pour la conductivité thermique sur la base des principes variationnels et sur les informations statistiques sur la morphologie du matériau. Nous allons examiner les matériaux à  $n$  phases, bien que chaque borne sera citée explicitement pour les matériaux à deux phases.

#### 2.4.3.1 Bornes d'ordre 0

Si on considère que  $\lambda_1$  est la conductivité la moins conductrice et  $\lambda_2$  la conductivité la plus conductrice d'un matériau composite, les bornes d'ordre 0 correspondent aux propriétés de chacune des phases. Le tenseur de conductivité homogénéisé est alors délimité par les conductivités de la phase la plus conductrice  $\lambda_2$  et la phase la moins conductrice  $\lambda_1$  comme suit :

$$\lambda_1 \leq \lambda^H \leq \lambda_2 \quad (2.144)$$

Ces bornes ne prennent pas la fraction volumique en compte. En fait, ils sont d'un intérêt limité, car ils ne donnent aucune estimation utile des propriétés homogénéisées.

#### 2.4.3.2 Bornes du premier ordre

Si les informations concernant la fraction volumique sont disponibles, leur utilisation permet l'obtention des bornes de *Wiener* [Wiener, 1912]. Elles correspondent respectivement à la moyenne géométrique et arithmétique des conductivités  $\lambda_j$  des phases  $j$ , pondérées par les fractions volumiques  $P_j$  telles que :

$$\lambda_{Wiener+} = \sum_{ph=1}^N P_{ph} \lambda_{ph} \quad (2.145)$$



Les expressions d'un matériau biphasé sont données par :

$$\lambda_{Wiener+} = P_1\lambda_1 + P_2\lambda_2 \quad (2.146)$$

$$\lambda_{Wiener-} = \frac{\lambda_1\lambda_2}{P_1\lambda_1 + P_2\lambda_2} \quad (2.147)$$

La propriété effective est alors comprise entre :

$$\lambda_{Wiener-} \leq \lambda^H \leq \lambda_{Wiener+} \quad (2.148)$$

### 2.4.3.3 Bornes du deuxième ordre

*Hashin et shtrikman* [Hashin et Shtrikman, 1962] proposent un encadrement du second ordre plus performant des propriétés d'un matériau multiphasé. Pour un matériau isotrope à  $d$  dimensions et constitué de  $N$  phases isotropes où  $A_{ph}$  sont les conductivités thermiques et si la conductivité la plus basse est notée  $A_1$  et la plus haute par  $A_N$  alors les expressions de la borne supérieure  $A^{HS+}$  et la borne inférieure  $A^{HS-}$  sont données par :

$$\lambda^{HS-} = \left( \sum_{ph=2}^N P_{ph} (\alpha_1 + \lambda_{ph})^{-1} - \alpha_1 \right) \quad (2.149)$$

$$\lambda^{HS+} = \left( \sum_{ph=2}^N P_{ph} (\alpha_N + \lambda_{ph})^{-1} - \alpha_N \right) \quad (2.150)$$

avec  $\alpha_1$  et  $\alpha_N$  données par :

$$\alpha_1 = P_1\lambda_1 + P_{ph}\lambda_{ph} - \frac{P_1P_{ph}(\lambda_{ph} - \lambda_1)^2}{\lambda_{ph}P_1 + \lambda_1P_{ph} + (d-1)\lambda_1} \quad (2.151)$$

$$\alpha_N = P_{ph}\lambda_{ph} + P_N\lambda_N - \frac{P_{ph}P_N(\lambda_N - \lambda_{ph})^2}{\lambda_NP_{ph} + \lambda_{ph}P_N + (d-1)\lambda_{ph}} \quad (2.152)$$

où  $P_{ph}$  est la fraction volumique de la phase  $ph$ .

La conductivité thermique effective est alors bornée par :

$$\lambda^{HS-} \leq \lambda^H \leq \lambda^{HS+} \quad (2.153)$$

Pour un matériau biphasé à 3 dimensions les expressions des bornes sont données par :

$$\lambda^{HS-} = \lambda_1 + \frac{P_2}{\frac{1}{\lambda_2 - \lambda_1} + \frac{P_1}{3\lambda_1}} \quad (2.154)$$

$$\lambda^{HS+} = \lambda_2 + \frac{P_1}{\frac{1}{\lambda_1 - \lambda_2} + \frac{P_2}{3\lambda_2}} \quad (2.155)$$

Dans le cas 2 dimensions, il suffit de remplacer le 3 dans les expressions précédentes par un 2 pour obtenir :

$$\lambda^{HS-} = \lambda_1 + \frac{P_2}{\frac{1}{\lambda_2 - \lambda_1} + \frac{P_1}{2\lambda_1}} \quad (2.156)$$

$$\lambda^{HS+} = \lambda_2 + \frac{P_1}{\frac{1}{\lambda_1 - \lambda_2} + \frac{P_2}{2\lambda_2}} \quad (2.157)$$

## 2.5 Synthèse

Le deuxième chapitre de cette thèse a été consacré à la présentation de l'approche de l'homogénéisation des milieux hétérogènes. Commencant par les techniques de l'homogénéisation et leurs différentes méthodes, passant par la suite aux différentes conditions aux limites spécifiques à ces problèmes d'homogénéisation, arrivant enfin aux différents estimateurs et bornes analytiques qui, par comparaison, permettent la validation des différents résultats de l'homogénéisation numérique. Tous ces rappels serviront de base théorique pour les différentes applications des chapitres 3 et 4.

# Chapitre 3

## Chapitre 3

# 3. Evaluation des propriétés élastiques effectives des microstructures à plusieurs morphologies.

*Aujourd'hui, l'évolution de la simulation numérique a permis le déploiement d'un grand nombre de méthodes de changement d'échelles, dites méthodes d'homogénéisation. Afin d'étudier l'influence de la forme des inclusions dans une matrice d'un matériau hétérogène, on présente à travers ce chapitre une étude dans laquelle on va évaluer les propriétés élastiques effectives des microstructures virtuelles avec des inclusions à morphologies (géométries) multiples.*

## 3.1 Introduction.

La détermination des propriétés effectives des matériaux composites est l'un des sujets de recherche les plus importants de nos jours. Pour dénouer ce problème, un nombre important de théories de la micromécanique classique ont été élaborées et publiées dans la littérature, à citer [Hashin et Shtrikman, 1963]; [Christensen et Lo, 1979]; [Vinson et Sierakowski, 1987]; [Gibson, 1994] et [Kanit et al., 2003]. Initialement introduites pour estimer les constantes moyennes de polycristaux, les approximations de Voigt et Reuss sont les modèles les plus simples et les plus utilisés pour encadrer les propriétés élastiques effectives d'un composite. Par la suite et en utilisant des principes variationnels, Hashin et Shtrikman [Hashin et Shtrikman, 1963] ont établi des bornes plus serrées et plus précises que celles de Voigt et Reuss permettant ainsi un meilleur encadrement des propriétés effectives.

L'homogénéisation numérique constitue la deuxième catégorie de l'homogénéisation, elle consiste à utiliser des techniques de simulation numérique sur des échantillons de microstructures afin d'estimer leurs propriétés effectives à partir de leurs lois de comportement et des distributions spatiales de leurs différents composants. Elle est liée directement à la détermination de la taille du volume élémentaire représentatif (*V.E.R*) qui a été largement étudié avec des outils numériques et statistiques, [Sab, 1992]; [Ostoja-Starzewski, 1993]; [Gusev, 1997]; [Terada et al., 1998]; [Ostoja-Starzewski, 1998]; [Kanit et al., 2003]; [Sab et Nedjar, 2005]; [Lachihab et Sab, 2008].

L'objectif principal de cette partie est l'évaluation des propriétés élastiques effectives, à citer le coefficient de compressibilité et le coefficient de cisaillement, de microstructures poreuses. Chaque microstructure étudiée est constituée d'une seule population d'inclusions, de même forme, distribuées aléatoirement dans une matrice. Pour cerner l'effet de la forme de l'inclusion sur les propriétés élastiques effectives, sept différentes formes géométriques sont étudiées. Vu que la fraction volumique est un autre paramètre important qui a une influence directe sur le comportement élastique effectif, trois cas sont mis en évidence pour chaque forme d'inclusion :  $P = 10\%$ ,  $P = 30\%$  et  $P = 50\%$ .

## 3.2 Représentation de la microstructure

### 3.2.1 Description de la microstructure

Les microstructures étudiées sont des microstructures virtuelles 2D à deux phases, contenant des distributions aléatoires des inclusions.

La *phase 2* est une matrice carrée englobant la *phase 1* représentant des inclusions poreuses, avec :

$$P_1 = P \quad (3.1)$$

et

$$P_2 = 1 - P \quad (3.2)$$

Où  $P_1$  et  $P_2$  sont les fractions volumiques de la *phase 1* et la *phase 2* respectivement.

Sept formes géométriques des inclusions sont considérées, à citer, la forme circulaire, carrée, triangulaire, pentagonale et elliptique (avec trois rapports de forme  $r = 1/2$ ,  $r = 1/3$  et  $r = 1/4$ ) figure 3.1. Le but du choix de ces différentes morphologies est de déterminer l'influence de la morphologie des inclusions sur les propriétés élastiques.

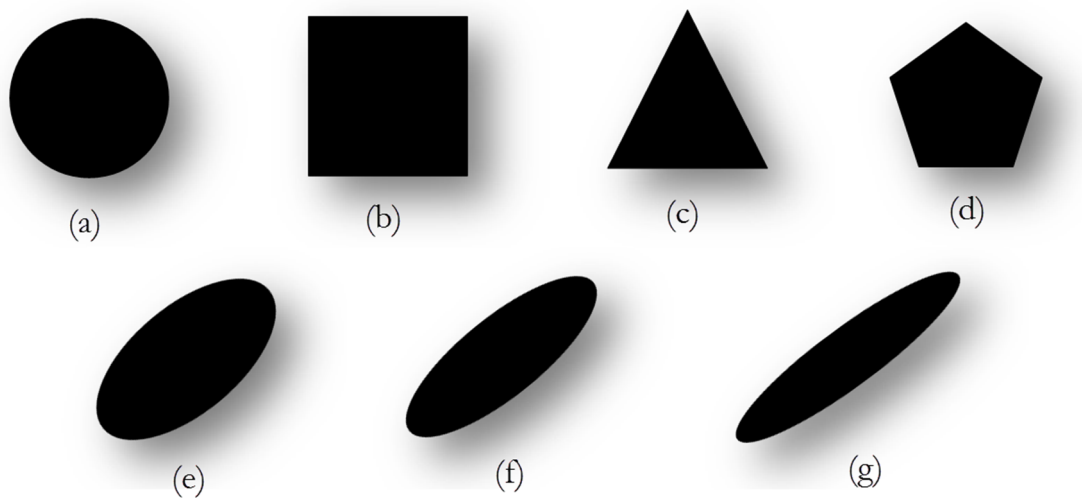


FIGURE 3.1. Différentes formes des pores dans les microstructures étudiées :  
 (a) Circulaire; (b) Carrée ; (c) Triangulaire ; (d) Pentagonale  
 (e) Elliptique ( $r = 1/2$ ) ; (f) Elliptique ( $r = 1/3$ ) ; (g) Elliptique ( $r = 1/4$ ).

Le matériau étudié est un matériau hétérogène biphasé. Chaque phase est considérée élastique linéaire et isotrope. La génération des microstructures aléatoires dans le plan est obtenue selon le processus de Poisson, voir [Jeulin et Ostoja-Starzewski, 2001].

Ce processus a été utilisé par [Kanit et al., 2003] pour la génération des microstructures aléatoires des mosaïques, puis par [Jean, 2009] pour la génération des microstructures des élastomères renforcés par le noir de carbone. L'intérêt des modèles est de permettre la simulation facile de nouveaux matériaux sans passer par les morphologies réelles obtenues par microscopes et tomographie.

On rappelle que le schéma Booléen est l'union des particules dans une matrice. Ce schéma, introduit par [Matheron, 1975], est bien adapté à la description d'une microstructure aléatoire avec une interconnexion des inclusions. Pour les microstructures virtuelles, nous présentons dans la figure 3.2 des exemples de morphologies générées à base de schéma Booléen et d'autres à base de schéma de sphères dures.

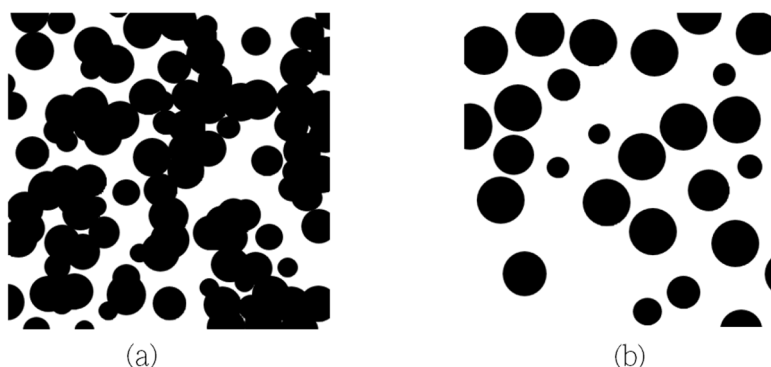


FIGURE 3.2. Microstructures aléatoires 2D :  
(a) schéma Booléen et (b) schéma de sphères dures.

Il apparaît que dans le modèle Booléen, il peut y avoir trois configurations différentes : (i) un contact des inclusions, (ii) une inter-pénétration des inclusions ou (iii) parfois aucun contact. À la différence d'un schéma de sphères dures dont lequel l'implantation des inclusions est contrôlée par une distance de répulsion entre deux centres voisins, le schéma Booléen est généré sans aucune distance de répulsion.

Parmi les algorithmes les plus utilisés pour la génération et pour la simulation des matériaux hétérogènes on trouve aussi, *Random Sequential Adsorption* (RSA). Celui-ci consiste à générer de façon aléatoire des particules sphériques et identiques d'une manière séquentielle. Parmi les travaux qui se basent sur cet algorithme on trouve par exemple, [Segurado et Llorca, 2002], [Kari et al., 2007a] et [Kari et al. 2007b] pour les particules sphériques, puis [Pierard et al., 2007] pour le cas des ellipses.

Des exemples de microstructures hétérogènes virtuelles (figures 3.3 et 3.4) générées par les deux algorithmes de la morphologie mathématique : RSA et le Processus de Poisson sont présentées dans la première partie de cette thèse [Kari et al., 2007b].

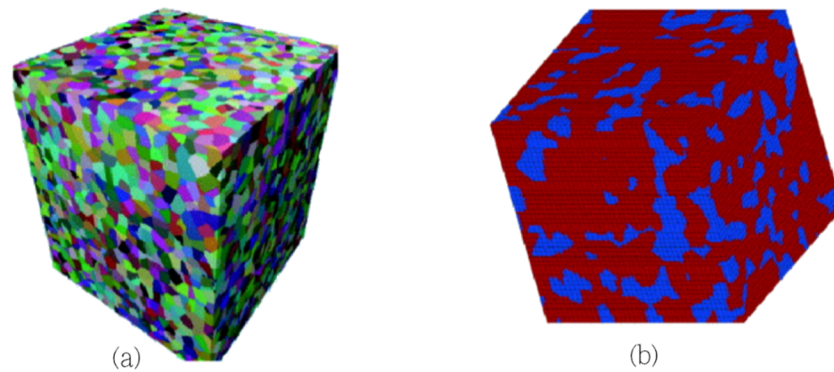


FIGURE 3.3. Mosaique de Voronoï générée par le processus de Poisson : a) microstructure avec 8000 grains et (b) maillage de la microstructure, Kanit (2003).

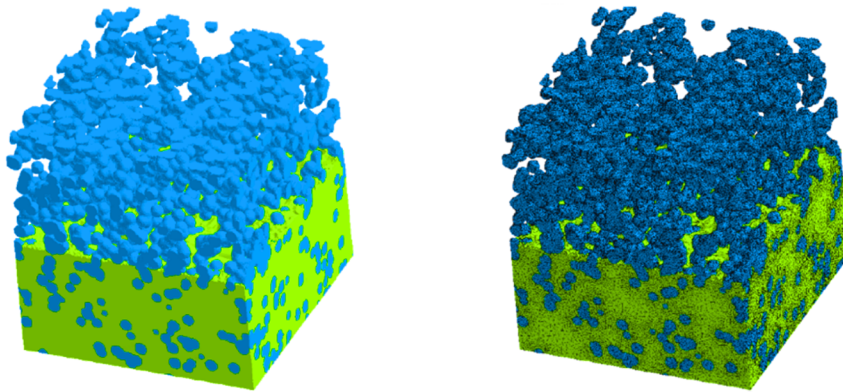


FIGURE 3.4. Microstructure virtuelle d'un élastomère chargé de particules, générée par le processus de Poisson et son maillage, Jean (2009).

Nous nous intéressons dans notre cas aux microstructures aléatoires générées virtuellement par le processus de Poisson. Les microstructures sont de type matrice-inclusions. Dans notre cas, nous avons réalisé des scripts sous MatLab pour la génération des microstructures en 2D. L'idée de ces scripts est basée sur l'algorithme du schéma d'addition séquentielle aléatoire (RSA).



Dans ce script, la position d'une première inclusion dans une surface carrée (cellule élémentaire) est tirée aléatoirement. La forme géométrique de l'inclusion est pilotée par son équation mathématique. La position de la deuxième inclusion est ensuite générée aléatoirement. Les inclusions suivantes sont ajoutées sans condition en suivant la même méthode, jusqu'à l'atteinte de la fraction volumique  $P$  désirée, le script est conditionné au départ par le nombre de figures à réaliser (réalisations). Les inclusions se chevauchent et s'interconnectent, il n'existe aucune condition de répulsion, de recouvrement ou d'orientation entre les inclusions.

Pour la détermination du VER par l'approche statistique de [Kanit et al., 2003], le nombre  $n$  de réalisations nécessaire, utilisé, pour chaque volume  $N$  est indiqué dans le tableau 3.1. Avec la résolution utilisée, la taille maximale du volume utilisée est de l'ordre de 1000 inclusions, au-delà de cette taille, la forme de la morphologie se détériore et s'éloigne de la forme géométrique considérée.

Nombre d'inclusions (N)	6	50	100	200	500	1000
Nombre de réalisations (n)	2500	1200	1152	277	35	25

Tableau 3.1 Nombre de réalisations nécessaire à la détermination du VER.

Les microstructures obtenues sont illustrées dans les figures 3.5 ci-dessous:  
avec  $(r)$  : est le rapport entre les deux rayons de l'ellipse.

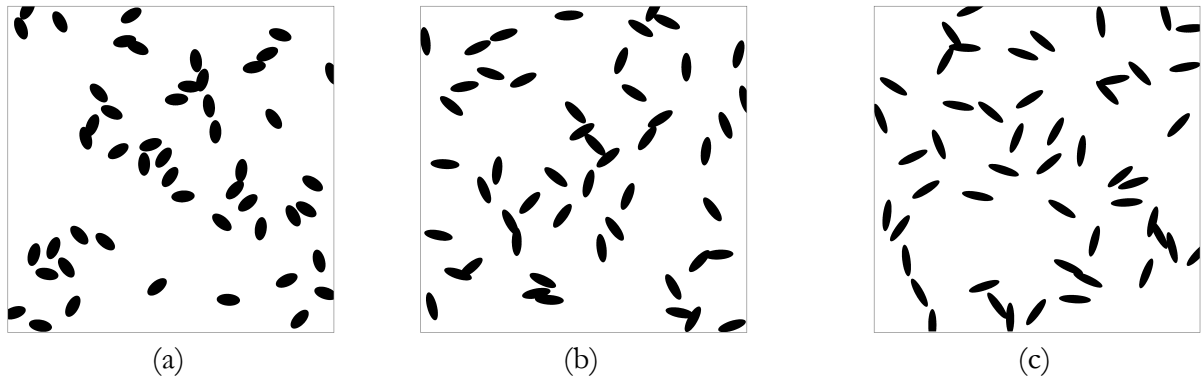


FIGURE 3.5. Microstructures à 50 inclusions pour une fraction  $P = 10\%$ .

(a) Ellipse  $r = \frac{1}{2}$  ; (b) Ellipse  $r = \frac{1}{3}$  et (c) Ellipse  $r = \frac{1}{4}$

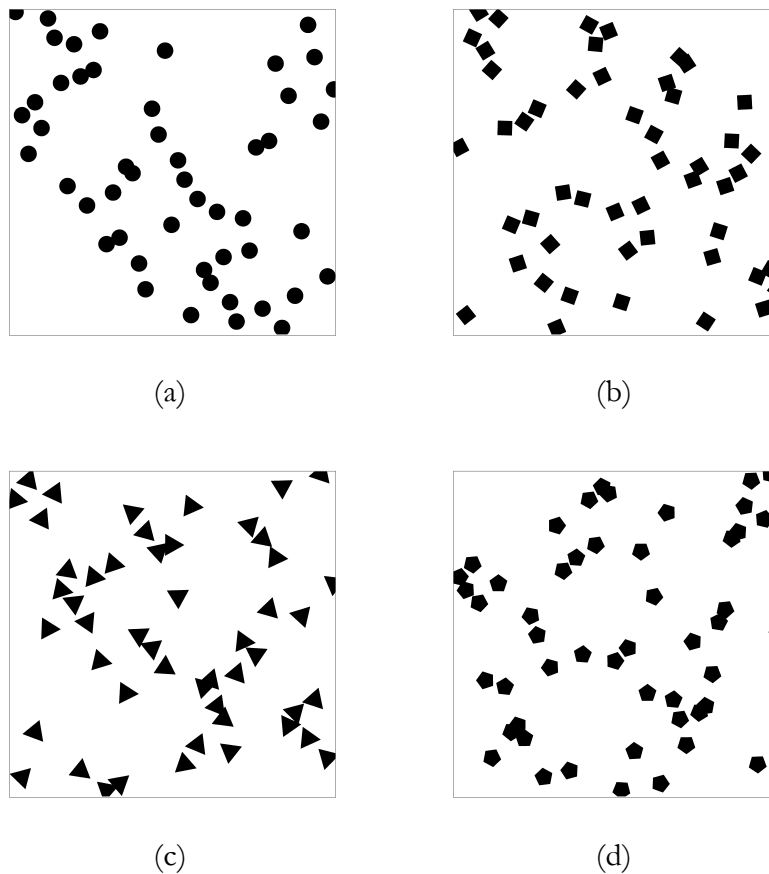


FIGURE 3.6. Microstructures à 50 inclusions pour une fraction  $P = 10\%$ .

(a) Cercle; (b) Carré; (c) Triangle et (d) Pentagone.

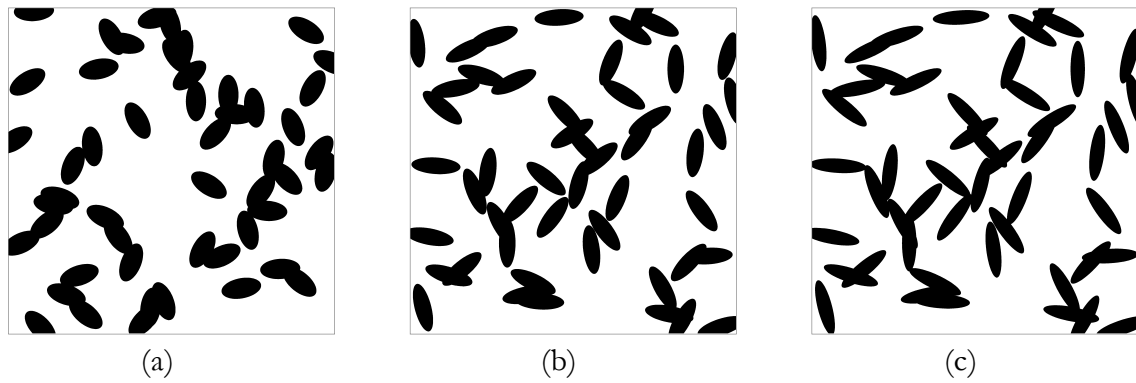


FIGURE 3.7. Microstructures à 50 inclusions pour  $P = 30\%$ .  
(a) Ellipse  $r = \frac{1}{2}$  ; (b) Ellipse  $r = \frac{1}{3}$  et (c) Ellipse  $r = \frac{1}{4}$

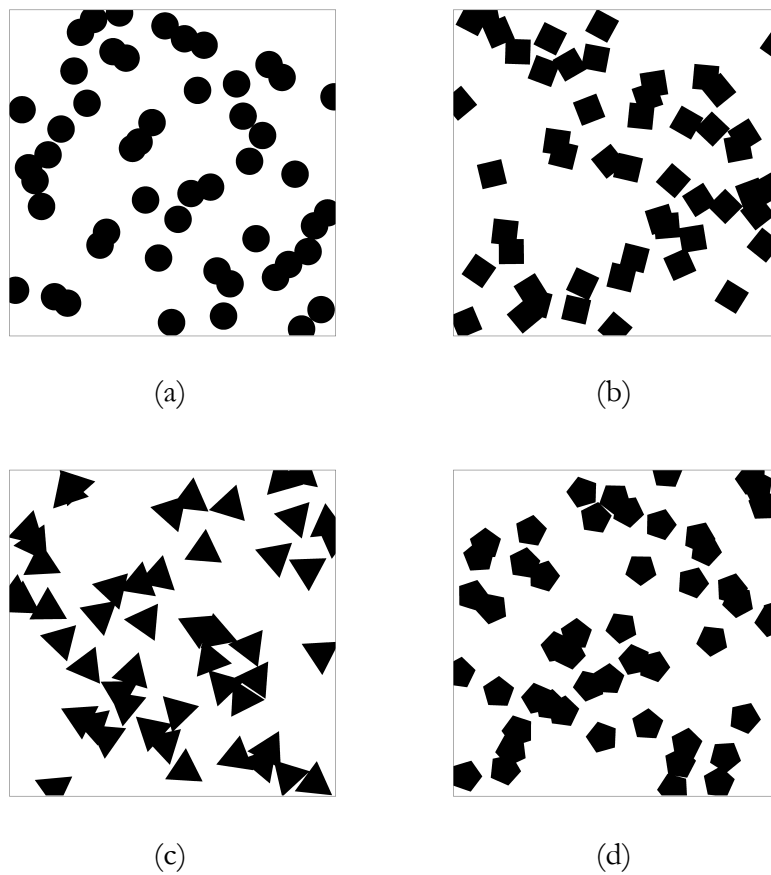
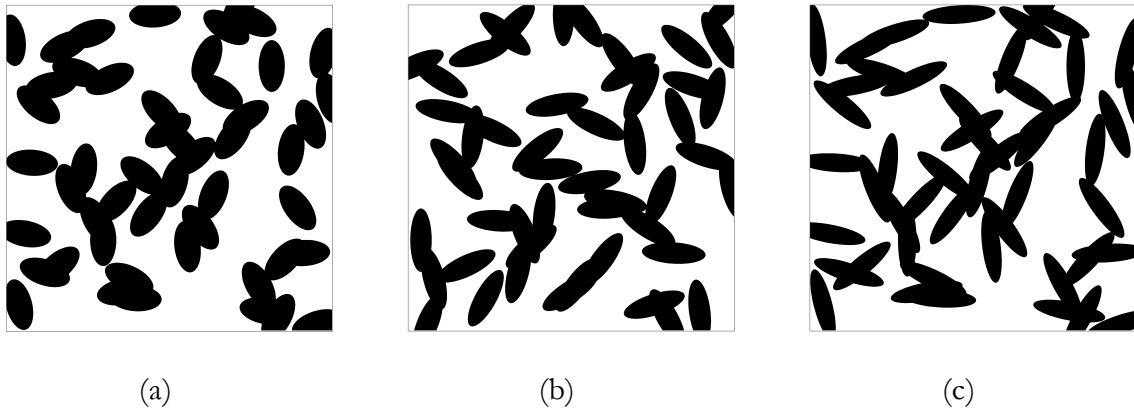
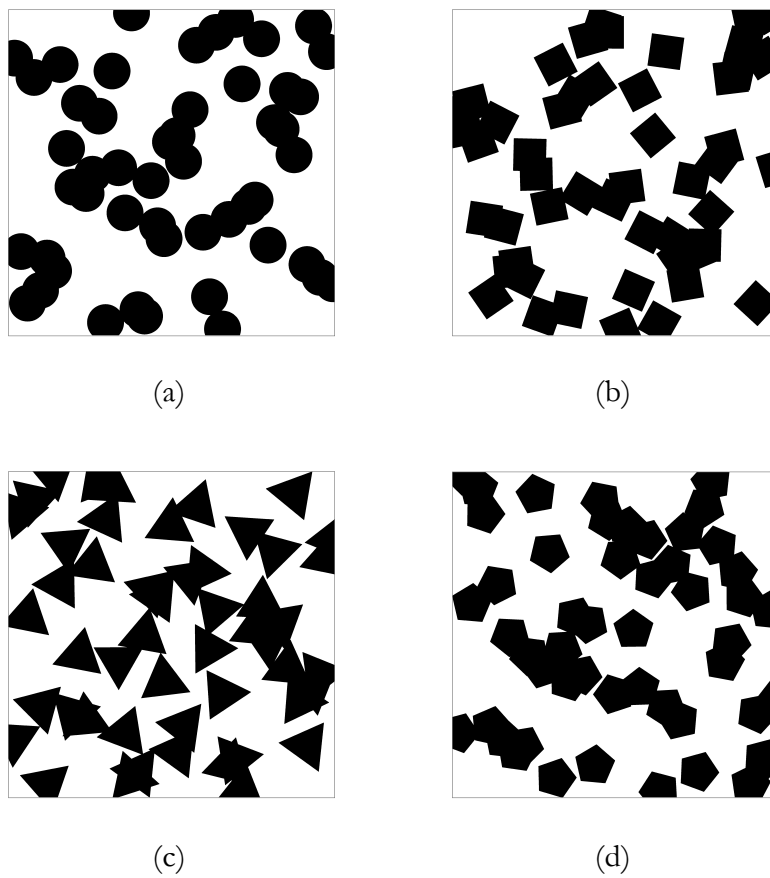


FIGURE 3.8. Microstructures à 50 inclusions pour une fraction  $P = 30\%$ .  
(a) Cercle; (b) Carré; (c) Triangle et (d) Pentagone.

FIGURE 3.9. Microstructures à 50 inclusions pour une fraction  $P = 50\%$ .(a) Ellipse  $r = \frac{1}{2}$  ; (b) Ellipse  $r = \frac{1}{3}$  et (c) Ellipse  $r = \frac{1}{4}$ FIGURE 3.10. Microstructures à 50 inclusions pour une fraction  $P = 50\%$ .

(a) Cercle; (b) Carré; (c) Triangle et (d) Pentagone.

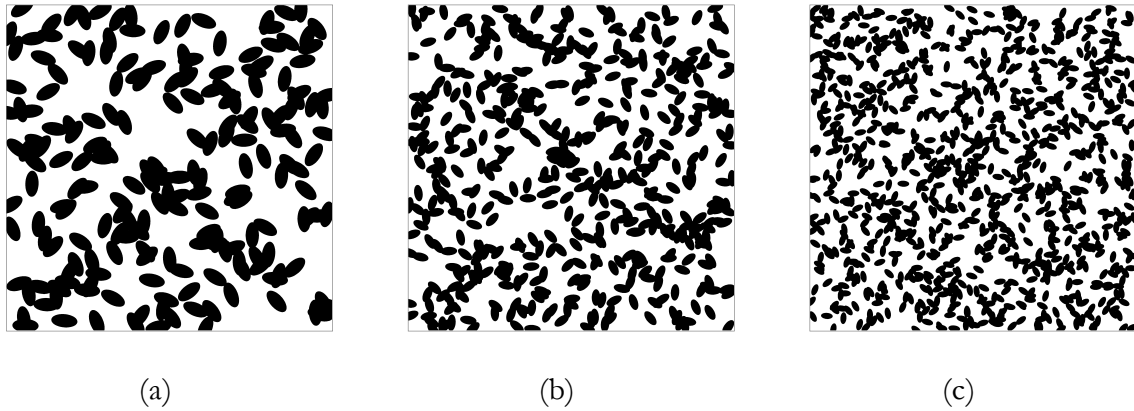


FIGURE 3.11. Microstructures à inclusions elliptiques  $r = \frac{1}{2}$  :  
(a) 200 inclusions; (b) 500 inclusions et (c) 1000 inclusions.

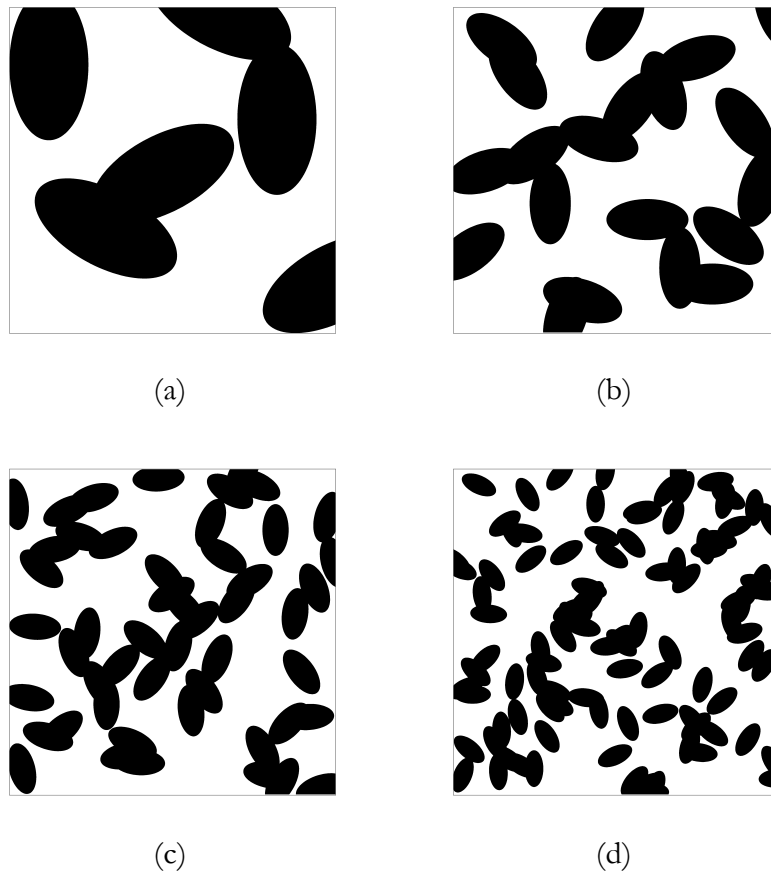


FIGURE 3.12. Microstructures à 50 inclusions elliptiques ( $r = \frac{1}{2}$ ) pour une fraction  $P = 30\%$ .  
(a) 6 inclusions; (b) 20 inclusions; (c) 50 inclusions et (d) 100 inclusions.

## 3.3 Outils numériques

### 3.3.1 Technique du maillage utilisé

Depuis son développement par Lippman [Lippmann et al., 1997], la technique du maillage régulier a été largement utilisée, pour l'homogénéisation des images réelles et virtuelles, par plusieurs auteurs dont [Kanit et al., 2003], [Khdir et al., 2013], [El-Moumen et al., 2013], [El-Moumen et al., 2014], [El-Moumen et al., 2015]. Elle consiste à superposer une grille EF régulière, figure 3.13 (a) sur l'image de la microstructure étudiée, figure 3.13 (b). La microstructure obtenue, figure 3.13 (c), est utilisée pour attribuer la propriété de la phase propre à chaque point d'intégration de ce maillage régulier en fonction de la couleur du pixel sous-jacent.

Il est à noter que l'élément utilisé ici est un élément fini quadratique à 4 nœuds avec 4 points d'intégration. L'avantage majeur de cette méthode réside dans la simplicité et la rapidité avec laquelle le maillage du milieu hétérogène est créé. De plus, la méthode est applicable à tout type de milieu hétérogène. L'inconvénient de cette technique est que la description des interfaces reste pauvre.

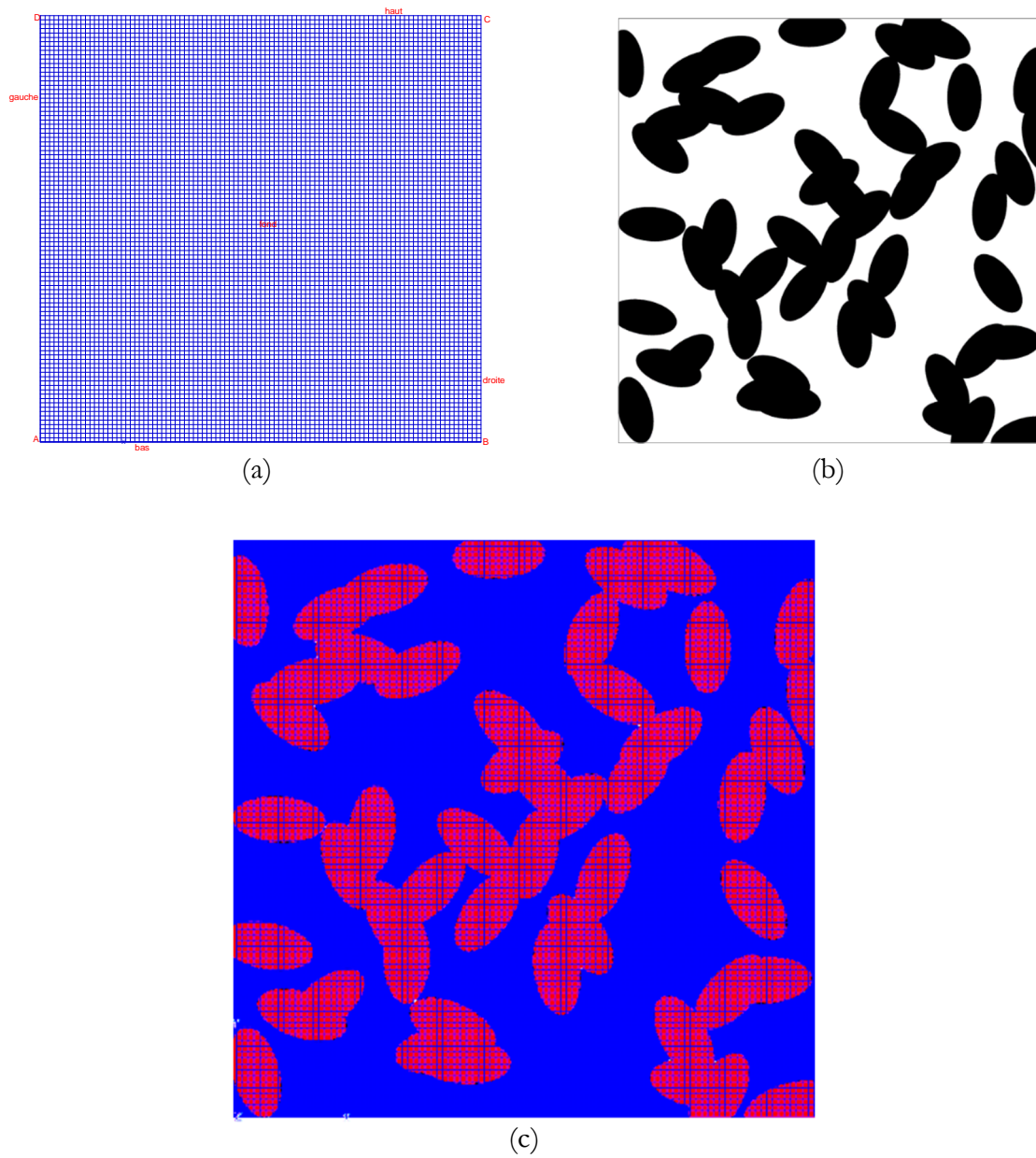


FIGURE 3.13. Principe du maillage régulier. (a) Grille régulière de densité 200 x 200 (Zmaster) ; (b) microstructure à 50 inclusions pour  $p^a = 50\%$  et  $r = 0,5$  et (c) Microstructure maillée avec 40000 EF.

### 3.3.2 Détermination de la densité du maillage

Un test de maillage est effectué afin de déterminer la grille de maillage optimale. Le calcul est effectué sur une microstructure (V.E.R) en changeant la densité du maillage. Le maillage retenu pour les calculs futurs est celui qui permet la détermination de la propriété apparente avec une bonne précision en un minimum de temps.

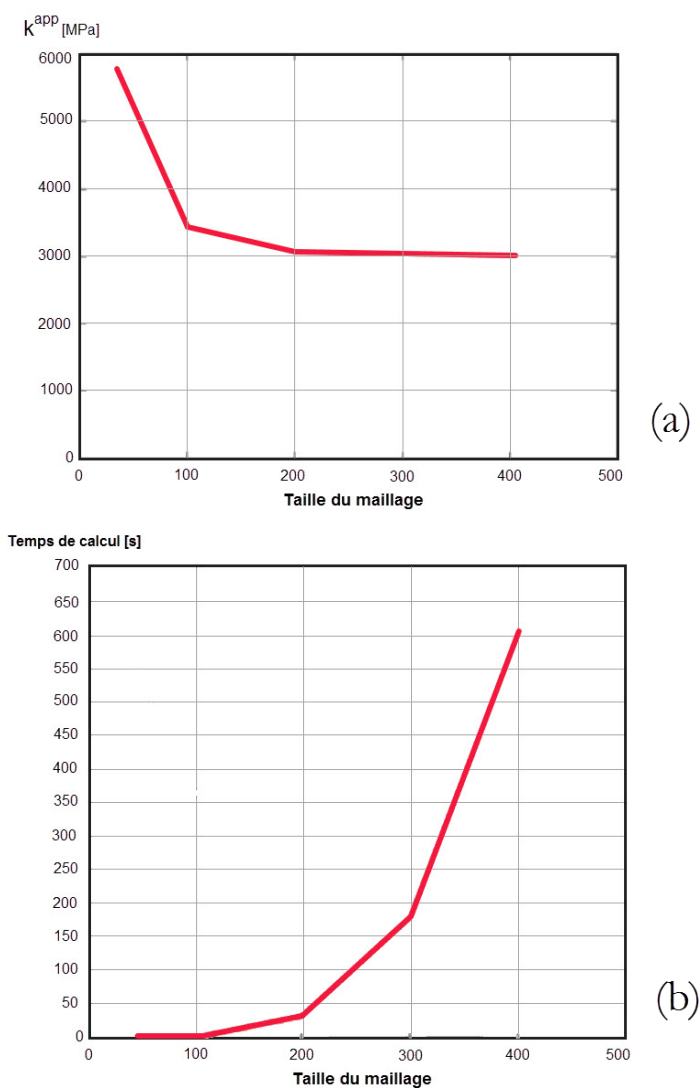


FIGURE 3.14. Densité de maillage, (a) Convergence du coefficient de compressibilité  $k$  en fonction de la densité du maillage. (b) Temps de calcul correspondant à chaque cas de maillage.

On constate d'après la figure 3.14 que le maillage 200 x 200 éléments est le maillage optimal et par conséquent il sera utilisé dans tous les calculs.



### 3.3.3 Propriétés physiques utilisées

Les modules de compressibilité ( $k_m, k_i$ ) et de cisaillement ( $\mu_m, \mu_i$ ) de la matrice et des inclusions d'un matériau biphasé à deux dimensions sont exprimés en fonction des modules d'Young et du coefficient de Poisson des deux phases par :

$$k_j = \frac{E_j}{2(1 + \nu_j)(1 - 2\nu_j)} \quad , \quad \mu_j = \frac{E_j}{2(1 + \nu_j)} \quad , \quad j = m, i \quad (3.3)$$

Les propriétés physiques : le module de Young  $E$ , le coefficient de Poisson  $\nu$ , le module de compressibilité  $k$  et le module de cisaillement  $\mu$  de la matrice et des inclusions, utilisées dans les simulations numériques, sont définies par :

Pour les inclusions :

$$(E_1, \nu_1, k_1, \mu_1) = (\simeq 0 \text{ MPa}, 0.49, \simeq 0 \text{ MPa}, \simeq 0 \text{ MPa}) \quad (3.4)$$

Pour la matrice :

$$(E_2, \nu_2, k_2, \mu_2) = (10000 \text{ MPa}, 0.3, 9615 \text{ MPa}, 3846 \text{ MPa}) \quad (3.5)$$

## 3.4. Propriétés élastiques apparentes et effectives

Les propriétés élastiques sont considérées, elles sont dites apparentes lorsqu'elles sont obtenues par des volumes  $V < V_{VER}$ . Une fois  $V \geq V_{VER}$ , ces propriétés apparentes convergent vers les propriétés effectives.

### 3.4.1 Fraction apparente et volume réel de la phase d'inclusion

L'objectif de cette partie est de présenter la relation entre la fraction volumique apparente  $p^a$  des microstructures contenant  $N$  inclusions réparties dans un composite sans interconnexion (microstructure 1), et la fraction volumique réelle  $P$  obtenue par le même  $N$  dans le cas de microstructures avec interconnexion (microstructure 2).

Il est évident que pour construire les deux fractions volumiques, on utilise la relation suivante :

$$p^a = N \frac{V_{inc}}{V_t} \quad (3.6)$$

avec  $V_{inc}$  le volume d'une inclusion et  $V_t$  le volume total du matériau hétérogène.

Dans le cas de la microstructure 1, avec une distance de répulsion ou sans chevauchement, la fraction volumique est  $P = p^a$ . Par contre, pour une microstructure avec chevauchement, la fraction volumique sera  $P \leq p^a$ .

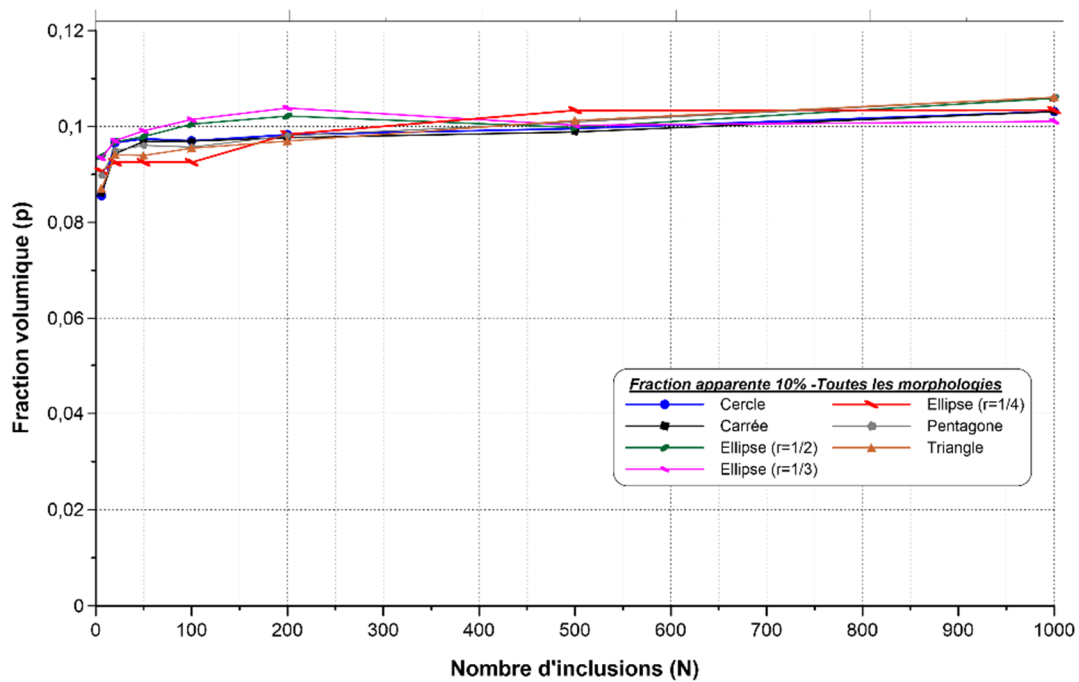
On note :

$p^a$  est générée en imposant une distance de répulsion.

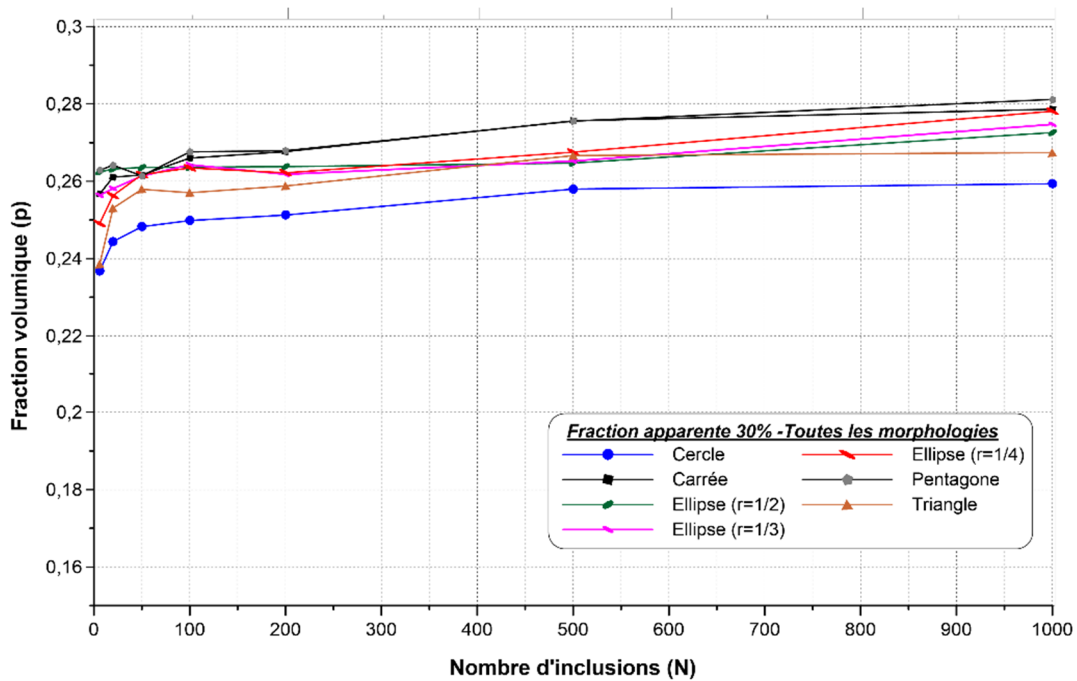
$P$  est générée sans aucune distance de répulsion.

Du fait qu'il n'existe pas de conditions de répulsion entre les inclusions, les probabilités possibles sont multiples dans une matrice de positionnement.

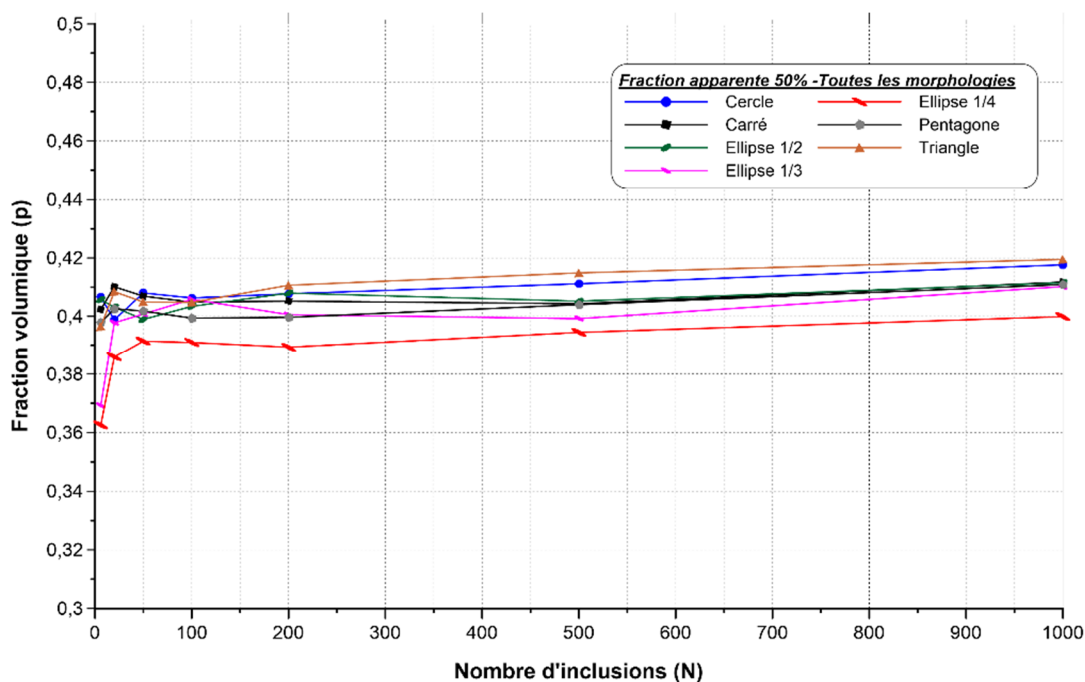
Afin de comparer les fractions volumiques apparentes et réelles  $p^a$  et  $P$ , nous avons testé plusieurs volumes en augmentant le nombre d'inclusions  $N$  de 6 à 1000 pour les fractions volumiques 10%, 30% et 50%.



(a)



(b)



(c)

FIGURE 3.15. Fraction volumique réelle  $P$  des inclusions pour :

(a)  $p^a = 10\%$ , (b)  $p^a = 30\%$ . et (c)  $p^a = 50\%$ .

Le tableau 3.2 montre les pertes de volume des inclusions pour les différentes fractions volumiques envisagées.

On peut écrire la relation entre  $p^a$  et  $P$  pour les trois cas comme suit :

$p^a = 10\%$	$p^a = 30\%$	$p^a = 50\%$
$P / p^a = 0.97$	$P / p^a = 0.87$	$P / p^a = 0.80$
$p^a = 1.02 P$	$p^a = 1.15 P$	$p^a = 1.25 P$

Tableau 3.2. Pertes de fractions volumiques des inclusions.

Cela signifie que quand le volume des inclusions est plus important, le chevauchement est plus perceptif. Cela montre qu'environ 20% du volume total des inclusions est interconnecté pour une fraction volumique de 50% souhaitée initialement. Ce résultat est très intéressant d'un point de vue pratique : par exemple, pour construire un composite réel avec une fraction volumique réelle  $P$ , il faut utiliser une fraction volumique apparente  $p^a$  égale à 1,25 fois  $P$  pour le cas de 50%.

### 3.4.2 Propriétés élastiques obtenues

Nous présentons, dans cette section, les résultats des simulations numériques obtenus pour des inclusions de forme circulaires avec trois fractions apparentes 10%, 30% et 50% :

### 3.4.2.1. Propriétés élastiques pour la fraction volumique apparente $p^a=10\%$

Nous présentons par la figure 3.18 quelques échantillons des différentes réalisations utilisées pour la détermination du volume élémentaire représentatif (VER).

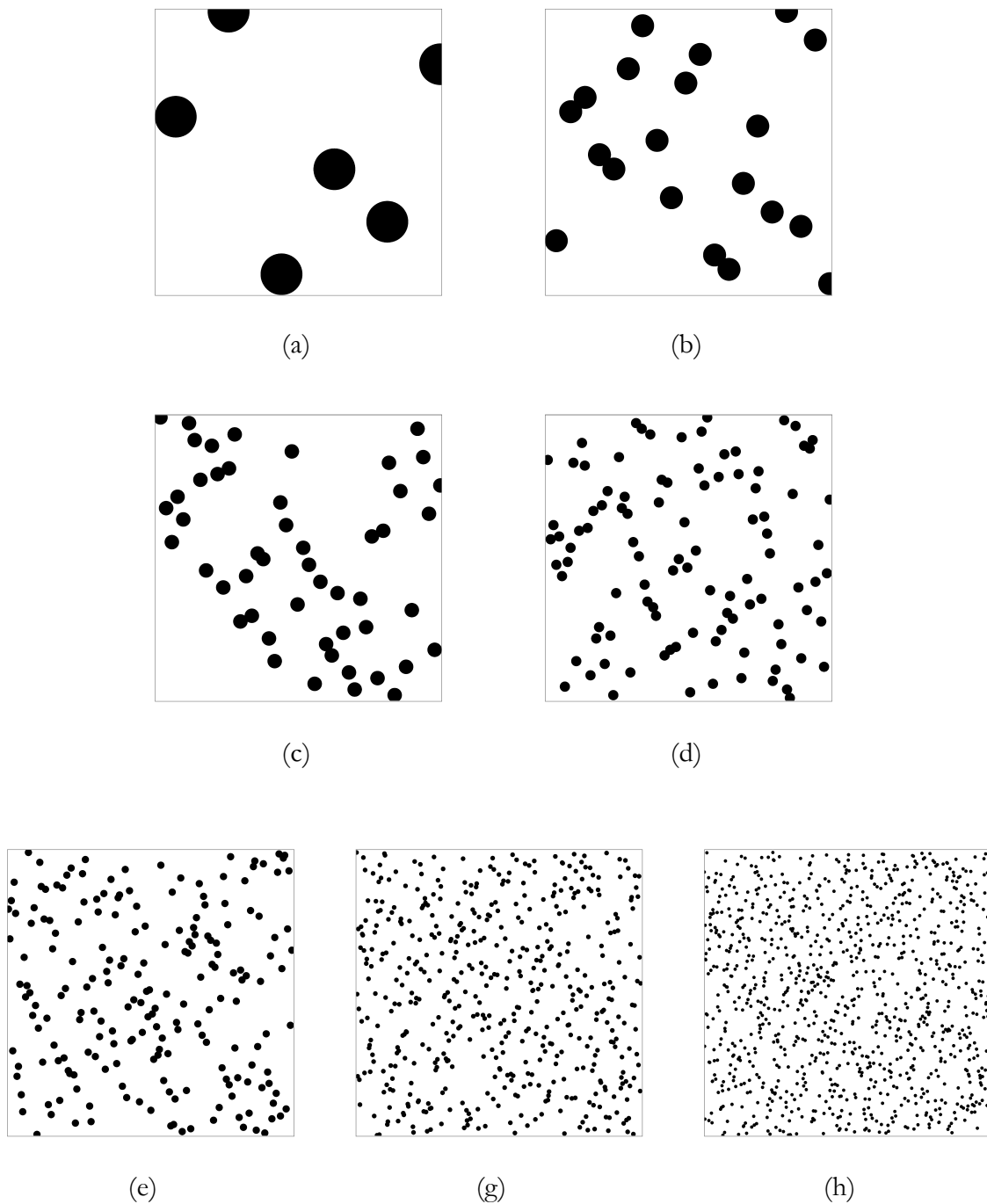


FIGURE 3.16. Echantillons des réalisations pour les inclusions de forme circulaire à 10%.

(a) 6 inclusions ; (b) 20 inclusions ; (c) 50 inclusions ; (d) 100 inclusions ;

(e) 200 inclusions ; (g) 500 inclusions ; (h) 1000 inclusions.

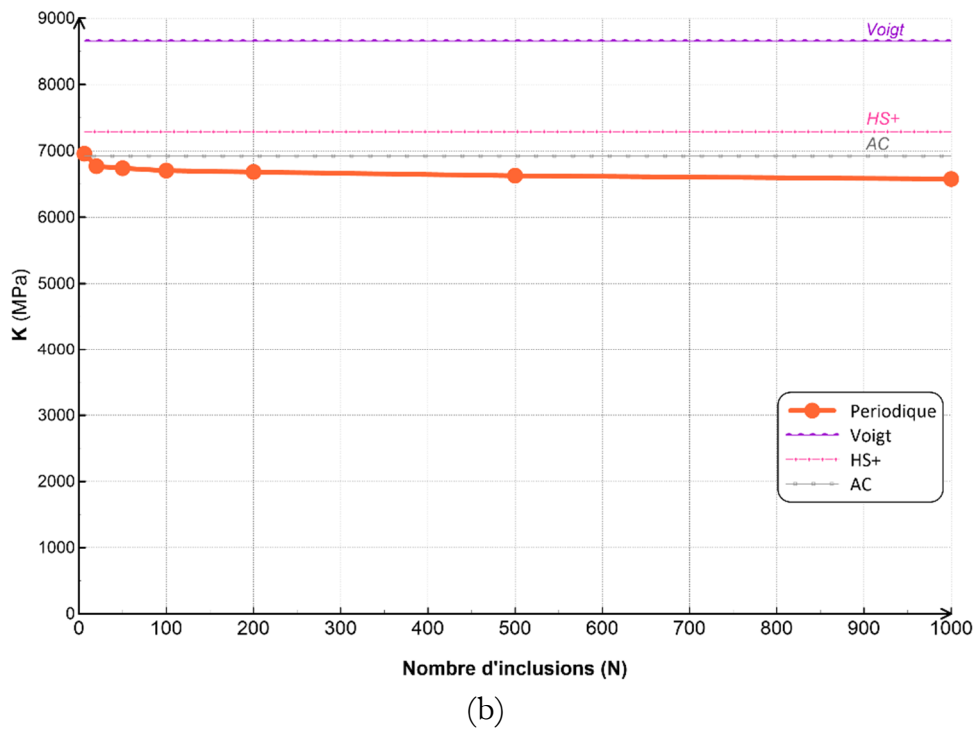
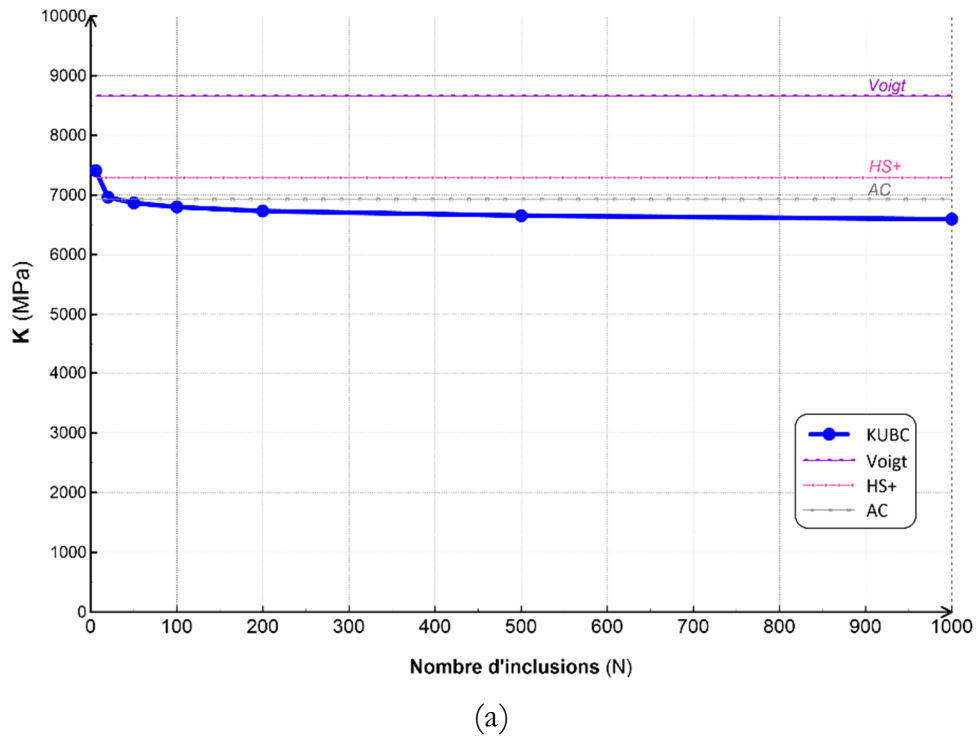


FIGURE 3.17. Propriétés mécaniques en fonction du nombre d'inclusions de forme circulaire pour la fraction volumique  $p^a = 10\%$  : (a) KUBC et (b) PBC.

### 3.4.2.2. Propriétés élastiques pour la fraction volumique apparente $p^a = 30\%$

Nous présentons par la figure 3.18 quelques échantillons des différentes réalisations utilisées pour la détermination du volume élémentaire représentatif (VER).

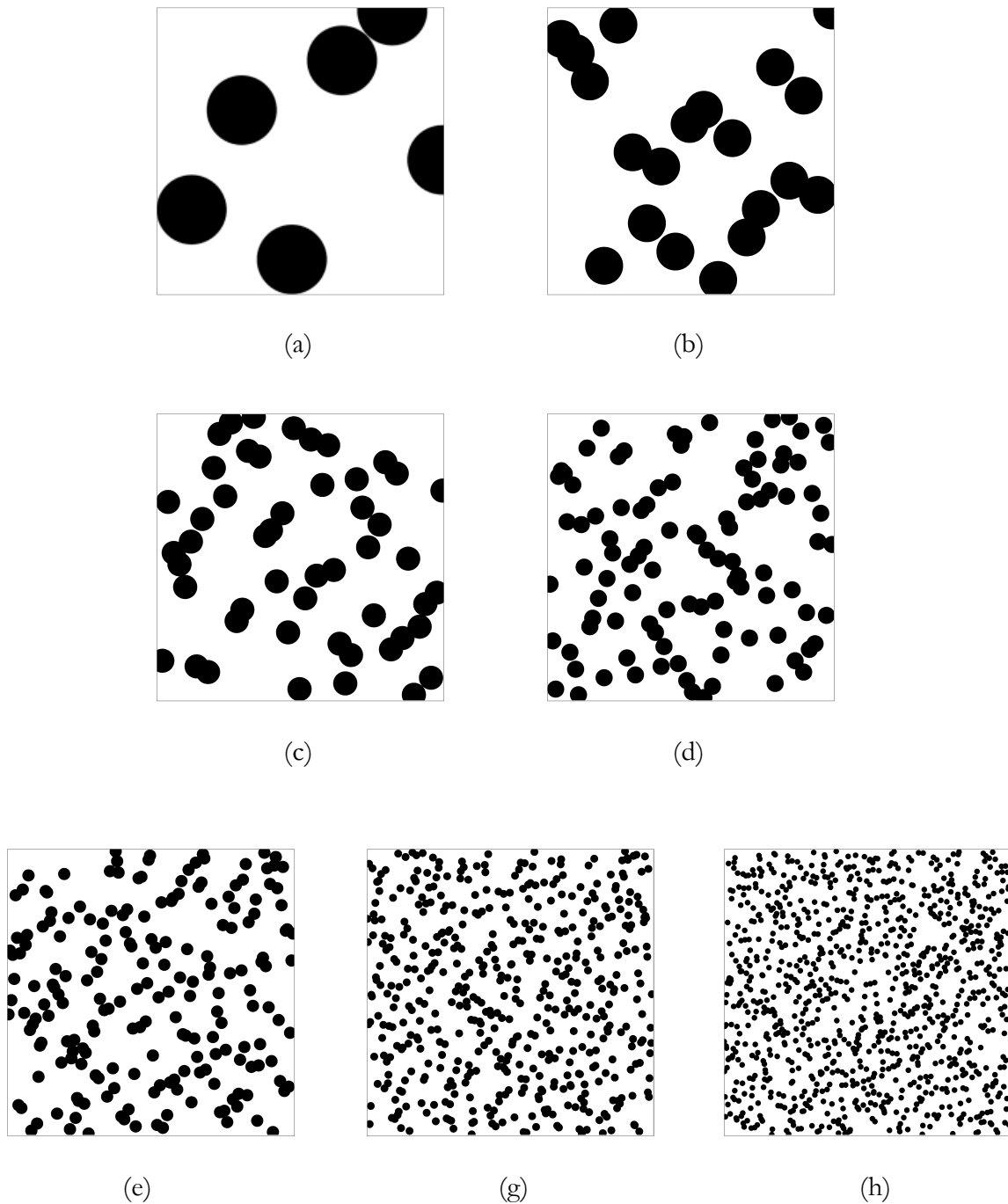
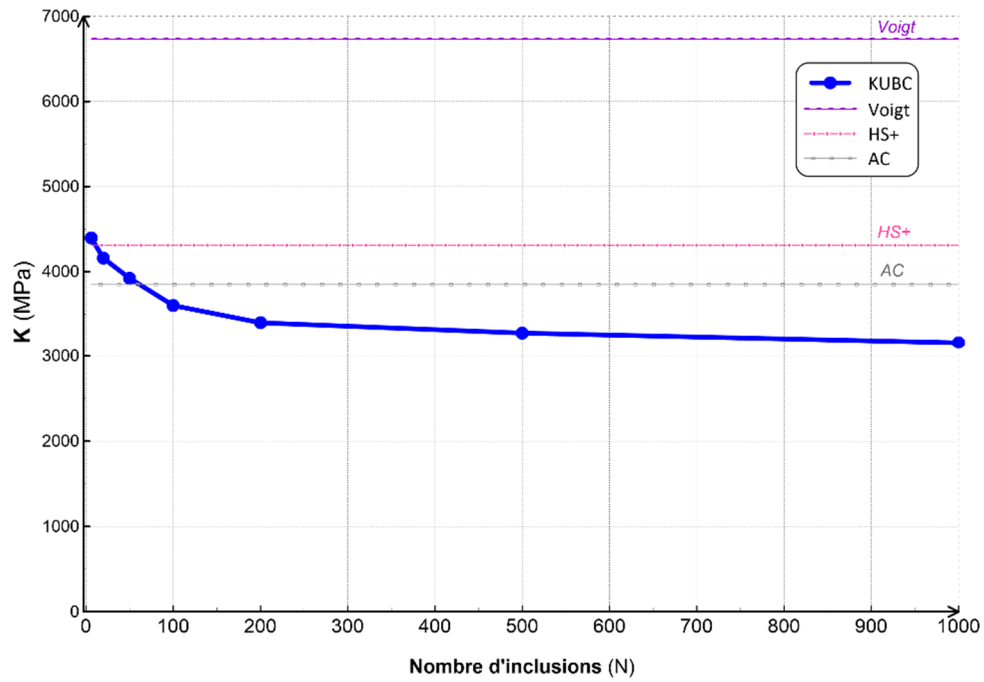
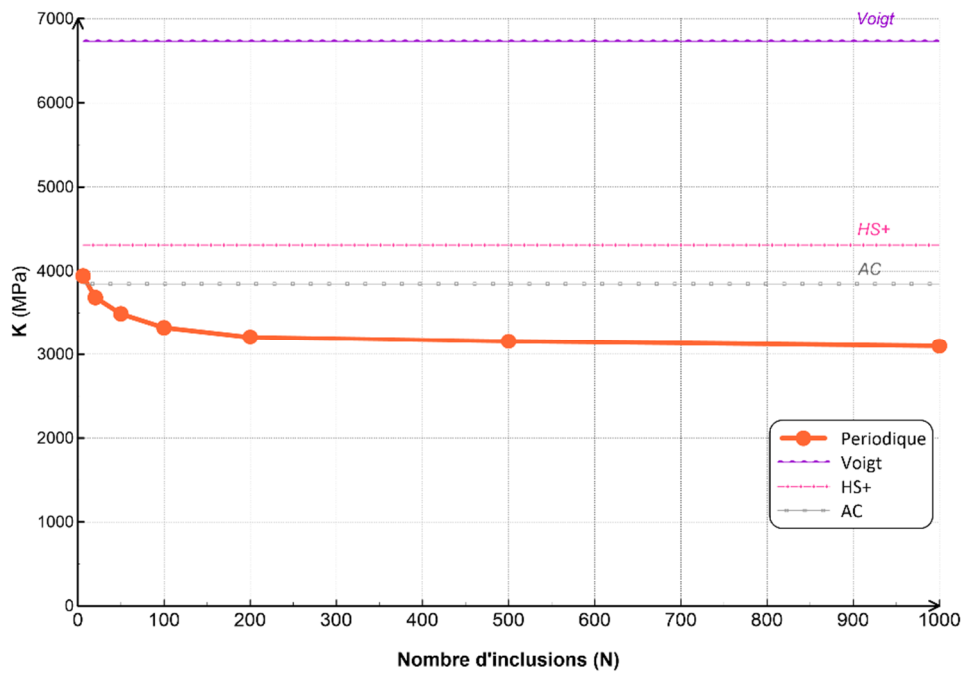


FIGURE 3.18. Echantillons des réalisations pour les inclusions de forme circulaire à 30%.  
(a) 6 inclusions ; (b) 20 inclusions ; (c) 50 inclusions ; (d) 100 inclusions ;  
(e) 200 inclusions ; (g) 500 inclusions ; (h) 1000 inclusions.



(a)



(b)

FIGURE 3.19. Propriétés mécaniques périodique (PBC) en fonction du nombre d'inclusions de forme circulaire pour la fraction volumique  $p^a = 30\%$  : (a) KUBC et (b) PBC.



### 3.4.2.3. Propriétés élastiques pour la fraction volumique apparente $p^a = 50\%$

Nous présentons par la figure 3.20 quelques échantillons des différentes réalisations utilisées pour la détermination du volume élémentaire représentatif (VER).

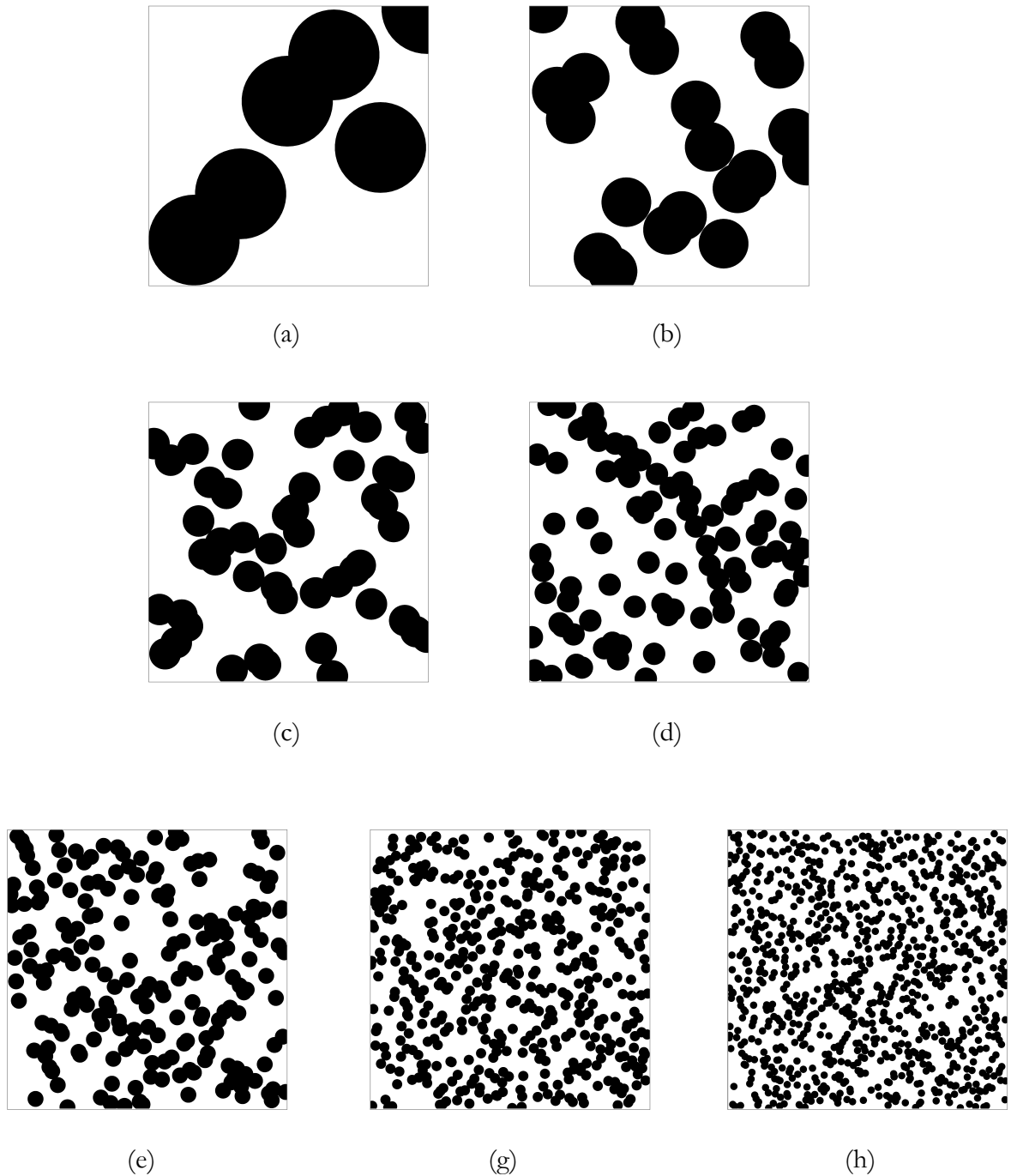
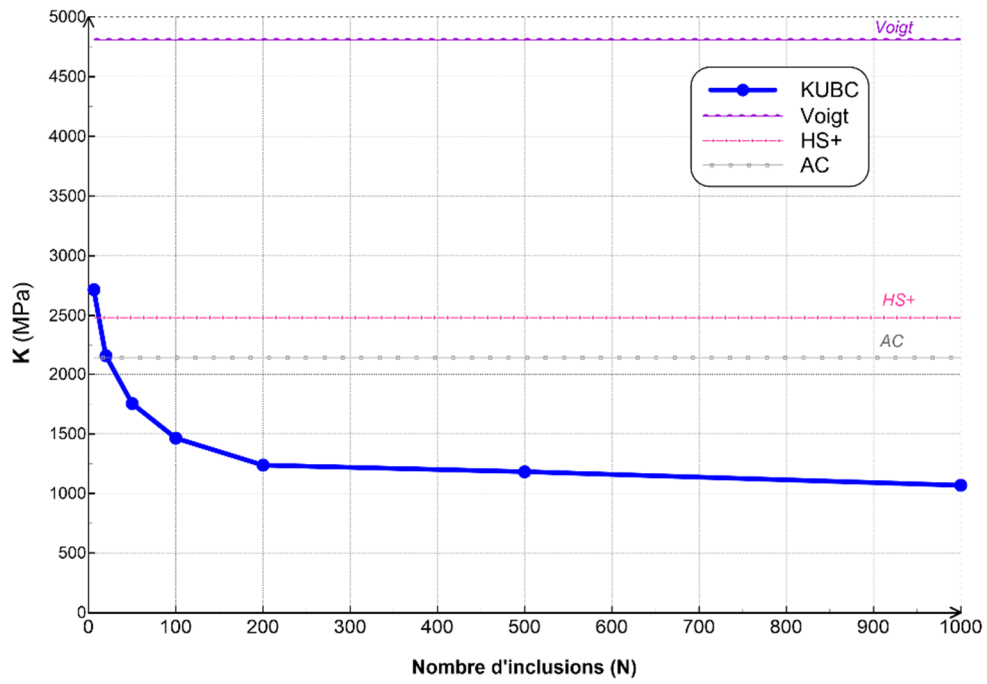
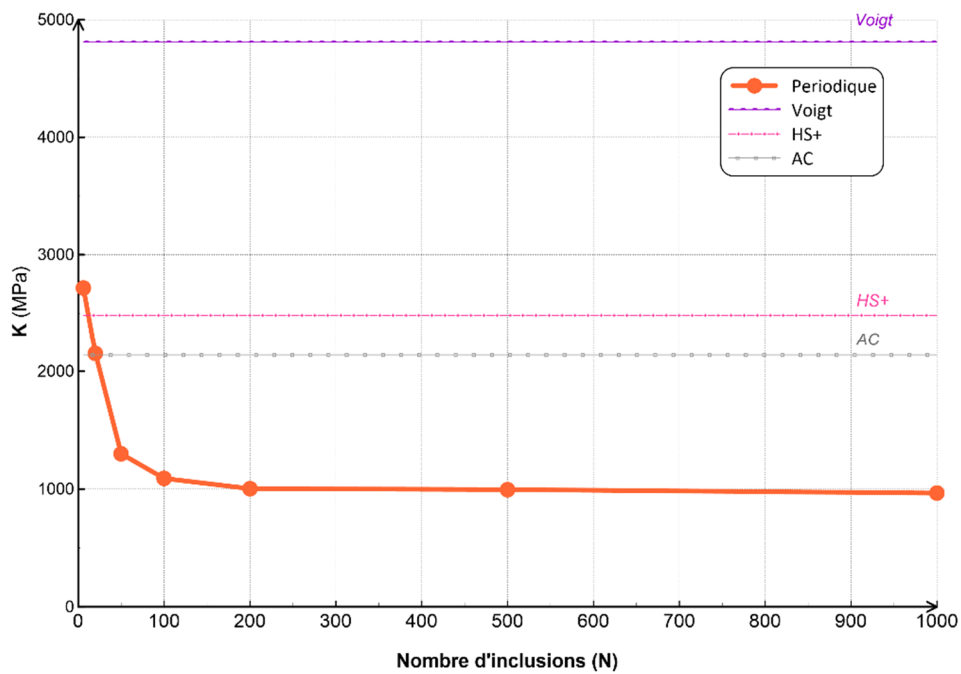


FIGURE 3.20. Echantillons des réalisations pour les inclusions de forme circulaire à 50%.  
(a) 6 inclusions ; (b) 20 inclusions ; (c) 50 inclusions ; (d) 100 inclusions ;  
(e) 200 inclusions ; (g) 500 inclusions ; (h) 1000 inclusions.

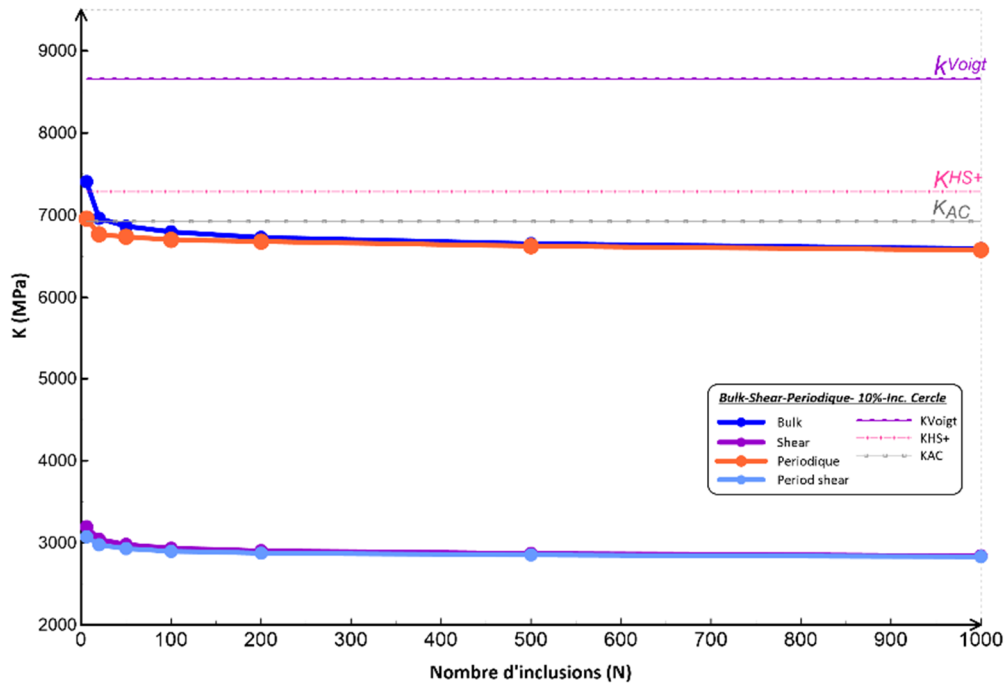


(a)

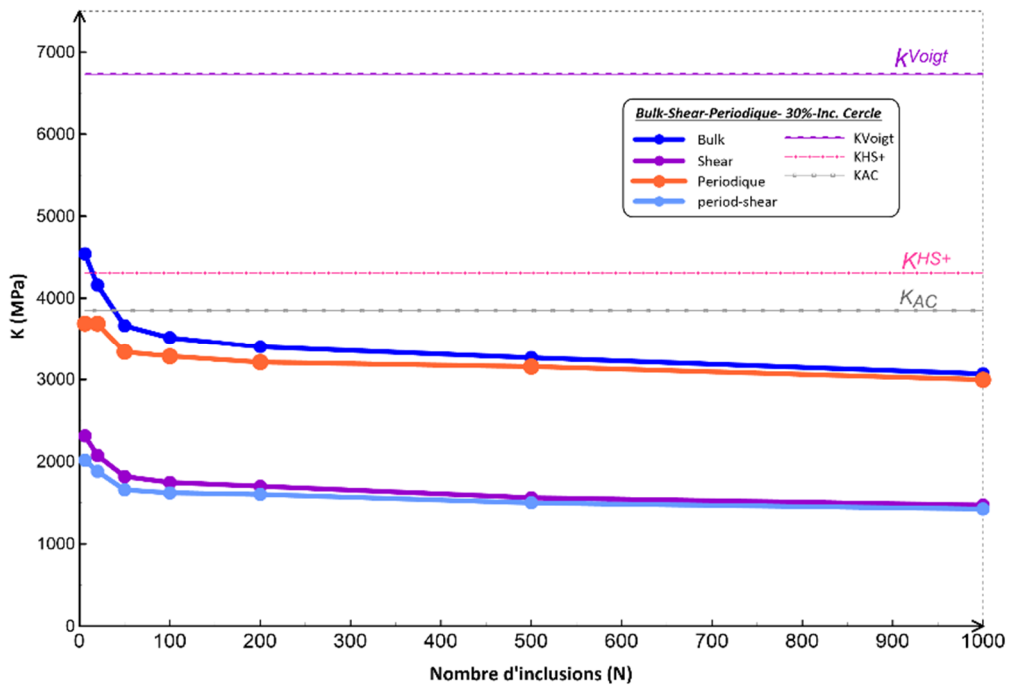


(b)

FIGURE 3.21. Propriétés mécaniques périodique (PBC) en fonction du nombre d'inclusions de forme circulaire pour la fraction volumique  $p^a = 50\%$  : (a) KUBC et (b) PBC.



(a)



(b)

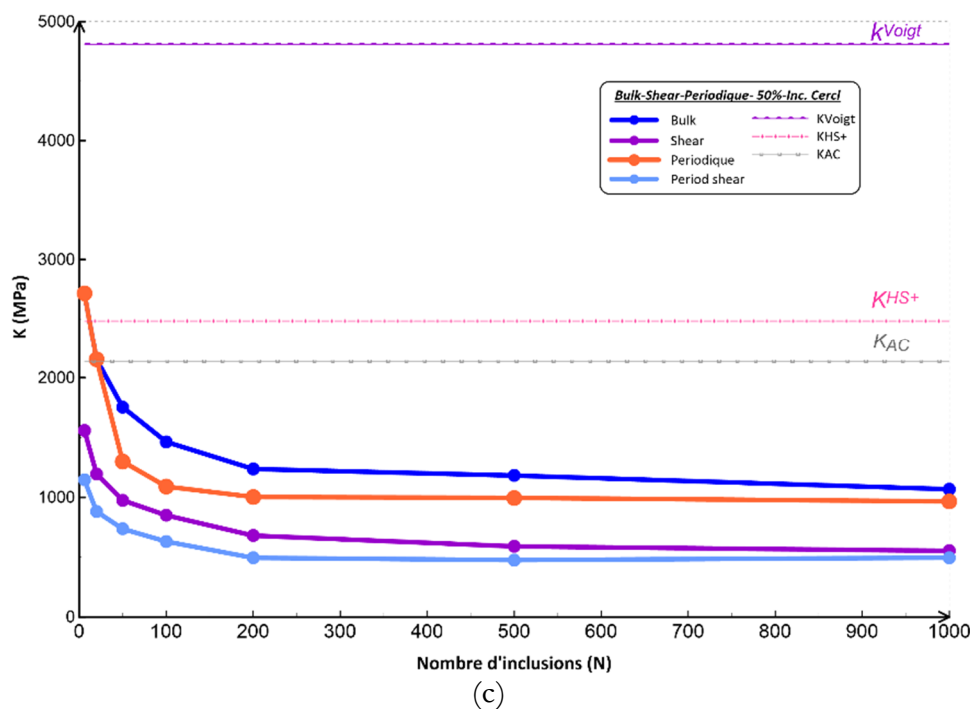
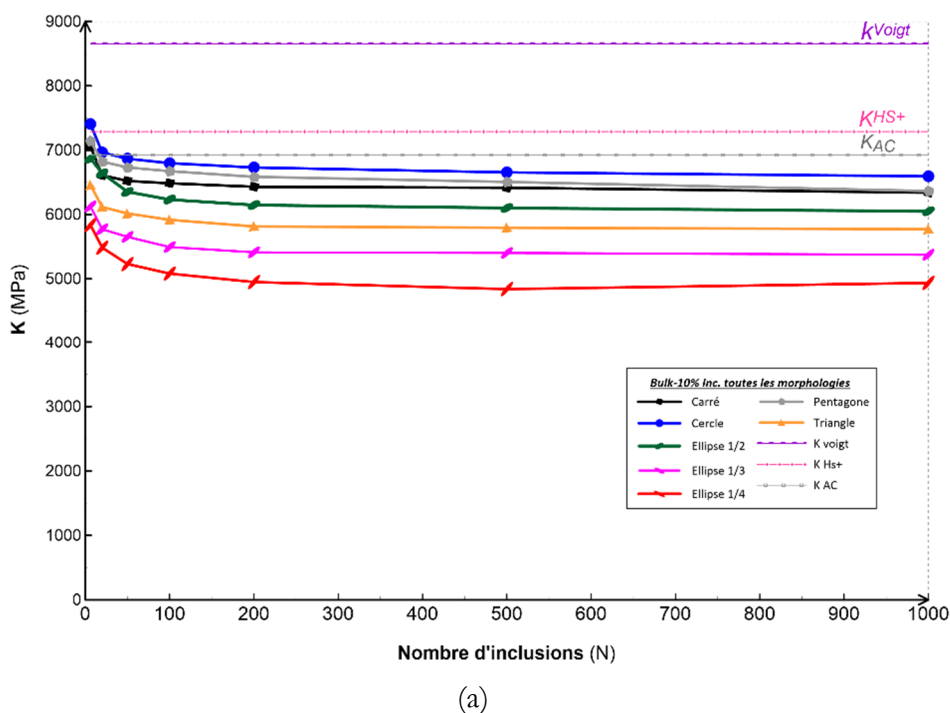
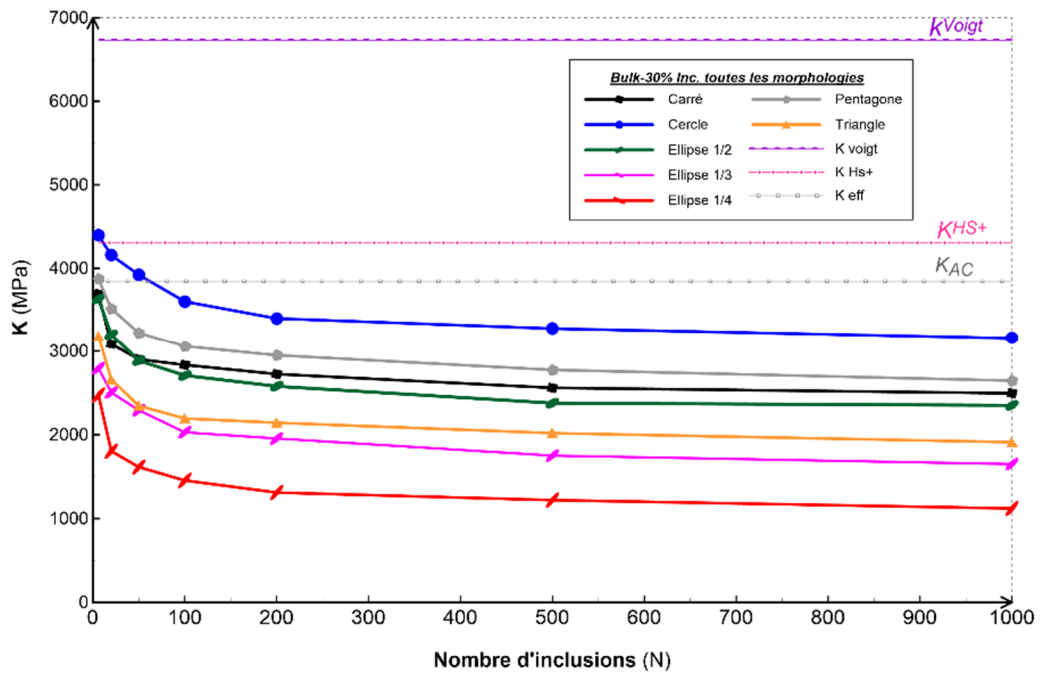


FIGURE 3.22. Propriétés mécaniques  $k$  et  $\mu$  en fonction du nombre d'inclusions pour le cas d'inclusions de forme circulaire : (a)  $p^a = 10\%$  , (b)  $p^a = 30\%$  et (c)  $p^a = 50\%$  .

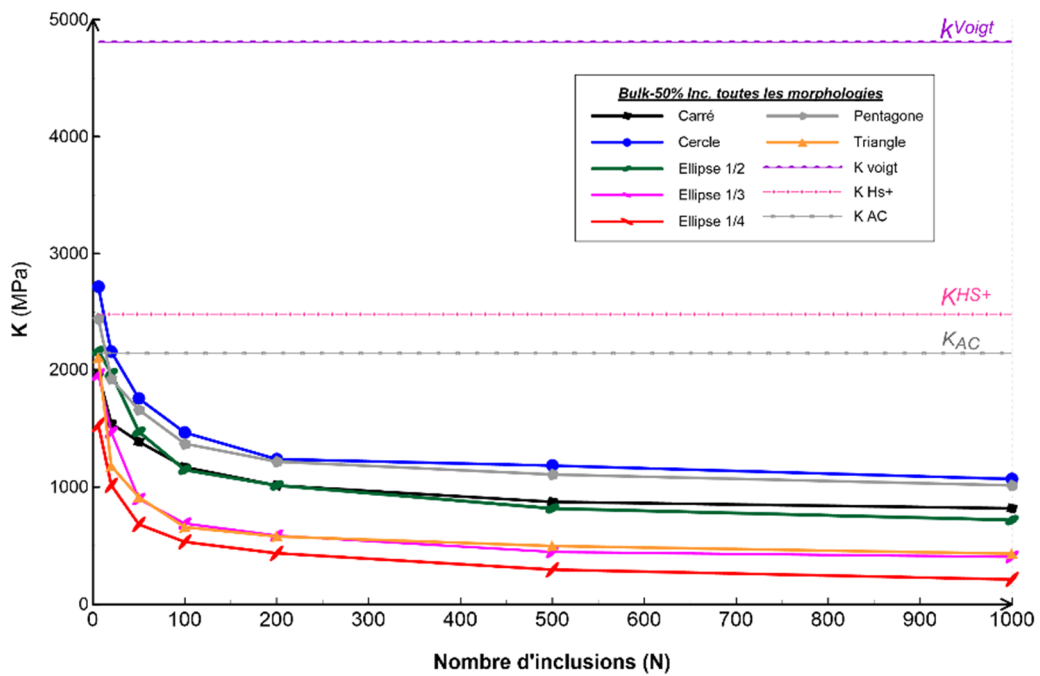
### 3.4.2.4. Propriétés mécaniques pour toutes les morphologies

Les figures suivantes présentent les résultats regroupés afin de réduire le nombre de graphes pour les trois fractions apparentes 10%, 30% et 50% pour toutes les morphologies considérées.



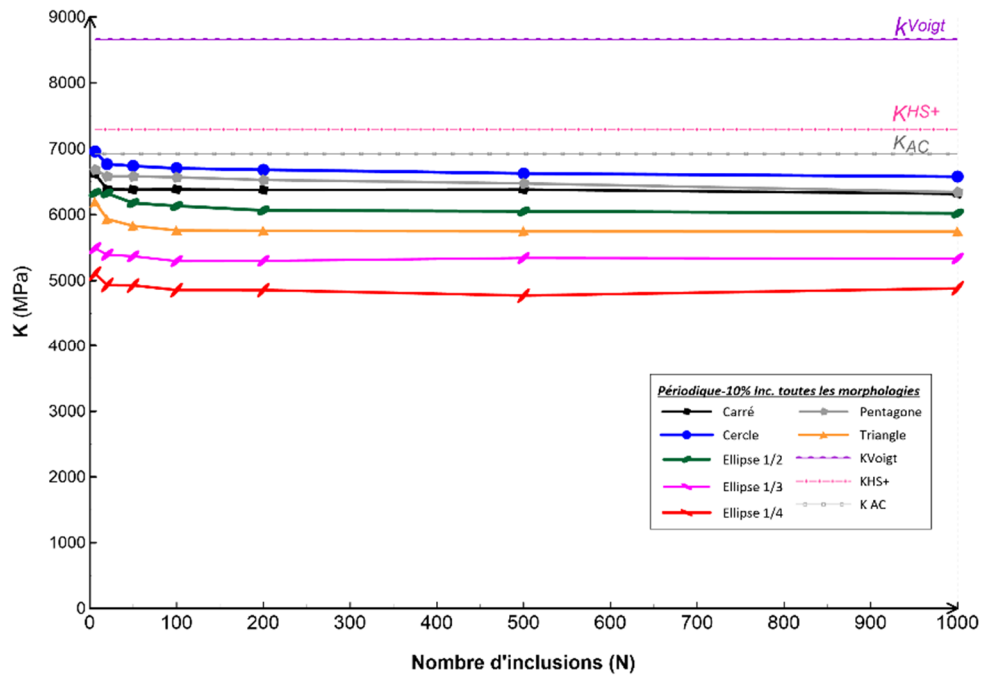


(b)

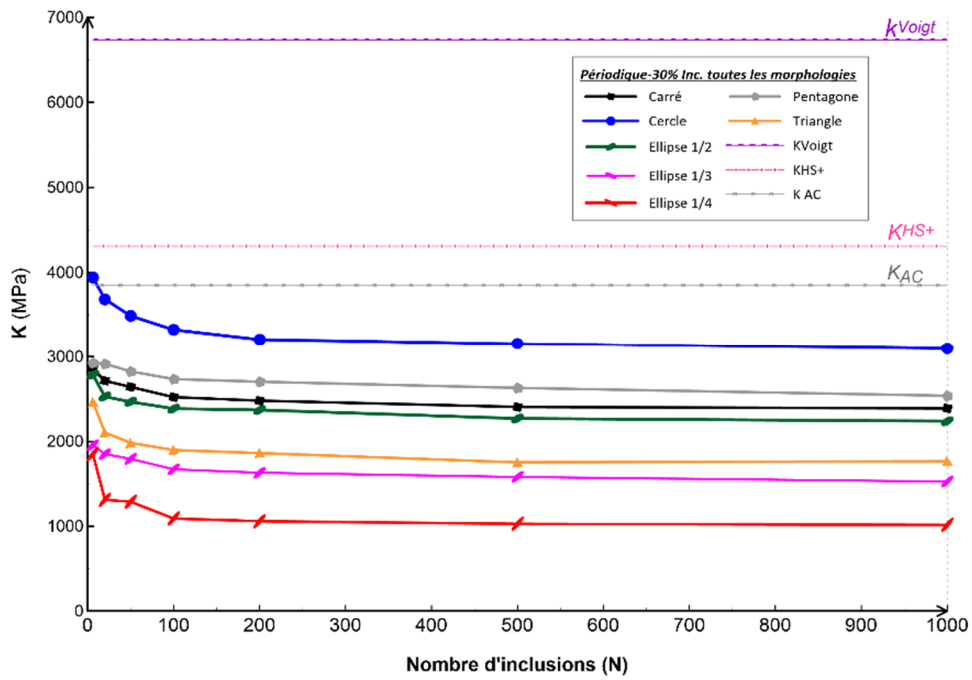


(c)

FIGURE 3.23. Propriétés mécaniques (KUBC) en fonction du nombre d'inclusions pour le cas de toutes les morphologies : (a)  $p^a = 10\%$  , (b)  $p^a = 30\%$  et (c)  $p^a = 50\%$  .



(a)



(b)

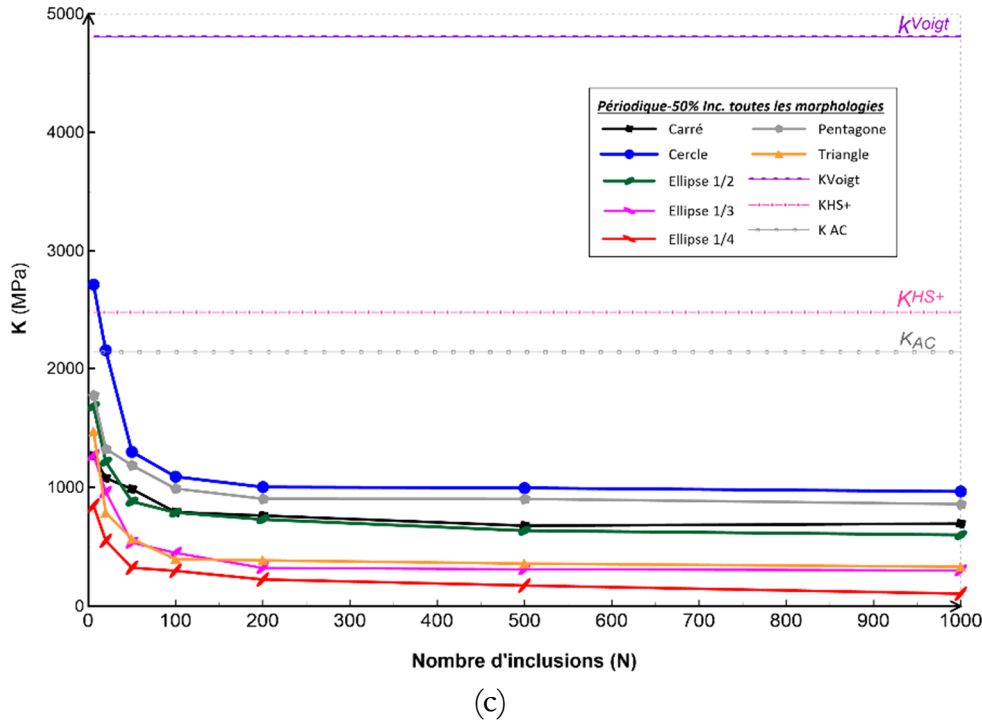
















FIGURE 3.24. Propriétés mécaniques Périodique (PBC) en fonction du nombre d'inclusions pour le cas de toutes les morphologies. : (a)  $p^a = 10\%$  , (b)  $p^a = 30\%$  et (c)  $p^a = 50\%$  .

Les figures 3.23 et 3.24 représentent les valeurs des propriétés élastiques en fonction du nombre d'inclusions  $N$  pour toutes les morphologies considérées. Le  $V.E.R$  ou d'une façon équivalente le  $N_{VER}$  est déterminé en faisant la correspondance entre les deux premiers points ayant une erreur inférieure ou égale à 2% entre les valeurs apparentes obtenues par les deux conditions aux limites : périodiques (PBC) et déformations homogènes au contour (KUBC). Par exemple, pour le cas  $p = 30\%$ , la valeur approximative du  $VER_{20\%}$  est  $N_{VER} = 200$  inclusions pour les deux propriétés élastiques  $k$  et  $\mu$  .

Les valeurs de  $k$  et  $\mu$  , trouvées pour tous les cas étudiés, sont présentées dans les tableaux 3.3, 3.4 et 3.5 et comparées aux bornes de Voigt, Hashin–Shtrikman  $HS^+$  et au modèle auto-cohérent (AC). Comme les microstructures étudiées sont poreuses, les deux bornes inférieures Reuss et Hashin–Shtrikman  $HS^-$  sont presque nulles et ne sont pas représentées.








Forme	Propriété	Voigt	HS	AC	Erreur %	Simulation
 Cercle	$k$	8654	7288	6924	1	6859,15
	$\mu$	3461	3180	2933	1	2892,33
 Pentagone	$k$	8654	7288	6924	3	6689,75
	$\mu$	3461	3180	2933	0,5	2919,96
 Carré	$k$	8654	7288	6924	5	6551,68
	$\mu$	3461	3180	2933	1	2893,78
 Ellipse ( $r=1/2$ )	$k$	8654	7288	6924	8	6341,52
	$\mu$	3461	3180	2933	2	2849,80
 Triangle	$k$	8654	7288	6924	13	5983,44
	$\mu$	3461	3180	2933	4	2786,38
 Ellipse ( $r=1/3$ )	$k$	8654	7288	6924	2	5604,05
	$\mu$	3461	3180	2933	8	2687,09
 Ellipse ( $r=1/4$ )	$k$	8654	7288	6924	24	5193,60
	$\mu$	3461	3180	2933	11	2595,79

(a)

Forme	Propriété	Voigt	HS	AC	Erreur %	Simulation
 Cercle	$k$	6731	4309	3848	3	3702,47
	$\mu$	2692	2130	1784	1	1757,87
 Pentagone	$k$	6731	4309	3848	18	3149,30
	$\mu$	2692	2130	1784	12	1561,37
 Carré	$k$	6731	4309	3848	24	2899,47
	$\mu$	2692	2130	1784	17	1472,30
 Ellipse ( $r=1/2$ )	$k$	6731	4309	3848	26	2819,89
	$\mu$	2692	2130	1784	17	1512,24
 Triangle	$k$	6731	4309	3848	3,8	2351,07
	$\mu$	2692	2130	1784	21	1400,78
 Ellipse ( $r=1/3$ )	$k$	6731	4309	3848	44	2139,68
	$\mu$	2692	2130	1784	25	1325,85
 Ellipse ( $r=1/4$ )	$k$	6731	4309	3848	59	1571,15
	$\mu$	2692	2130	1784	34	1173,30

(b)



Forme	Propriété	Voigt	HS	AC	Erreur %	Simulation
 Cercle	$k$	4809	2483	2139	22	1653,53
	$\mu$	1923	1333	1012	1	994,68
 Pentagone	$k$	4809	2483	2139	28	1532,52
	$\mu$	1923	1333	1012	11	894,66
 Carré	$k$	4809	2483	2139	41	1251,92
	$\mu$	1923	1333	1012	22	787,01
 Ellipse ( $r=1/2$ )	$k$	4809	2483	2139	37	1327,62
	$\mu$	1923	1333	1012	21	792,31
 Triangle	$k$	4809	2483	2139	56	908,08
	$\mu$	1923	1333	1012	40	605,33
 Ellipse ( $r=1/3$ )	$k$	4809	2483	2139	56	921,03
	$\mu$	1923	1333	1012	8	556,92
 Ellipse ( $r=1/4$ )	$k$	4809	2483	2139	60	838,49
	$\mu$	1923	1333	1012	54	463,48

(c)

Tableau 3.3. Les valeurs des simulations numériques, les bornes de Voigt, les bornes de Hashin-Shtrikman HS +, le modèle auto-cohérent (AC) et l'erreur relative entre la simulation et le modèle auto-cohérent pour : (a)  $p^a = 10\%$ , (b)  $p^a = 30\%$  et (c)  $p^a = 50\%$ .

### 3.5 Synthèse

Après comparaison des différents résultats des simulations, nous pouvons conclure que le modèle auto-cohérent ne permet pas une bonne estimation des propriétés élastiques et autant moins pour les fractions volumiques élevées, ceci s'explique par la présence de l'effet, d'une part, de l'interaction entre les différents pores et d'autre part du chevauchement de ces pores. Par conséquent, plus la fraction volumique est importante, plus l'effet sur les propriétés élastiques effectives est important.

L'approche finale qui découle de cette étude est l'influence de la morphologie des inclusions sur les propriétés élastiques. Contrairement à ce qui a été évoqué dans les études de [El-Moumen et al., 2013] en 3D et de [Kaddouri et al., 2016] en 2D, qui stipulaient que la portée intégrale n'est, tout simplement, que la surface d'une inclusion dans le V.E.R et comme la forme circulaire des inclusions est la forme la plus isotrope, elle peut remplacer n'importe quelle autre forme géométrique à condition de respecter la fraction volumique et la surface de chaque inclusion, car toutes les morphologies des inclusions ont le même comportement élastique. Ils ont conclu que la portée intégrale est le seul paramètre lié à la morphologie des inclusions, son évaluation s'avère l'une des clés permettant l'étude de l'effet de la morphologie des inclusions sur le comportement élastique des microstructures aléatoires.

Dans notre cas des microstructures poreuses, on remarque que les formes qui présentent des arêtes et des angles, tel que le triangle, résistent toujours moins que les formes qui présentent des arrondis, ceci est visible surtout sur l'inclusion de forme circulaire qui présente la plus haute résistance, au contraire de la forme elliptique au rapport  $r = \frac{1}{4}$  qui donne toujours la plus faible résistance. Cela peut s'expliquer par la présence des concentrations des contraintes dans les formes dites « pointues ».

# Chapitre 4

## Chapitre 4

# 4. Construction d'un modèle analytique itératif d'homogénéisation des matériaux hétérogènes

*Ce chapitre est dédié à la présentation d'une nouvelle méthode proposée, basée sur un schéma itératif, pour l'homogénéisation des propriétés mécaniques et physiques des matériaux hétérogènes, à citer, le coefficient de compressibilité, le module de cisaillement et le coefficient de la conductivité thermique. Les propriétés effectives sont obtenues à partir de l'analyse par éléments finis de plusieurs VER en deux et trois dimensions.*

*Une présentation des différents modèles et bornes théoriques d'ordre un et d'ordre deux, servant de base théorique pour l'élaboration du schéma s'avère nécessaire.*

### 4.1 Introduction

Un matériau est dit hétérogène lorsque ses propriétés varient d'un point à l'autre. On cherche alors à remplacer ce matériau par un milieu dit homogène équivalent caractérisé par des propriétés mécaniques effectives. Les modèles constitutifs traditionnels ne donnent pas une solution réaliste pour cette catégorie de matériaux. Le concept de l'homogénéisation numérique est considéré comme la meilleure solution pour établir un pont entre les échelles micro et macro.

Récemment, de nombreux travaux ont été publiés sur l'homogénéisation numérique pour différents types de matériaux tels que les matériaux composites élastiques-plastiques du point de vue du comportement [Khdir et al., 2013], [Benhizia et al., 2014]

et pour étudier le renforcement de l'effet des composites sur la réponse globale [El Moumen et al., 2014], [Sukiman et al., 2017], la conductivité thermique, les effets de type microstructure [kaddouri et al., 2016], la réponse des matériaux poreux en termes de conductivité thermique [El Moumen et al., 2015] et l'effet de la forme du vide sur la limite d'élasticité quand un milieu poreux est considéré [Khdir et al., 2015].

Les méthodes d'homogénéisation connues sous le nom de méthodes analytiques consistant à utiliser des modèles de frontière basés sur des bornes supérieures et inférieures pour établir une intervalle qui contient la solution exacte. Les limites les plus utilisées sont les limites supérieure et inférieure de *Voigt* [Voigt, 1889], *Reuss* [Reuss, 1929] et celles de *Hashin-Shtrikman* [Hashin et Shtrikman, 1963]. Ils présentent l'avantage d'approcher avec plus de précision les propriétés effectives des matériaux hétérogènes par rapport aux limites. Une estimation peut être obtenue à partir d'une approche micromécanique comme le modèle auto-cohérent [Berveiller et Zaoui., 1979].

Dans cette étude, on considère le cas particulier des matériaux hétérogènes constitués d'une mixture de plusieurs phases élastiques linéaires et isotropes. Le but est de déterminer les propriétés effectives de ces matériaux multiphasiques à partir des propriétés et des fractions volumiques des phases qui les constituent.

Nous commençons par donner les rappels des formules de la mécanique du milieu continu pour les cas d'élasticité à deux et trois dimensions suivis d'une présentation de la théorie introduisant les limites du premier ordre de *Voigt* et *Reuss* et du second ordre de *Hashin-Shtrikman*. Un schéma itératif simple, basé sur ces limites théoriques, pour l'approximation, avec une bonne précision, des propriétés effectives est élaboré.

La solution éléments finis est considérée comme une référence pour la convergence de la solution itérative. Les propriétés considérées pour chaque cas sont le module de compressibilité, le module de cisaillement et la conductivité thermique.

## 4.2 Rappel sur les propriétés élastiques

Etant donné que l'étude porte sur des modèles 2D et 3D, dans ce qui suit, les constantes élastiques en 2D seront notées avec un indice 2, et ceux en 3D avec un indice 3.

### 4.2.1 Élasticité à trois dimensions

La loi de Hooke s'écrit sous la forme :

$$\sigma = \lambda_3 \text{Tr}(\varepsilon) I + 2\mu_3 \varepsilon \quad (4.1)$$

ou encore :

$$\sigma_{ij} = \lambda_3 \varepsilon_{kk} \delta_{ij} + 2\mu_3 \varepsilon_{ij} \quad (4.2)$$

avec :

$\sigma_{ij}$  : Le tenseur des contraintes,

$\varepsilon_{ij}$  : Le tenseur des déformations,

$\varepsilon_{kk}$  : La trace du tenseur des déformations,

$\delta_{ij}$  : Symbole de Kronecker  $\begin{cases} = 1 & \text{si } i = j \\ = 0 & \text{si } i \neq j \end{cases}$

$\lambda_3$  et  $\mu_3$  : Les coefficients de Lamé.

Le premier coefficient de Lamé  $\lambda_3$ , s'écrit sous la forme :

$$\lambda_3 = \frac{\nu_3 E_3}{(1 - 2\nu_3)(1 + \nu_3)} \quad (4.3)$$

Le second coefficient de Lamé, aussi appelé module de cisaillement  $\mu_3$  s'écrit sous la forme :

$$\mu_3 = \frac{E_3}{2(1 + \nu_3)} \quad (4.4)$$

$E_3$  : étant le module de Young, et  $\nu_3$  le coefficient de *Poisson* tel que :  $0 < \nu_3 < \frac{1}{2}$

Lorsqu'un matériau isotrope est soumis à une pression isostatique, celui-ci change de volume, sa résistance est ce qu'on appelle le module de compressibilité  $K$ , tel que :

$$p = K \cdot \theta \quad (4.5)$$

avec

$p$  : La pression isostatique telle que :  $p = \frac{1}{3} \sigma_{kk}$

$K$  : Le module de compressibilité,

$\theta$  : Le taux de déformation isostatique tel que :  $\theta = \varepsilon_{kk}$

D'après (4.2), on a (pour plus d'illustration, revenons au repère orthonormé x,y,z) :

$$\begin{cases} \sigma_{xx} = 2\mu_3\varepsilon_{xx} + \lambda_3(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) \\ \sigma_{yy} = 2\mu_3\varepsilon_{yy} + \lambda_3(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) \\ \sigma_{zz} = 2\mu_3\varepsilon_{zz} + \lambda_3(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) \end{cases} \quad (4.6)$$

En additionnant ces trois équations, on obtient :

$$\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz} = 2\mu_3(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) + 3\lambda_3(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) \quad (4.7)$$

$\sigma_{kk}$  étant la trace du tenseur des contraintes et  $\varepsilon_{kk}$  la trace du tenseur des déformations, (4.7) devient :

$$\sigma_{kk} = (2\mu_3 + 3\lambda_3)\varepsilon_{kk} \quad (4.8)$$

ce qui nous donne :

$$p = \frac{2\mu_3 + 3\lambda_3}{3}\theta \quad (4.9)$$

Le module de compressibilité  $K$  est donc :

$$K_3 = \frac{2\mu_3 + 3\lambda_3}{3} \quad (4.10)$$

Finalement, en remplaçant les coefficients de Lamé (4.3) et (4.4) par leurs expressions :

$$K_3 = \frac{E_3}{3(1 - 2\nu_3)} \quad (4.11)$$

### 4.2.2 Élasticité à deux dimensions (plane)

On sait que pour un matériau élastique linéaire isotrope en 3D, on a en inversant l'équation (4.1), on a :

$$\sigma = \frac{1}{E_3} \left( (1 + \nu_3) \sigma - \nu_3 \text{Tr}(\sigma) I \right) \quad (4.12)$$

ou encore :

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{E_3} \left( (1 + \nu_3) \sigma_{ij} - \nu_3 \sigma_{kk} \delta_{ij} \right) \quad (4.13)$$

ce qui donne :

$$\begin{cases} \varepsilon_{xx} = \frac{1}{E_3} \left( \sigma_{xx} - \nu_3 (\sigma_{yy} + \sigma_{zz}) \right) \\ \varepsilon_{yy} = \frac{1}{E_3} \left( \sigma_{yy} - \nu_3 (\sigma_{xx} + \sigma_{zz}) \right) \\ \varepsilon_{xy} = \frac{1}{E_3} \left( (1 + \nu_3) \sigma_{xy} \right) \end{cases} \quad (4.14)$$

En 2D, les équations sont de la même forme que (4.14) mais en ne gardant que les termes en coordonnées x et y :

$$\begin{cases} \varepsilon_{xx} = \frac{1}{E_2} \left( \sigma_{xx} - \nu_2 \sigma_{yy} \right) \\ \varepsilon_{yy} = \frac{1}{E_2} \left( \sigma_{yy} - \nu_2 \sigma_{xx} \right) \\ \varepsilon_{xy} = \frac{1}{E_2} \left( (1 + \nu_2) \sigma_{xy} \right) \end{cases} \quad (4.15)$$

Ces équations en 2D sont généralement déduites à partir des équations (4.14) en supposant soit une déformation plane soit une contrainte plane.

Le module de cisaillement est défini par :

$$\mu_2 = \frac{\sigma_{xy}}{2\varepsilon_{xy}} \quad (4.16)$$

D'après (4.15) :

$$\frac{\sigma_{xy}}{\varepsilon_{xy}} = \frac{E_2}{1 + \nu_2} \quad (4.17)$$

D'où l'expression du module de cisaillement en 2D :

$$\mu_2 = \frac{E_2}{2(1 + \nu_2)} \quad (4.18)$$



Le module de compressibilité dans ce cas est défini par l'équation (4.5), avec la pression isostatique  $p = \frac{1}{2} \sigma_{kk}$ . On retrouve son expression de la même manière qu'en 3D :

$$\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} = \frac{1}{E_2 (\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) (1 - \nu_2)} \quad (4.19)$$

$$\varepsilon_{kk} + \varepsilon_{yy} = \frac{1 - \nu_2}{E_2} \sigma_{kk} \quad (4.20)$$

Ce qui nous donne :

$$\theta = \frac{2(1 - \nu_2)}{E_2} p \quad (4.21)$$

D'où l'expression du module de compressibilité en 2D :

$$K_2 = \frac{E_2}{2(1 - \nu_2)} \quad (4.22)$$

Notons que dans le cas d'une élasticité plane le coefficient de *Poisson* est tel que :  $-1 < \nu_2 < 1$ .

#### 4.2.2.1 Déformation plane

En déformation plane, on a :

$$\begin{cases} \varepsilon_{xz} = \varepsilon_{yz} = \varepsilon_{zz} = 0 \\ \sigma_{xz} = \sigma_{yz} = 0 \\ \sigma_{zz} = \nu (\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) \end{cases}$$

Tenant compte de ces conditions, les équations (4.14) peuvent donc être réécrites comme suit :

$$\begin{cases} \varepsilon_{xx} = \frac{(1 - \nu_3^2)}{E_3} \left( \sigma_{xx} - \frac{\nu_3}{(1 - \nu_3)} \sigma_{yy} \right) \\ \varepsilon_{xy} = \frac{1}{E_3} \left( (1 + \nu_3) \sigma_{xy} \right) \end{cases} \quad (4.23)$$

En comparant le résultat obtenu en (4.23) avec (4.15), on constate que l'expression du module d'*Young* ( $E_2$ ) dans le cas d'une déformation plane en fonction du module d'*Young* ( $E_3$ ) et du coefficient de *Poisson* ( $\nu_3$ ) en 3D est :

$$E_2 = \frac{E_3}{(1 - \nu_3^2)} \quad (4.24)$$

et le coefficient de *Poisson* ( $\nu_2$ ) en déformation plane en fonction du coefficient de *Poisson* ( $\nu_3$ ) en 3D :

$$\nu_2 = \frac{\nu_3}{(1 - \nu_3)} \quad (4.25)$$

On peut déduire les propriétés élastiques dans le cas d'une déformation plane, en remplaçant le module d'*Young* (4.24) et le coefficient de *Poisson* (4.25), dans les expressions du module de cisaillement et du module de compressibilité retrouvés précédemment respectivement dans (4.18) et (4.22) :

$$\mu_2 = \frac{E_3}{2(1 + \nu_3)} \quad (4.26)$$

$$K_2 = \frac{E_3}{2(1 + \nu_3)(1 - 2\nu_3)} \quad (4.27)$$

#### 4.2.2.2 Contrainte plane

En contrainte plane, on a :  $\sigma_{xz} = \sigma_{yz} = \sigma_{zz} = 0$

Les équations (4.14) peuvent donc être réécrites comme suit :

$$\begin{cases} \varepsilon_{xx} = \frac{1}{E_3} (\sigma_{xx} - \nu_3 \sigma_{yy}) \\ \varepsilon_{xy} = \frac{1}{E_3} ((1 + \nu_3) \sigma_{xy}) \end{cases} \quad (4.28)$$

En comparant le résultat obtenu en (4.28) avec (4.15), on constate que le module de *Young* ( $E_2$ ) et le coefficient de *Poisson* ( $\nu_2$ ) dans le cas d'une contrainte plane restent les mêmes qu'en 3D :  $E_2 = E_3$  et  $\nu_2 = \nu_3$

Les propriétés élastiques, dans ce cas, restent également inchangées :  $\mu_2 = \mu_3$  et  $K_2 = K_3$ .

### 4.3 Théorie des modules effectifs

Nous avons vu précédemment que pour obtenir les modules élastiques et la conductivité thermique d'un matériau hétérogène, nous avons besoin des propriétés des différentes phases homogènes qui le constituent ainsi que leurs fractions volumiques, afin de pouvoir calculer les propriétés effectives.

#### 4.3.1 Bornes du premier ordre : *Voigt* et *Reuss*

Connaissant les propriétés élastiques et les fractions volumiques des composantes du matériau hétérogène étudié, nous pouvons déterminer les bornes *Voigt* (1889) et *Reuss* (1929). La borne supérieure (*Voigt*) est retrouvée en considérant que les déformations sont uniformes partout dans le matériau.

$$\hat{E} = \frac{\hat{\sigma}}{\hat{\varepsilon}} = \frac{\sum f_i \sigma_i}{\hat{\varepsilon}} = \frac{\sum f_i (\hat{\varepsilon} E_i)}{\hat{\varepsilon}} \quad (4.29)$$

$$\hat{E} = \sum_{i=1}^n f_i E_i \quad (4.30)$$

Tandis que la borne inférieure (*Reuss*) est retrouvée en considérant que les contraintes sont uniformes partout dans le matériau :

$$\hat{E} = \frac{\hat{\sigma}}{\hat{\varepsilon}} = \frac{\hat{\sigma}}{\sum f_i \varepsilon_i} = \frac{\hat{\sigma}}{\sum f_i \left( \frac{\hat{\sigma}}{E_i} \right)} \quad (4.31)$$

$$\frac{1}{\hat{E}} = \sum_{i=1}^n \frac{f_i}{E_i} \quad (4.32)$$

avec :

- $\hat{E}$  : Module de Young effectif,
- $\hat{\sigma}$  : Contrainte effective,
- $\hat{\varepsilon}$  : Déformation effective,
- $f_i$  : Fraction volumique de la composante  $i$ ,
- $E_i$  : Module de Young de la composante  $i$ ,
- $\sigma_i$  : Contrainte de la composante  $i$ ,
- $\varepsilon_i$  : Déformation de la composante  $i$ .

On considère le cas d'un matériau hétérogène à deux phases isotropes homogènes de module de *Young*  $E_1$  (resp.  $E_2$ ) et de fraction volumique  $f_1$  (resp.  $f_2$ ). Avec  $E_1 < E_2$ . Sachant que :  $f_1 + f_2 = 1$ , on pose :  $f_2 = x$ , d'où :  $f_1 = 1 - x$  l'équation (4.30) devient :

$$E^{VR+} = f_1 E_1 + f_2 E_2 \quad (4.33)$$

$$E^{VR+} = (1 - x) E_1 + x E_2 \quad (4.34)$$

D'où on trouve finalement la borne supérieure *Voigt* :

$$E^{VR+} = (E_2 + E_1) x + E_1 \quad (4.35)$$

L'équation (4.32) devient :

$$\frac{1}{E^{VR-}} = \frac{f_1}{E_1} + \frac{f_2}{E_2} \quad (4.36)$$

$$\frac{1}{E^{VR-}} = \frac{1 - x}{E_1} + \frac{x}{E_2} \quad (4.37)$$

$$\frac{1}{E^{VR-}} = \frac{x E_1 + (1 - x) E_2}{E_1 E_2} \quad (4.38)$$

D'où on trouve finalement la borne inférieure *Reuss* :

$$E^{VR-} = \frac{E_1 E_2}{(E_1 - E_2) x + E_2} \quad (4.39)$$

Le module de *Young* homogénéisé du matériau hétérogène est donc compris entre ces deux bornes :

$$E^{VR-} \leq E^H \leq E^{VR+} \quad (4.40)$$

### 4.3.2 Bornes du second ordre : Hashin-Shtrikman

En appliquant des principes variationnels en élasticité et conductivité linéaire, *Hashin et Shtrikman* (1963) ont défini des bornes plus étroites que *Voigt* et *Reuss* afin d'obtenir les propriétés élastiques ainsi que la conductivité thermique d'un matériau hétérogène.

### 4.3.2.1 Bornes pour le module de compressibilité $K$

$K_1$  étant le module de compressibilité le plus faible et  $K_n$  le module le plus élevé :

$$K^{HS-} = K_1 + \frac{A_1}{1 + \alpha_1 A_1} \quad (4.41)$$

$$K^{HS+} = K_n + \frac{A_n}{1 + \alpha_n A_n} \quad (4.42)$$

avec :

$$\alpha_1 = -\frac{3}{3K_1 + 4\mu_1} \quad (4.43)$$

$$\alpha_n = -\frac{3}{3K_n + 4\mu_n} \quad (4.44)$$

$$A_1 = \sum_{i=2}^n \frac{f_i}{\frac{1}{K_i + K_1} - \alpha_1} \quad (4.45)$$

$$A_n = \sum_{i=2}^{n-1} \frac{f_i}{\frac{1}{K_i + K_n} - \alpha_n} \quad (4.46)$$

Ce qui nous donne pour le cas d'un matériau à deux phases :

$$K^{HS-} = K_1 + \frac{f_2}{\frac{1}{K_2 - K_1} + \frac{3f_1}{3K_1 + 4\mu_1}} \quad (4.47)$$

$$K^{HS+} = K_2 + \frac{f_1}{\frac{1}{K_1 - K_2} + \frac{3f_2}{3K_2 + 4\mu_2}} \quad (4.48)$$

Le module de compressibilité homogénéisé du matériau hétérogène est donc compris entre ces deux bornes :

$$K^{HS-} \leq K^H \leq K^{HS+} \quad (4.49)$$

### 4.3.2.2 Bornes pour le module de cisaillement $\mu$

$\mu_1$  étant le module de cisaillement le plus faible et  $\mu_n$  le module le plus élevé :

$$\mu^{HS-} = \mu_1 + \frac{1}{2} \frac{B_1}{(1 + \beta_1 B_1)} \quad (4.50)$$

$$\mu^{HS+} = \mu_n + \frac{1}{2} \frac{B_n}{(1 + \beta_n B_n)} \quad (4.51)$$

avec :

$$\beta_1 = -\frac{3(K_1 + 2\mu_1)}{5\mu_1(3K_1 + 4\mu_1)} \quad (4.52)$$

$$\beta_n = -\frac{3(K_n + 2\mu_n)}{5\mu_n(3K_n + 4\mu_n)} \quad (4.53)$$

$$B_1 = \sum_{i=2}^n \frac{f_i}{\frac{1}{2(\mu_i + \mu_1)} - \beta_1} \quad (4.54)$$

$$B_n = \sum_{i=2}^{n-1} \frac{f_i}{\frac{1}{2(\mu_i + \mu_n)} - \beta_n} \quad (4.55)$$

Ce qui nous donne pour le cas d'un matériau à deux phases :

$$\mu^{HS-} = \mu_1 + \frac{f_2}{\frac{1}{\mu_2 - \mu_1} + \frac{6(K_1 + 2\mu_1)f_1}{5\mu_1(3K_1 + 4\mu_1)}} \quad (4.56)$$

$$\mu^{HS+} = \mu_2 + \frac{f_1}{\frac{1}{\mu_1 - \mu_2} + \frac{6(K_2 + 2\mu_2)f_2}{5\mu_2(3K_2 + 4\mu_2)}} \quad (4.57)$$

Le module de cisaillement homogénéisé du matériau hétérogène est donc compris entre ces deux bornes :

$$\mu^{HS-} \leq \mu^H \leq \mu^{HS+} \quad (4.58)$$

### 4.3.2.3 Bornes pour la conductivité thermique $\lambda$

$$\lambda^{HS-} = \left( \sum_{i=1}^n f_i (\alpha_i + \lambda_i)^{-1} \right)^{-1} + \alpha_1 \quad (4.59)$$

$$\lambda^{HS+} = \left( \sum_{i=1}^n f_i (\alpha_n + \lambda_i)^{-1} \right)^{-1} + \alpha_n \quad (4.60)$$

avec :

$$\alpha_1 = f_1 \lambda_1 + f_i \lambda_i - \frac{f_1 f_i (\lambda_i - \lambda_1)^2}{f_1 \lambda_i + f_i \lambda_1 + (d-1) \lambda_1} \quad (4.61)$$

$$\alpha_n = f_n \lambda_n + f_i \lambda_i - \frac{f_n f_i (\lambda_n - \lambda_i)^2}{f_i \lambda_n + f_n \lambda_i + (d-1) \lambda_i} \quad (4.62)$$

Ce qui nous donne en deux dimensions ( $d = 2$ ) pour le cas d'un matériau à deux phases :

$$\lambda^{HS-} = f_1 \lambda_1 + f_2 \lambda_2 - \frac{f_1 f_2 (\lambda_2 - \lambda_1)^2}{f_1 \lambda_2 + f_2 \lambda_1 + \lambda_1} \quad (4.63)$$

$$\lambda^{HS+} = f_1 \lambda_1 + f_2 \lambda_2 - \frac{f_1 f_2 (\lambda_2 - \lambda_1)^2}{f_1 \lambda_2 + f_2 \lambda_1 + \lambda_2} \quad (4.64)$$

Pour le cas en trois dimensions ( $d = 3$ ) :

$$\lambda^{HS-} = \lambda_1 + \frac{3f_2 \lambda_1 (\lambda_2 - \lambda_1)}{3\lambda_1 + f_1 (\lambda_2 - \lambda_1)} \quad (4.65)$$

$$\lambda^{HS+} = \lambda_2 + \frac{3f_1 \lambda_2 (\lambda_2 - \lambda_1)}{3\lambda_2 + f_2 (\lambda_2 - \lambda_1)} \quad (4.66)$$

La conductivité thermique homogénéisée du matériau hétérogène est donc comprise entre ces deux bornes :

$$\lambda^{HS-} \leq \lambda^H \leq \lambda^{HS+} \quad (4.67)$$

## 4.4 Le schéma itératif de la solution

La méthode des éléments finis est généralement une excellente alternative pour l'évaluation du comportement des matériaux, mais elle est généralement coûteuse en temps CPU. L'idée de cette partie est d'approximer avec plus de précision la solution exacte au moyen d'un schéma itératif simple basé sur les limites du premier ordre (*Voigt-Reuss*) ou du second ordre (*Hashin-Shtrikman*).

La solution éléments finis est considérée comme une référence pour la convergence de la solution itérative. Les propriétés considérées pour chaque cas sont le module de compressibilité, le module de cisaillement et la conductivité thermique. Pour chaque variable de sortie dans l'analyse 2D et 3D, une méthode a été élaborée en utilisant le langage Fortran.

La solution finale obtenue est basée sur la réduction d'erreur entre la nouvelle valeur calculée à l'incrément  $i + 1$  et l'incrément précédent  $i$ . La solution converge lorsque l'erreur est inférieure à la tolérance désirée. La solution ainsi obtenue est comparée à la solution obtenue par l'analyse par éléments finis. La procédure de mise en œuvre est donnée par l'organigramme illustré sur la figure 4.2. L'exécution de la procédure nécessite l'initialisation des fichiers d'entrée qui contiennent le module de *Young*  $E$  et le coefficient de *Poisson*  $\nu$  ou la conductivité thermique  $\lambda$  de chaque phase, la fraction volumique initiale  $P$ , l'incrément de temps et la tolérance  $Tol$ . Pour chaque cas, l'expression des variables de sortie est formulée à partir d'un point de vue incrémental pour obtenir l'évolution de cette variable en fonction de la fraction volumique de la seconde phase.

Les expressions ont été formulées pour prendre en compte à la fois les cas bidimensionnels et tridimensionnels afin d'être considérées comme des sujets de comparaison et de rendre l'approche plus réaliste.



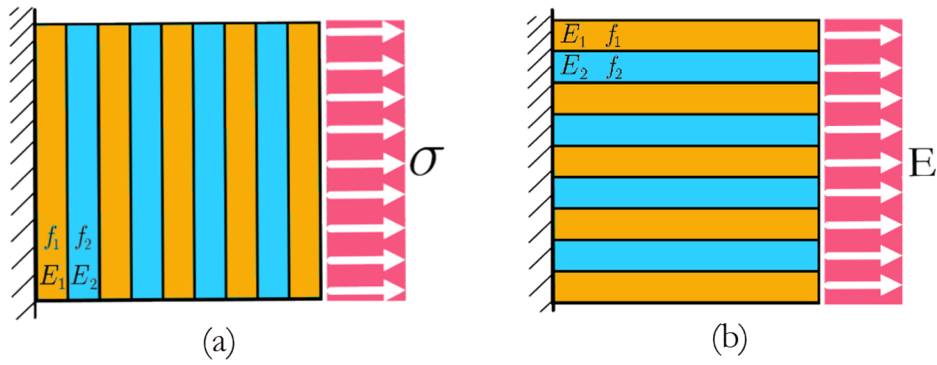


FIGURE 4.1. Interprétations géométriques des bornes du premier ordre : (a) *Voigt*, (b) *Reuss*.

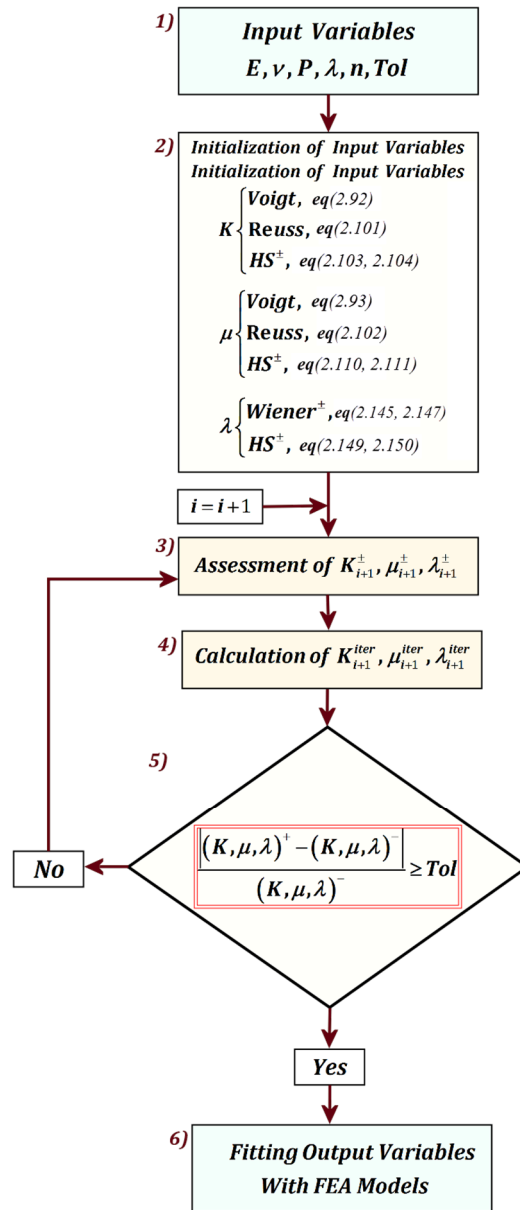


FIGURE 4.2. Organigramme de résolution du schéma itératif.

## 4.5 Comparaison des résultats et discussions

Les résultats sont validés par une comparaison est effectuée entre les résultats obtenus par le programme itératif des bornes *Voigt-Reuss* et *Hashin-Shtrikman* avec ceux obtenus par la méthode des éléments finis des modules élastiques et de la conductivité thermique, pour différents contrastes en 2D et 3D.

Nous supposons un matériau hétérogène biphasique avec deux phases isotropes et un coefficient de *Poisson*  $\nu = 0.3$ . Les données d'entrée pour les différents contrastes sont illustrées dans les tableaux 4.1 et 4.2 :

### - Cas 2D

D'après (4.27) on a :  $K = \frac{E}{2(1+\nu)(1-2\nu)}$ ,

Module de Young $E$ , [GPa]			Contraste
Matériau 1	Phase 1	$E_1 = 9$	23
	Phase 2	$E_2 = 210$	
Matériau 2	Phase 1	$E_1 = 4$	100
	Phase 2	$E_2 = 400$	
Matériau 3	Phase 1	$E_1 = 4$	1000
	Phase 2	$E_2 = 4000$	

(a)

Module de compressibilité $K$ , [GPa]			Contraste
Matériau 1	Phase 1	$K_1 = 8.65$	23
	Phase 2	$K_2 = 201.92$	
Matériau 2	Phase 1	$K_1 = 3.84$	100
	Phase 2	$K_2 = 384.61$	
Matériau 3	Phase 1	$K_1 = 3.84$	1000
	Phase 2	$K_2 = 3846.15$	

(b)

D'après (4.26), on a :  $\mu = \frac{E}{2(1+\nu)}$ ,

Module de cisaillement $\mu$ , [GPa]			Contraste
Matériau 1	Phase 1	$\mu_1 = 3.46$	23
	Phase 2	$\mu_2 = 80.77$	
Matériau 2	Phase 1	$\mu_1 = 1.54$	100
	Phase 2	$\mu_2 = 153.84$	
Matériau 3	Phase 1	$\mu_1 = 1.54$	1000
	Phase 2	$\mu_2 = 1538.46$	

(c)

Conductivité thermique $\lambda$ , [ $Wm^{-1}K^{-1}$ ]			Contraste
Matériau 1	Phase 1	$\lambda_1 = 2$	25
	Phase 2	$\lambda_2 = 50$	
Matériau 2	Phase 1	$\lambda_1 = 2$	100
	Phase 2	$\lambda_2 = 100$	
Matériau 3	Phase 1	$\lambda_1 = 2$	1000
	Phase 2	$\lambda_2 = 2000$	

(d)

Tableau 4.1. Les données d'entrée pour les différents matériaux considérés dans le programme itératif, cas 2D : (a) Module de Young  $E$ , (b) Module de compressibilité  $K$ , (c) Module de cisaillement  $\mu$ , (d) Conductivité thermique  $\lambda$ .

## - Cas 3D

D'après (4.11), on a :  $K = \frac{E}{3(1-2\nu)}$ ,

Module de Young $E$ , [GPa]		Contraste	
Matériau 1	Phase 1	$E_1 = 9$	23
	Phase 2	$E_2 = 210$	
Matériau 2	Phase 1	$E_1 = 4$	100
	Phase 2	$E_2 = 400$	
Matériau 3	Phase 1	$E_1 = 4$	1000
	Phase 2	$E_2 = 4000$	

(a)

Module de compressibilité $K$ , [GPa]		Contraste	
Matériau 1	Phase 1	$K_1 = 7.5$	23
	Phase 2	$K_2 = 175$	
Matériau 2	Phase 1	$K_1 = 3.33$	100
	Phase 2	$K_2 = 333.33$	
Matériau 3	Phase 1	$K_1 = 3.33$	1000
	Phase 2	$K_2 = 3333.33$	

(b)

D'après (4.4), on a :  $\mu = \frac{E}{2(1+\nu)}$ ,

Module de cisaillement $\mu$ , [GPa]		Contraste	
Matériau 1	Phase 1	$\mu_1 = 3.46$	23
	Phase 2	$\mu_2 = 80.77$	
Matériau 2	Phase 1	$\mu_1 = 1.54$	100
	Phase 2	$\mu_2 = 153.84$	
Matériau 3	Phase 1	$\mu_1 = 1.54$	1000
	Phase 2	$\mu_2 = 1538.46$	

(c)

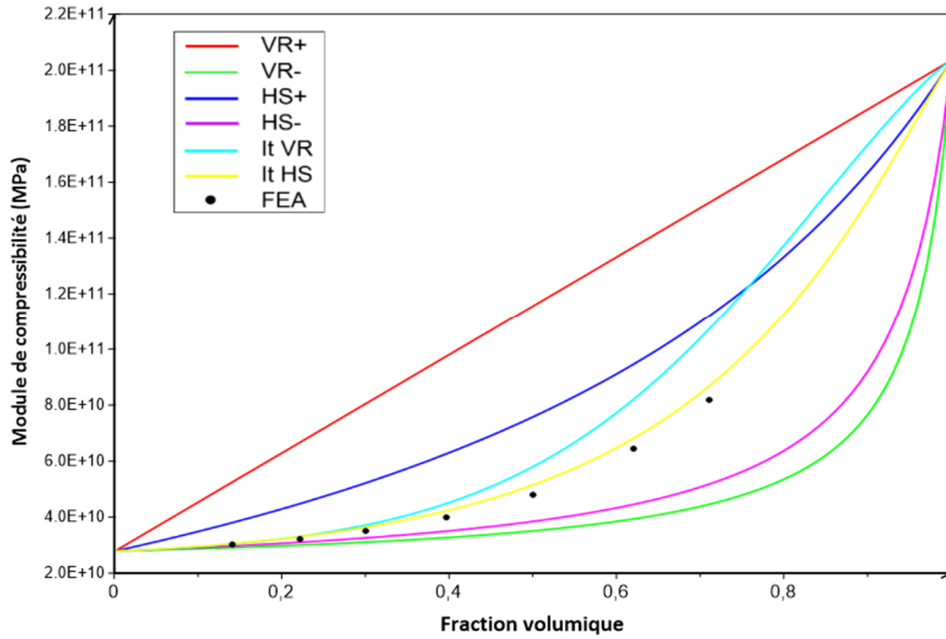
Conductivité thermique $\lambda$ , [ $Wm^{-1}K^{-1}$ ]		Contraste	
Matériau 1	Phase 1	$\lambda_1 = 2$	25
	Phase 2	$\lambda_2 = 50$	
Matériau 2	Phase 1	$\lambda_1 = 2$	100
	Phase 2	$\lambda_2 = 100$	
Matériau 3	Phase 1	$\lambda_1 = 2$	1000
	Phase 2	$\lambda_2 = 2000$	

(d)

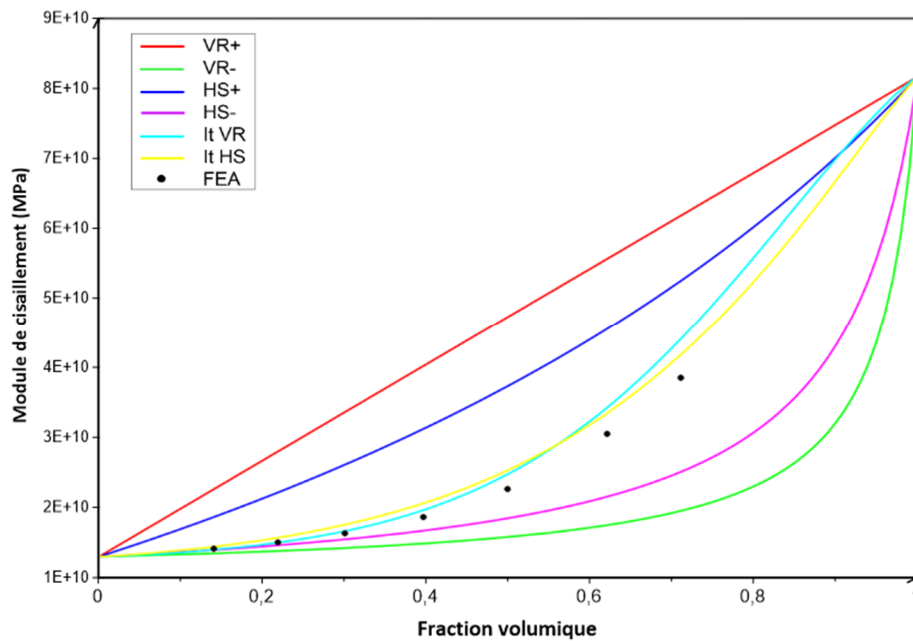
Tableau 4.2. Les données d'entrée pour les différents matériaux considérés dans le programme itératif, cas 3D : (a) Module de compressibilité  $K$ , (b) Module de cisaillement  $\mu$ , (c) Conductivité thermique  $\lambda$ .

## 4.5.1 Résultats obtenus pour un contraste de 23 pour le module de Young et 25 pour la conductivité thermique

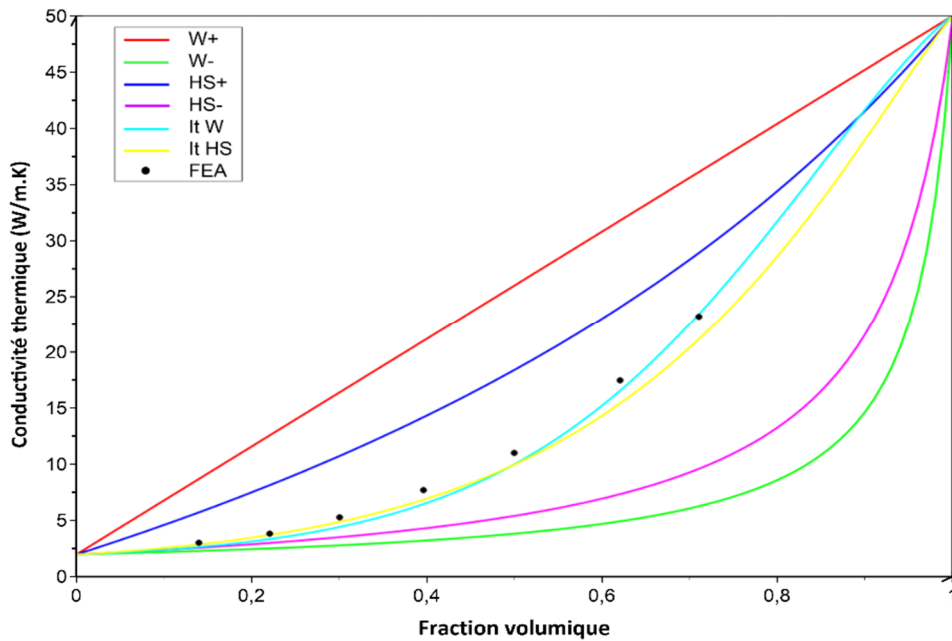
### 4.5.1.1 Cas d'un problème en deux dimensions



(a)



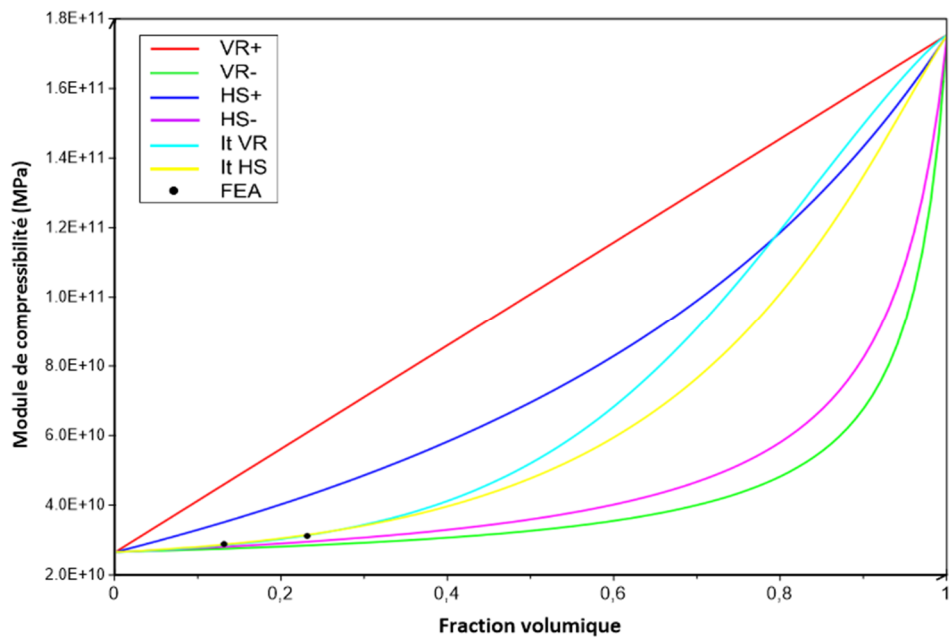
(b)



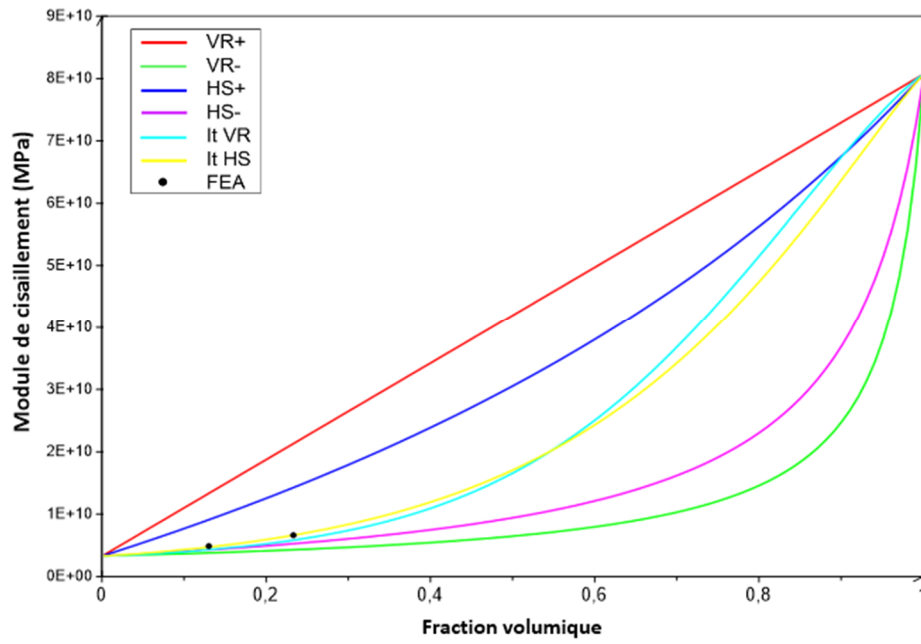
(c)

FIGURE 4.3. Résultats obtenus pour un matériau hétérogène de contraste 23, cas 2D : (a) Module de compressibilité  $K$ , (b) Module de cisaillement  $\mu$ , (c) Conductivité thermique  $\lambda$  (contraste 25).

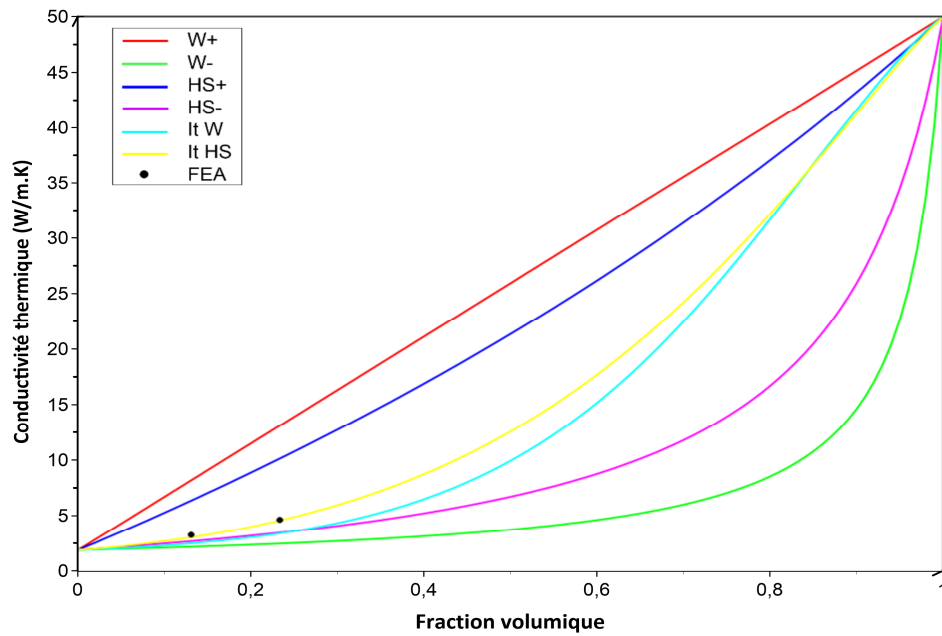
#### 4.5.1.2 Cas d'un problème en trois dimensions



(a)



(b)



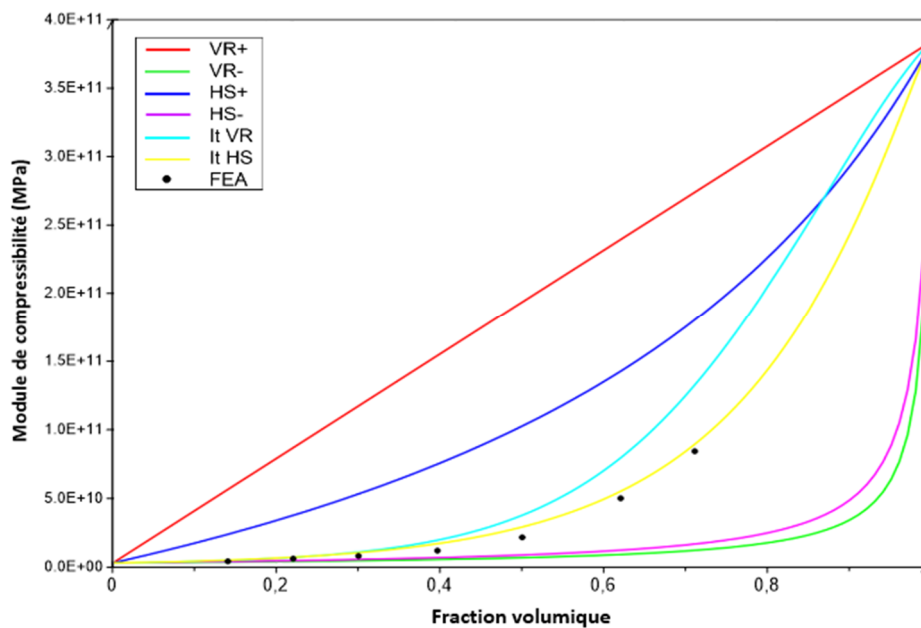
(c)

FIGURE 4.4. Résultats obtenus pour un matériau hétérogène de contraste 23, cas 3D : (a) Module de compressibilité  $K$ , (b) Module de cisaillement  $\mu$ , (c) Conductivité thermique  $\lambda$  (contraste 25).

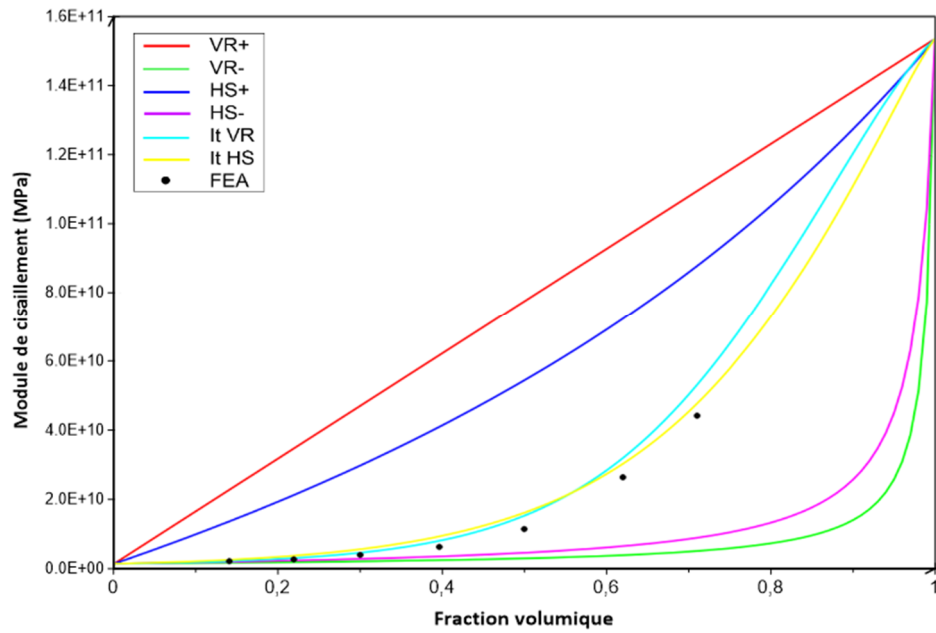
D'après les figures. 4.3 et 4.4, les résultats obtenus à partir de la nouvelle approche itérative sont en très bonne concordance avec ceux obtenus par l'analyse par éléments finis. Il faut noter ici que la fraction volumique, pour l'analyse par éléments finis 3D, est limitée à deux cas, du fait de la non possibilité numérique de réaliser des VER à fraction volumique supérieure à 23. Cette limitation n'existe pas dans l'évaluation analytique lorsque le processus itératif est utilisé. Les mêmes remarques peuvent être faites en 3D, on peut également noter que les résultats obtenus en 3D sont plus précis en comparaison de ceux en 2D du point de vue convergence des bornes. Cela peut être dû au fait que le cas 3D est plus réel que l'analyse par éléments finis en 2D.

## 4.5.2 Résultats obtenus pour un contraste égal à 100

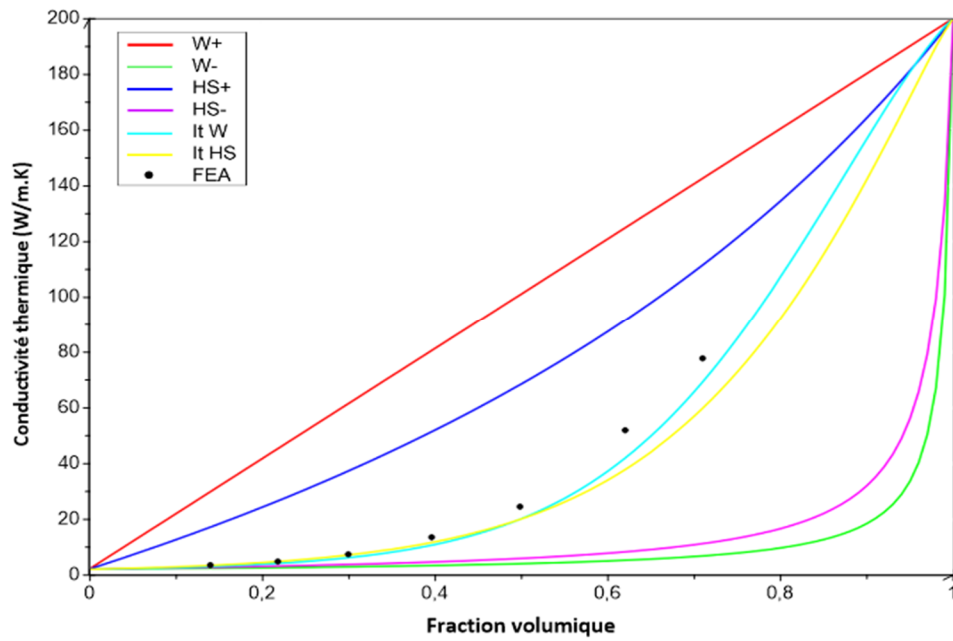
### 4.5.2.1 Cas d'un problème en deux dimensions



(a)



(b)

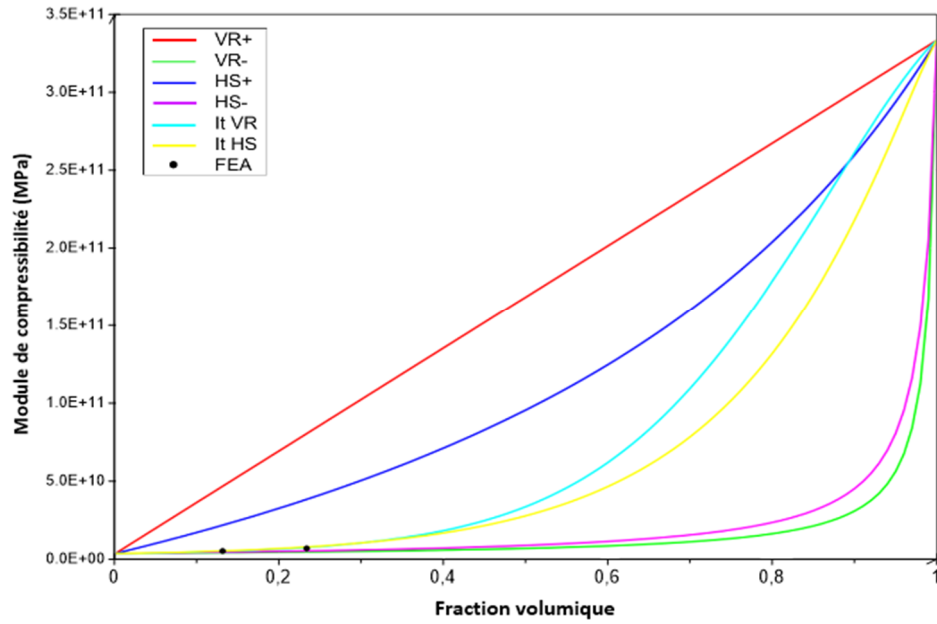


(c)

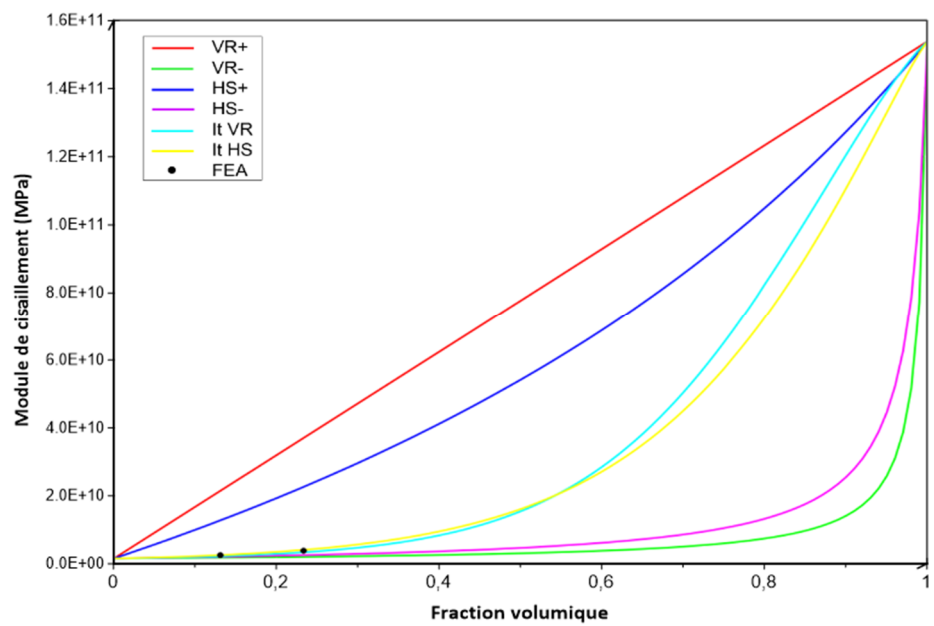
FIGURE 4.5. Résultats obtenus pour un matériau hétérogène de contraste 100, cas 2D, (a) Module de compressibilité  $K$ , (b) Module de cisaillement  $\mu$ , (c) Conductivité thermique  $\lambda$ .



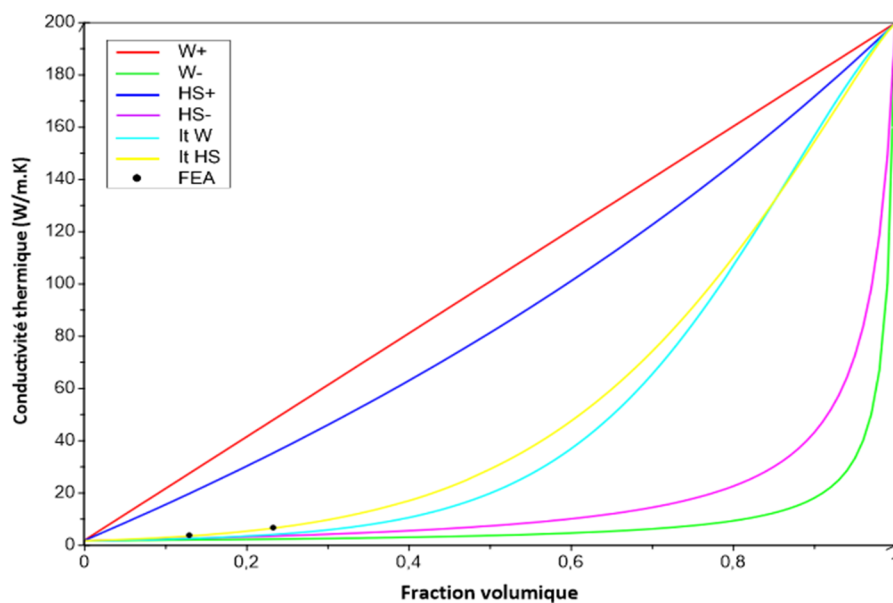
## 4.5.2.2 Cas d'un problème en trois dimensions



(a)



(b)



(c)

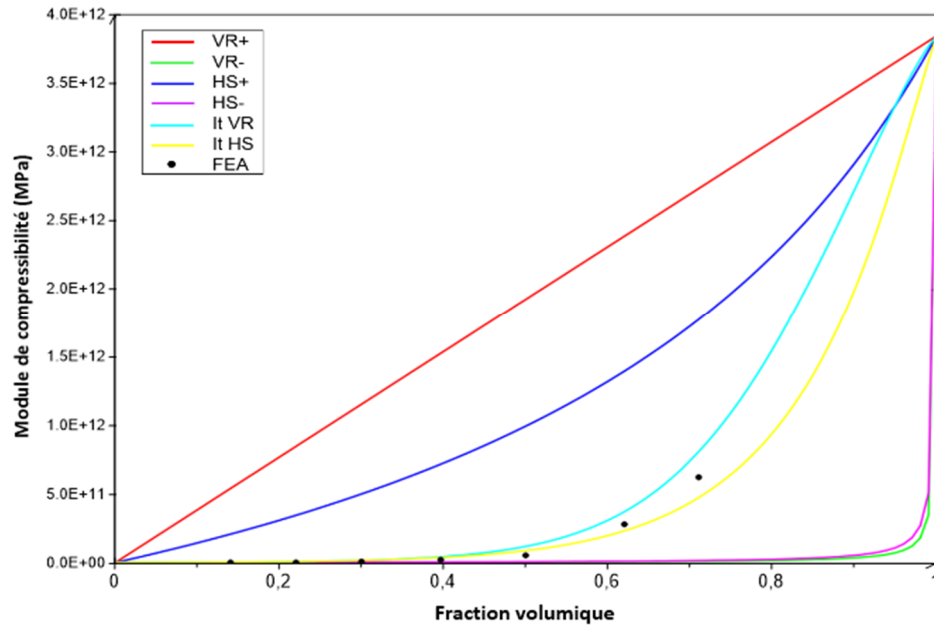
FIGURE 4.6. Résultats obtenus pour un matériau hétérogène de contraste 100, cas 3D, (a) Module de compressibilité  $K$ , (b) Module de cisaillement  $\mu$ , (c) Conductivité thermique  $\lambda$ .

Des figures 4.5 et 4.6, on peut noter que la procédure donne aussi une prédiction précise pour un contraste de 100. Les résultats obtenus à partir du processus itératif sont proches des valeurs obtenues à partir de l'analyse par éléments finis. Ceci montre la capacité de cette méthode à converger vers la solution lorsque les limites supérieure et inférieure originales de *Voigt-Reuss* et *Hashin-Shtrikman* donnent une image éloignée de la solution attendue obtenue à partir de l'analyse des éléments finis.

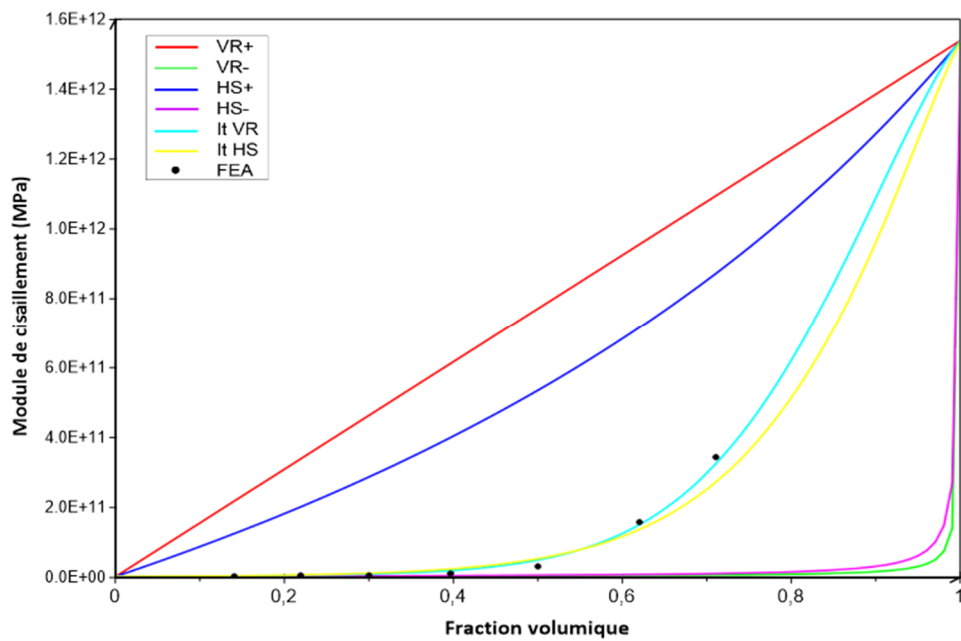
Les résultats obtenus en 3D sont pratiquement les mêmes que ceux obtenus en 2D. La procédure est cohérente à la fois pour les cas bidimensionnels et tridimensionnels et les résultats obtenus sont toujours proches de ceux obtenus à partir de l'analyse par éléments finis, lorsque les limites classiques ne permettent pas d'obtenir une estimation exacte ou cernent la solution avec des limites éloignées de la solution.

### 4.5.3 Résultats obtenus pour un contraste égal à 1000

#### 4.5.3.1 Cas d'un problème en deux dimensions



(a)



(b)

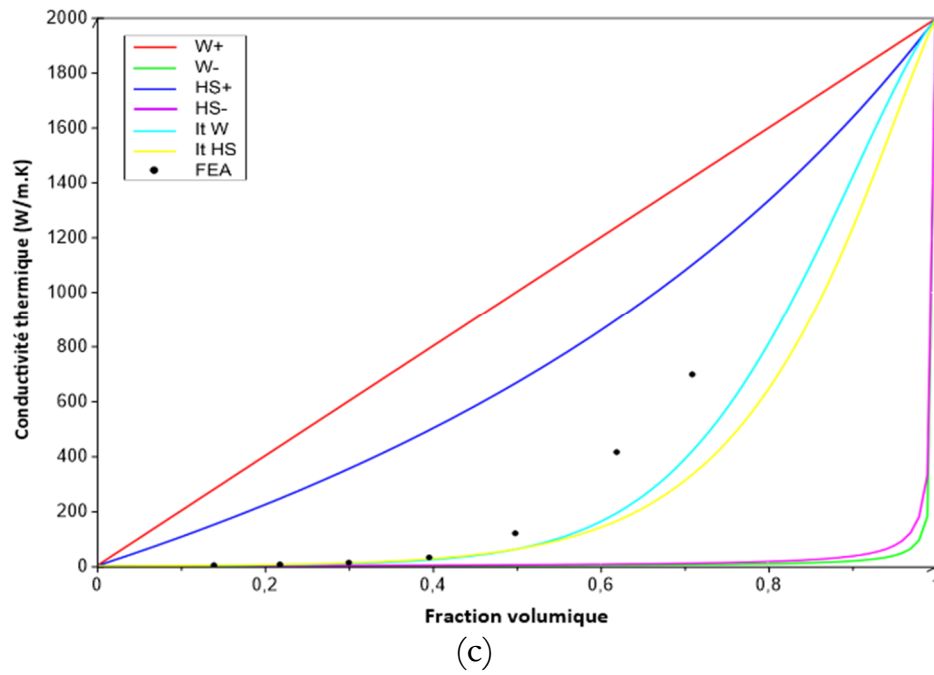
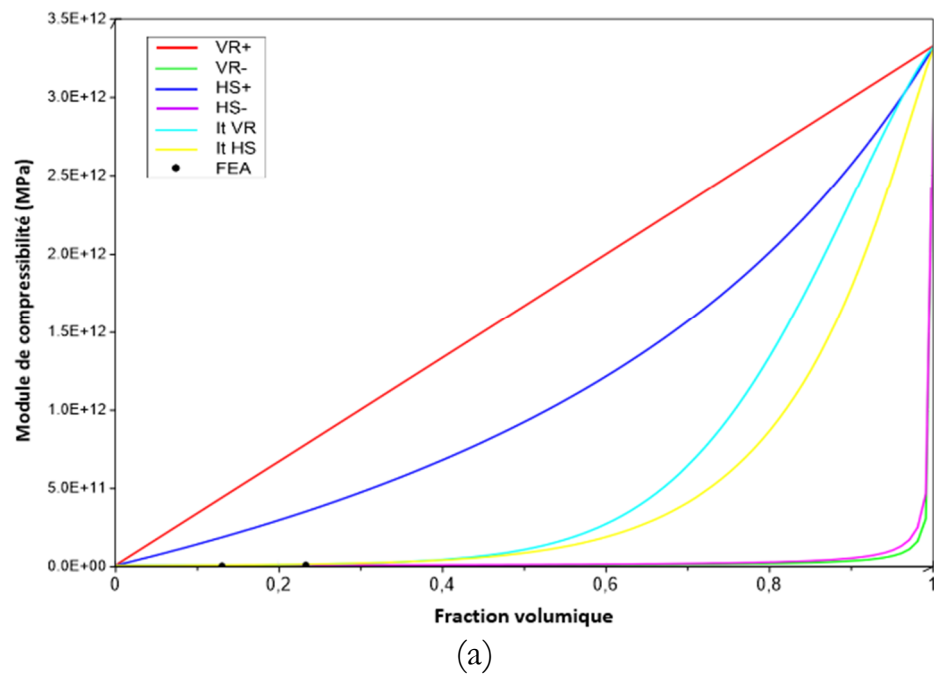
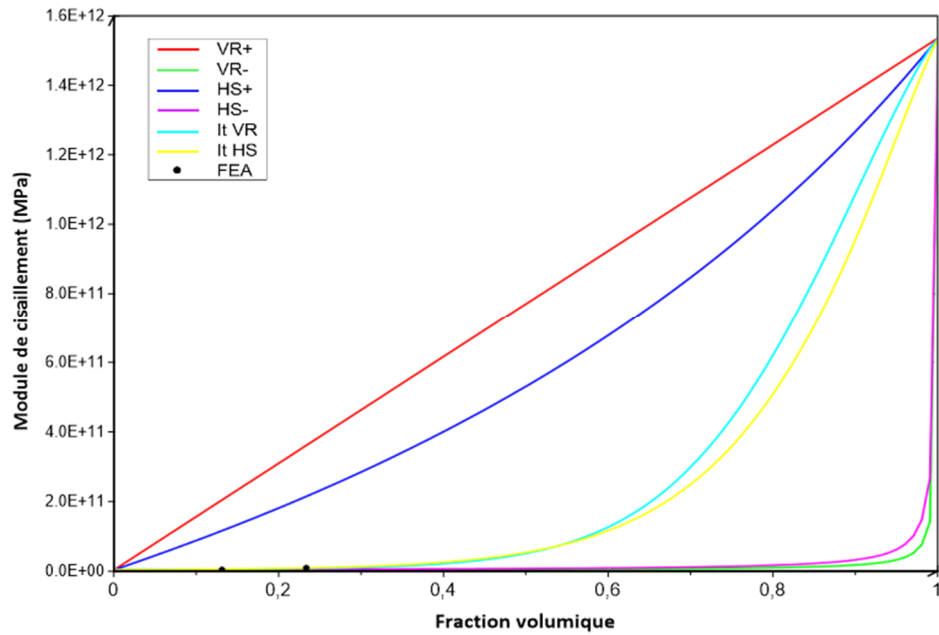


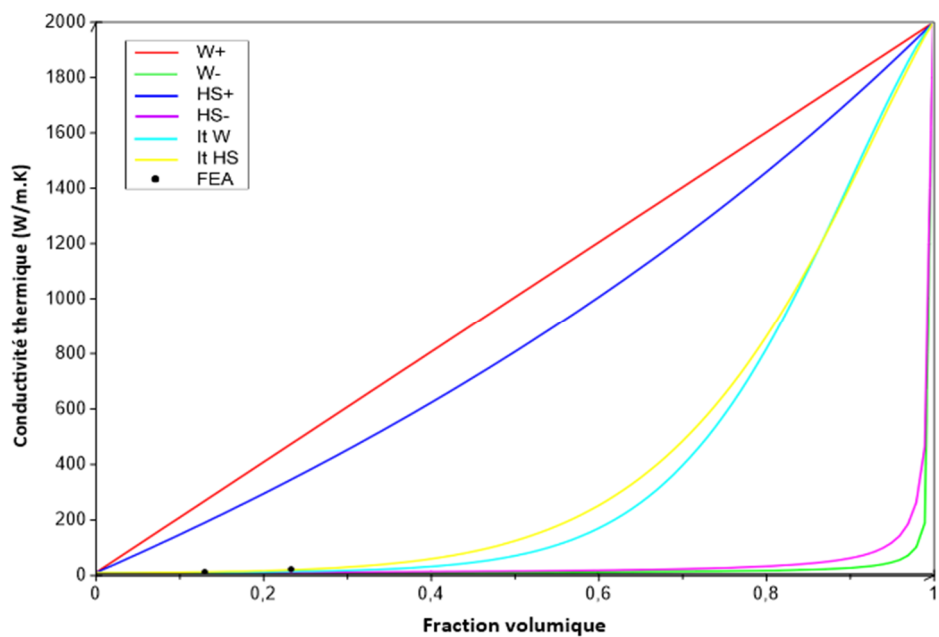
FIGURE 4.7. Résultats obtenus pour un matériau hétérogène de contraste 1000, cas 2D : (a) Module de compressibilité  $K$ , (b) Module de cisaillement  $\mu$ , (c) Conductivité thermique  $\lambda$ .

#### 4.5.3.2 Cas d'un problème en trois dimensions





(b)



(c)

FIGURE 4.8. Résultats obtenus pour un matériau hétérogène de contraste 1000, cas 3D, (a) Module de compressibilité  $K$ , (b) Module de cisaillement  $\mu$ , (c) Conductivité thermique  $\lambda$ .

Selon les figures 4.7 et 4.8, pour un contraste de 1000, les limites classiques de *Voigt-Reuss* et de *Hashin-Shtrikman* sont très éloignées et ne peuvent assurer un bon encadrement à la solution lorsque le processus itératif proposé donne, encore une autre fois, une très bonne estimation en la comparant avec le résultat obtenu par l'analyse par éléments finis.

## 4.6 Synthèse

Dans cette partie, nous avons proposé un modèle itératif d'homogénéisation des matériaux hétérogènes considérés comme une association de plusieurs phases élastiques isotropes et homogènes. À partir des modules élastiques et des fractions volumiques de ces phases, et à l'aide d'un programme en langage *Fortran*, nous avons pu déterminer les propriétés effectives des matériaux hétérogènes, en appliquant, un processus itératif, aux bornes *Voigt et Reuss*, ou les bornes *Hashin-Shtrikman* pour les propriétés mécaniques et les bornes de *Wiener* pour la conductivité thermique. Une comparaison entre les différents résultats obtenus par le modèle itératif et ceux obtenus en effectuant un calcul par la méthode des éléments finis à l'aide du code de calcul *Zebulon*, pour différents contrastes (23, 100 et 1000), à deux et trois dimensions a été effectuée.

De ce fait, on peut conclure que les résultats obtenus avec le programme itératif sont dans la majorité des cas les mêmes que ceux obtenus avec la méthode des éléments finis, et que les bornes *Hashin-Shtrikman* sont plus précises que celles de *Voigt et Reuss*.

Cette méthode convient à différents cas de contrastes et différentes fractions volumiques pour des problèmes à deux et trois dimensions, ce qui la rend approprié pour une large gamme matériaux hétérogènes avec des phases ayant des propriétés mécaniques différentes.

Elle présente un autre avantage par rapport à l'analyse par éléments finis, il n'y a pas de limitation en termes de fraction volumique, alors que dans la simulation numérique, les résultats obtenus sont très limités pour le cas 3D.

Ce schéma itératif prédit avec succès la réponse globale des matériaux hétérogènes en termes de coefficient de compressibilité, de module de cisaillement et de conductivité thermique. Cette capacité est importante et rend la méthode adaptée à une large gamme de matériaux composites avec diverses fractions volumiques des renforts. Les résultats obtenus à partir de l'analyse par éléments finis sont reproduits avec succès à un coût peu coûteux en termes d'analyse du temps. Du fait que cette méthode peut traiter une large gamme de contraste, elle convient également aux matériaux poreux comme les mousses et les revêtements.

Conclusion



## 5. Conclusion

Avec un marché en continuelle expansion, le secteur des matériaux composites annonce une croissance continue. Grâce à ce procédé d'assemblage associant une fibre à une matrice, les industriels ont l'opportunité de développer des matériaux au design nouveau, plus légers, plus résistants et renfermant de très hautes performances. Ces matériaux composites se substituent de plus en plus aux métaux traditionnels dans la plupart des applications industrielles. Ils sont utilisés dans de nombreuses applications et inondent de plus en plus notre quotidien. Outre dans les utilisations aéronautiques et aérospatiales, ils sont également présents dans les secteurs du génie civil, de l'automobile, de la construction navale, de l'éolien, du sport, ils servent aussi à l'élaboration de nouveaux matériaux de pointe et dans la fabrication de textiles techniques. Les composites que nous avons étudiés ici sont plus particulièrement les composites poreux dont les caractéristiques mécaniques et physiques sont plus intéressantes que celles des matériaux dits standards.

Cette thèse avait pour objectif principal la détermination des propriétés élastiques et l'étude de l'influence de la morphologie des inclusions/pores sur ces dernières à savoir le coefficient de compressibilité  $K$ , le coefficient de cisaillement  $\mu$  et la conductivité thermique  $\lambda$  des matériaux hétérogènes à deux phases de type matrice-inclusion en utilisant l'homogénéisation numérique.

La première et la deuxième partie de cette thèse sont constituées principalement de rappels des méthodes et techniques d'homogénéisation des milieux hétérogènes. Les lois de comportement thermique et mécanique sont abordées. La notion de volume élémentaire représentatif est introduite et les conditions aux limites des problèmes d'homogénéisation sont ensuite analysées. Afin de pouvoir comparer les résultats provenant de l'homogénéisation numérique, les estimateurs et autres bornes analytiques sont aussi présentés.

La troisième partie de cette thèse a été consacrée à l'étude de l'influence de la forme des pores sur les propriétés mécaniques élastiques, nous avons utilisé une approche d'homogénéisation numérique pour estimer ces propriétés effectives des microstructures à sept formes distinctes d'inclusions/pores. Plusieurs simulations ont été effectuées afin d'explorer l'influence des paramètres morphologiques sur la propriété étudiée. Une grille de maillage régulière a été utilisée pour la détermination du V.E.R. optimal où un nombre important de microstructures a été traité, ce qui s'est traduit par un temps de calcul long.

L'influence de la morphologie des pores a été mise en évidence, pour des fractions volumiques différentes  $P=10\%$ ,  $P=30\%$  et  $P=50\%$ . L'effet de la morphologie des pores sur la résistance maximale à la traction est très significatif. Il faut noter que les résultats numériques, obtenus par l'application des deux conditions aux limites (*KUBC*) et (*PBC*) sur différentes réalisations, ont montré que les microstructures formées à partir des pores de formes géométriques lisses sans arêtes vives ou pointues (comme la forme totalement circulaire) offrent une résistance plus élevée,

et ceci pour le module de compressibilité  $K$  et pour le module de cisaillement  $\mu$ .

L'ensemble des résultats numériques obtenus ont été validés par les approches analytiques. Ce résultat ouvre une perspective à exploiter dans le futur.

Dans la quatrième partie de cette thèse, en utilisant les bornes analytiques du premier ordre *Voigt* et *Reuss*, et du deuxième ordre *Hashine* et *Strickman*, une nouvelle procédure opérante pour l'homogénéisation des matériaux hétérogènes a été établie, un programme en langage Fortran a également été élaboré. Un schéma itératif original basé sur une solution d'estimation de la mise à jour de l'erreur pour approcher la solution exacte qui est considérée par défaut comme la solution des éléments finis. La procédure prédit avec succès la réponse globale des matériaux hétérogènes en ce qui concerne le coefficient de compressibilité  $K$ , de module de cisaillement  $\mu$  et de conductivité thermique  $\lambda$ . La procédure est prouvée pour convenir à la fois aux cas 2D et 3D et les résultats obtenus à partir de l'analyse par éléments finis sont reproduits avec succès à un coût peu coûteux sur le plan d'analyse du temps. La procédure est également adaptée à une large gamme sur le plan de contraste, ce qui la rend appropriée pour de nombreux matériaux hétérogènes avec des phases ayant des propriétés mécaniques différentes. Elle convient également pour différentes fractions volumiques. Cette capacité est importante et rend la procédure adaptée à une large gamme de matériaux composites avec diverses fractions de renforcement et de volume. Cette méthode convient également aux matériaux poreux comme les mousses et les revêtements.

# Annexe

Les outils numériques utilisés dans de cette thèse sont :

## A1. Fortran 90 **Fortran**

Le langage Fortran peut être considéré comme l'un des premiers langages de programmation moderne. Il fut créé en 1954 par [John Backus](#) (1924-2007), le nom Fortran est une abréviation pour **FOR**mula **TRAN**slator. Le langage Fortran nécessite une compilation pour transformer le code en langage binaire compréhensible par l'ordinateur. La compilation crée un fichier binaire qui est exécutable. Il existe différents compilateurs de code Fortran dont voici une liste non exhaustive.

Fortran 90/95...2003

- *gFortran* : disponible dans les distributions Linux ou g95,
- *ifort* : Le compilateur de intel, Il est disponible gratuitement pour un usage non commercial,
- *ftn95* : Le compilateur de Silverfrost,
- *xlf90* : Le compilateur pour les machines IBM,
- *pgf* : Le compilateur Portland pour Fortran,
- *pathf* : Le compilateur Pathscale pour Fortran.

### *Historique du fortran*

Il a été standardisé en 1972 sous la forme du fortran 66 et son efficacité dans le calcul scientifique en a fait le langage le plus utilisé dans les applications non commerciales. La mise à jour du standard à la fin des années 1970 a apporté d'énormes améliorations en particulier dans le traitement des chaînes de caractères avec le fortran 77. Mais c'est avec fortran 90, qu'est intervenue une véritable modernisation du langage fortran.

Cette nouvelle version a permis un nettoyage des éléments les plus obsolètes du Fortran (format fixe par exemple, lié à l'utilisation des cartes perforées). Elle a aussi introduit des fonctionnalités nouvelles parfois présentes dans des langages plus récents, parmi lesquelles nous ne soulignerons que les plus attendues dans notre domaine d'applications :

- Langage de programmation structuré,
- Outils de manipulation des tableaux (multidimensionnels) puissants,
- Adaptés au calcul vectoriel et parallèle,
- Gestion dynamique, pointeurs,
- Création de types dérivés (structures), surcharge d'opérateurs, généricité,
- Fiabilisation des passages d'arguments entre procédures.

Enfin, l'évolution du langage fortran a continué avec le fortran 95, qui constitue une révision mineure, mais surtout le fortran 2003, dont le standard a été publié en novembre 2004. Il apporte notamment :

- Une interopérabilité normalisée avec le langage C,
- De nouvelles possibilités concernant les tableaux dynamiques et les types dérivés,
- Des fonctionnalités de programmation orientée objet,
- Une meilleure intégration dans le système d'exploitation.

La nouvelle norme de fortran 2008 constitue une évolution mineure par rapport au fortran 2003 avec notamment la notion de sous-module, des outils de programmation parallèle (en particulier les tableaux distribués), la notion de bloc avec ses variables locales, de nouvelles fonctions mathématiques intrinsèques... Les discussions sur le prochain standard (initialement nommé fortran 2015, puis renommé fortran 2018) sont en cours pour une publication en août 2018.

## A2. Le code de calcul Zébulon



Zébulon est le solveur d'éléments finis de pointe de la suite Z-set. Il aborde l'ensemble des problèmes liés à la mécanique des structures. Dès le début, le code s'est spécialisé dans les modèles de matériaux hautement non linéaires et a depuis évolué pour inclure des problèmes thermiques et de diffusion et pour gérer le couplage de ces modèles.

Développé conjointement par l'ONERA, *Northwest Numerics (Seattle, USA)*, et le Centre des Matériaux, Zébulon. Programmé en C++, Zébulon présente une structure modulaire orientée objet, qui comprend principalement :

Z-master : interface graphique de pré et post-traitement. Z-master est aujourd'hui distribué sous deux versions : Z-master2D, qui comprend un mailleur bidimensionnel ouvrant sur des constructions tridimensionnelles par extrusion, et Z-master3D, qui intègre les mailleurs BLSurf (tridimensionnel surfacique) et GHS3D (tridimensionnel volumique) développés à l'INRIA;

- Z-solve : solveur numérique;
- Z-psolve : solveur numérique parallèle;
- Z-post : post-traitement séquentiel ou parallèle, qui propose un dépouillement des résultats de façon globale ou locale;
- Z-sim : simulateur visant, avant d'entreprendre un calcul de structure complet, à tester les lois de comportement sur un élément de volume;
- Z-optim : optimiseur adapté à la résolution des problèmes inverses, à la caractérisation des matériaux, et à l'optimisation de structures;
- Z-mat : une librairie matériau particulièrement fournie, qui permet de concevoir des lois de comportement complexes par le biais d'une interface modulable orientée objet, reposant sur le langage utilisateur ZebFront.

### A3. Golden Software Grapher

Grapher est un logiciel développé par Golden Software. Il permet de créer des graphiques linéaires ou logarithmiques 2D et 3D, des diagrammes de dispersion, des bulles, de fonctions et de diagrammes à barres. Il permet aussi de créer des courbes polaires de ligne, de barre et de fonction, également des diagrammes ternaires de lignes, de nuages de points ou de bulles. Grapher permet d'afficher les données dans plusieurs types de graphiques spécialisés, des informations statistiques avec des histogrammes, des diagrammes à secteurs. Grapher propose plus de 70 options graphiques 2D et 3D différentes pour afficher au mieux les données.

## A4. Matlab

MATLAB est un langage de programmation de quatrième génération émulé par un environnement de développement du même nom ; il est utilisé à des fins de calcul numérique. Développé par la société The MathWorks, MATLAB permet de manipuler des matrices, d'afficher des courbes et des données, de mettre en œuvre des algorithmes, de créer des interfaces utilisateurs, et peut s'interfacer avec d'autres langages comme le C, C++, Java, et Fortran. MATLAB peut s'utiliser seul ou bien avec des toolbox (« boîte à outils »). MATLAB associe un environnement de bureau adapté pour l'analyse par itération et les processus de conception avec un langage de programmation permettant d'exprimer directement les mathématiques sous forme de tableaux et de matrices. Il est Conçu de façon professionnelle, les toolbox MATLAB sont développées de façon professionnelle, rigoureusement testées et intégralement documentées.

## A5. Gnuplot

Gnuplot est un logiciel qui sert à produire des représentations graphiques en deux ou trois dimensions de fonctions numériques ou de données. Le programme fonctionne sur de nombreux ordinateurs et systèmes d'exploitation (Linux, Windows, OS/2, VMS...) et peut envoyer les graphiques à l'écran ou dans des fichiers dans de nombreux formats.



# Bibliographie



# Bibliographie

**Aboudi, J., 1991.** A unified micromechanical approach, *mechanics of composite materials*. Elsevier.

**Al-Raoush, R. et al., 2010.** Representative elementary volume analysis of porous media sing X-ray computed tomography. *Powder Technology*, 200 : 69–77.

**Altendorf, H., 2011.** 3D morphological analysis and modelling of random fiber networks. *Rapport de these*.

**Badiche, X. et al., 2000.** Mechanical properties and non-homogeneous deformation of open-cell nickel foams: application of the mechanics of cellular solids and of porous materials. *Materials Science and Engineering*, 289 : 276–288.

**Barbe, F. et al., 2001.** Intergranular and intragranular behaviour of polycrystalline aggregates. Part 1: F.E. model. *International journal of plasticity*, 17 : 513-536.

**Barbe, F. et al., 2001.** Intergranular and intragranular behaviour of polycrystalline aggregates. Part 2: Results. *International journal of plasticity*, 17 : 537-563.

**Bensoussan, A. L. et Papanicolaou, G., 1978.** Asymptotic Analysis for Periodic Structures. *Studies in mathematics and its applications*, volume 5.

**Benveniste, Y, A., 1987.** New approach to the application of mori-tanaka's theory in composite materials. *Mechanics of Materials*, 6 :147–157.

**Beran, M. J., 1968.** Statistical Continuum Theories. Interscience publishers. J. Wiley and Sons. New York.

**Berveiller, M. et Zaoui, A., 1979.** An extension of the self consistant scheme to plasticity-flowing polycrystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 26 : 325–344.

**El Moumen, A. et al., 2013.** Effect of overlapping inclusions on effective elastic properties of composites. *Mechanics Research Communications* 53 : 24– 30

**Escoda, J., 2012.** Modélisation morphologique et micromécanique 3D de matériaux cimentaires. Mathématiques générales. *Thèse de doctorat. Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris*.

- Eshelby, J. D., 1957.** The determination of elastic field of an ellipsoidal inclusion and related problems. *Proceeding of Royal Society, A* 421.
- Evesque, P., 2000.** Fluctuations, correlation and representative elementary volume (REV) in granular materials. *Poudre and grains*, 11 : 6–17.
- Feyel, F. et Chaboche, J., 2000.** Fe2 multiscale approach for modeling the elastoviscoplastic behavior of long fibre sic/ti composite materials. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 183 : 309–330.
- Forest, S. et al., 2002.** Introduction au calcul de microstructures. Elements of microstructural mechanics. *Mécanique & Industrie*, 3 : 439–456.
- Forest, S. et al., 2006.** Milieux continus généralisé et matériaux hétérogènes. *Mines PARIS Les presses*.
- Gibson, R. F., 1994.** Principles of Composite Materials Mechanics. *McGraw-Hill Inc., New York*, ISBN 0-07-023451-5.
- Gilormini, P. et Bréchet, Y., 1998.** Mechanical properties of heterogeneous media: Which material for which model? Which model for which material? *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 7 : 805–816.
- Gitman, I., 2007.** Representative volume : Existence and size determination. *Engineering fracture mechanics*, 74, 2518–2534.
- González et al., 2004.** Numerical simulation of elasto-plastic deformation of composites : evolution of stress microfields and implications for homogenization models. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 52 : 1573–1593.
- Guo, Z. et al., 2014.** Mechanical modeling of incompressible particle-reinforced neo-hookean composites based on numerical homogenization. *Mechanics of Materials*, 70 : 1–17.
- Gusev, A., 1997.** Representative volume element size for elastic composites: a numerical study. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 45 : 1449–1459.
- Guth, E. et Gold, O., 1938.** On the hydrodynamical theory of the viscosity of suspensions. *Phys. Rev.*, 53 : 322.
- Han, H. et al., 2001.** The effect of three-dimensional multi-particle arrangements on the mechanical behavior and damage initiation of particle-reinforced MMCs. *Composites science and technology*, 61 : 1581–1590.
- Hashin, Z. et Shtrikman, S., 1962.** A variational approach to the theory of the elastic behaviour of polycrystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 10 : 343–352.
- Hashin, Z. et Shtrikman, S., 1963.** A variational approach to the theory of the elastic behavior of multiphase materials. *Journal of Mechanics of Physics and Solids*, 11 : 127–140.

- Hashin Z., 1983.** Analysis of composite materials – a survey. *J Appl Mech*, 50 : 481–505.
- Hazanov, S. et Huet, C., 1994.** Order relationships for boundary conditions effect in heterogeneous bodies smaller than the representative volume. *Journal of Mechanics of Physics and solids*, 42 :1995–2011.
- Herve, E. et Zaoui, A., 1995.** Elastic behaviour of multiply coated fibre-reinforced composites. *International Journal of Engineering Sciences*, 33 :1419–1433.
- Hill, R., 1963.** Elastic properties of reinforced solids: some theoretical principles. *Journal of Mechanics of Physics and solids*, 11 : 357–372.
- Huet, C., 1990.** Application of variational concepts to size effects in elastic heterogeneous bodies. *Journal of Mechanics of Physics and solids*, 38 : 813–841.
- Huet, C., 1991.** Hierarchies and bounds for size effects in heterogeneous bodies. In Proc. *Sixth Symposium on Continuum models and Discrete Systems, Dijon, 1989* (ed. G.Maugin), 2 : 127-134.
- Jean, A., 2009.** Etude d'un élastomère chargé de la nanostructure au micro-comportement. *Thèse de doctorat de l'Ecole nationale supérieure des mines de paris*.
- Jeulin, D. et Ostoja-Starzewski, M., 2000.** Mechanics of random and multiscale microstructures. ISBN 978-3-211-83684-2. Springer-Verlag Wien.
- Jeulin, D., 2001.** Caractérisation Morphologique et modèles de structures Aléatoires, Extrait de : Homogénéisation en mécanique des matériaux (tome1). ISBN 978-3-211-83684-2. Hermès, France.
- Jeulin, D., 2012.** Morphology and effective properties of multi-scale random sets. *C.R. mécanique*, 340 : 219–229.
- Kaddouri, W. et al., 2016.** On the effect of inclusion shape on effective thermal conductivity of heterogeneous materials. *Mechanics of Materials*, 92 : 28-41.
- Kanit, T., et al., 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.
- Kanit, T., et al., 2006.** Apparent and effective physical properties of heterogeneous materials : Representativity of samples of two materials from food industry. *Comput. Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 195 : 3960–3982.
- Kari, S. et al., 2007a.** Numerical evaluation of effective material properties of randomly distributed short cylindrical fibre composites. *Computational Materials Science*. 39 : 198–204.
- Kari, S. et al., 2007b.** Computational evaluation of effective material properties of composites reinforced by randomly distributed spherical particles. *Compos. Struct.* 77 : 223–231.

- Khan, K. A. et al., 2011.** Coupled heat conduction and thermal stress analyses in particulate composites. *Mechanics of Materials*, 43 : 608–625.
- Khdir, Y. et al., 2013.** Computational homogenization of elastoplastic composites. *International Journal of Solids and Structures*. 50 : 2829–2835.
- Khdir, Y. et al., 2015.** A computational homogenization of random porous media: Effect of void shape and void content on the overall yield surface. *European Journal of Mechanics A/Solids* 49 : 137-145.
- Kováčik, J. et Simančík, F., 1998.** Aluminium foam-modulus of alasticity and electrical conductivity according to percolation theory. *Scripta Mater*, 39 : 239–246.
- Lachihab, A. et Sab, K., 2008.** Does a representative volume element exists for fatigue life prediction? The case of aggregate composites. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 32, issue 9 : 1005–1021.
- Lippmann, N. et al., 1997.** 3D-finite-element-modelling of microstructures with the method of multiphase elements. *Computational Materials Science* 9 : 28–35.
- Madi, K., 2006.** Influence de la morphologie tridimensionnelle des phases sur le comportement mécanique de réfractaires électrofondus, *Thèse de Doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris*.
- Madi, K. et al., 2007.** Finite element simulations of the deformation of fused-cast refractories based on x-ray computed tomography. *Computational Materials Science*, 39 : 224–229.
- Matheron, G., 1975.** Random sets and integral geometry. *J. Wiley*, New York.
- Maxwell Garnett, J. C., 1904.** Colours in metal glasses and in metallic films. *Philosophical Transactions of the Royal Society A*, 203 : 385–420.
- Michel, J. C. et al., 1999.** Effective properties of composite materials with periodic microstructure : A computational approach. *Comput. Meth. Appl. Mech. Engng*, 172 : 109–143.
- Millar, D. I. A., 2012.** Energetic Materials at Extreme Conditions. *Doctoral Thesis*, ISBN 978-3-642-23131-5, Springer.
- Milton, G. W., 2002.** The Theory of Composites. *Cambridge University Press*, ISBN 0-521-78125-6.
- Milton, G. W., 1982.** Bounds on the elastic and transport properties of two-component composites. *Journal of Mechanics of Physics and Solids*, 30 : 177–191.
- Minshnaevsky Jr, L. L., 2004.** Three-dimensional numerical testing of microstructures of particle reinforced composites. *Acta Mater*, 52 : 4177–4188.
- Mori, T., Tanaka, K., 1973.** Average stress in the matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions. *Acta Metallurgica*, 21 : 571–574.

- Musielak, M. et al., 2013.** Détermination des paramètres de transfert du TCE à travers le béton. Journées techniques.
- Nguyen, V. D. et al., 2011.** Imposing periodic boundary condition on arbitrary meshes by polynomial interpolation. *Comp. Mater. Science.* 00 : 1–28.
- Ostoja-Starzewski, M., 1993.** Micromechanics as basis of random elastic continuum approximations. *Probabilistic Engineering Mechanics*, 8 : 107–114.
- Pierard, O. et al., 2007.** Micromechanics of elastoplastic materials reinforced with ellipsoidal inclusions. *International Journal of Solids and Structures*, 44, 6945–6962.
- Ponte Castaneda, 1989.** The overall constitutive behaviour of nonlinear elastic composites. *Proc. R. Soc. Lond.*, A422 : 147–171.
- Qi, B., 2006.** Simulation numérique du comportement mécanique de composites à particules. *Rapport de stage de master 2.* Ecole Centrale Paris.
- Quey, R. et al., 2011.** Large-scale 3d random polycrystals for the finite element method : Generation, meshing and remeshing. *Comp. Methds. Appl. Mech. Anrg*, 200 : 1729–1745.
- Reuss, A., 1929.** Berechnung der fließgrenz von mischkristellen auf grund der plastizitätsbedingung für einkristalle. *Z. Angew. Math. Mech*, 9 : 49–58.
- Romero, P. et Masad, E., 2001.** Relationship between the Representative Volume Element and Mechanical Properties of Asphalt Concrete. *Journal of Materials in Civil Engineering* – 13 : 0899-1561.
- Sab, K., 1992.** On the homogenization and the simulation of random materials. *European Journal of Mechanics, A. Solids* 11 : 585–607.
- Sab, K. et Nedjar, B., 2005.** Periodization of random media and representative volume element size for linear composites. *Comptes Rendus de l'Academie des Sciences - Serie IIb; Mécanique.*, 333 : 187–195.
- Sanchez-Palencia, E., 1974.** Comportement local et macroscopique d'un type de milieux physiques hétérogènes. *Int. J. Engrg. Sci.*, 12 : 331–351.
- Segurado, J. et Llorca, J., 2002.** A numerical approximation to the elastic properties of spherereinforced composites. *Journal of Mechanics of Physics and solids*, 50 : 2107–2121.
- Segurado, J. et Llorca, J., 2003.** A numerical investigation of the effect of particle clustering on the machanical properties of composites. *Acta Mater.* 51: 2355–2369.
- Segurado, J. et Llorca, J., 2006.** Computational micromechanics of composites : The effect of particle spatial distribution. *Mechanics of Materials*, 38 : 873–883.
- Smallwood, H., 1944.** Limiting law of the reinforcement of rubber. *J. Appl. Phys*, 758–766.
- Sukiman et al., 2017.** Effective properties of randomly oriented short and long fiber cases. *13ème Congrès de Mécanique.* Meknès, MAROC.

- Tawerghi et Yi., 2009.** A computational study on the effective properties of heterogeneous randommedia containing particulate inclusions. *J. Phys. D: Appl. Phys*, 42 : 175409.
- Terada, K. et al., 1997.** Digital image-based modeling applied to the homogenization analysis of composite materials. *Computational Mechanics*, 20 : 331–346.
- Terada, K. et Kikuchi, N., 1998.** Characterization of the mechanical behavior of solid-fluid mixture by homogenization method. *Comput. Methods. Appl. Engrg*, 153 : 223–257.
- Terada, K. et al., 2000.** Simulation of the multi-scale convergence in computational homogenization approaches. *International Journal of Solids and Structures*, 37 : 2285–2311.
- Thorpe, M. F. et Jasiuk, I., 1992.** New Results in the Theory of Elasticity for Two-Dimensional Composites. In : *Proceedings : Mathematical and Physical Sciences*, Vol 438, Issue 1904, 531-544.
- Torquato, S., 2002.** Random heterogeneous materials : microstructure and macroscopic properties. Springer.
- Tucker, C. L. et Liang, E., 1999.** Stiffness predictions for unidirectional short fiber composites : Review and evaluation. *Composites Science and Technology*, 59 : 655– 671.
- Van Mier JGM., 1997.** Fracture processes of concrete. USA: CRC Press, Inc.
- Vinson, J. et Sierakowski, R., 1987.** The behavior of structures composed of composite materials. Martinus, *Nijhoff Publishers, Dordrecht*.
- Voigt, W., 1889.** Uber die beziehung zwischen den beiden elastizitatskonstanten isotroper korper. *Wied. Ann*, 38 : 573–587.
- Wang, M. et Pan, N., 2008.** Modeling and prediction of the effective thermal conductivity of random open-cell porous foams. *Int. Journ. Heat. Mass .Transf.* 1325–1331.
- Wiener, O., 1912.** Die theorie des mischkorpers fur das feld des stationaren stromung. *Abhandl Math-Phys Kl Königl Sachsischen Ges*, 32 : 509–604.
- Willot, F. et Jeulin, D., 2009.** Elastic behavior of composites containing boolean random sets of inhomogeneities. *International Journal of Science*, 47 : 313–324.
- Zaoui, A., 1999.** Matériaux hétérogènes et composites. Ecole Polytechnique, Paris.
- Zeman, J. et Sejnoha, M., 2001.** Numerical evaluation of effective elastic properties of graphit fibre tow impregnated by polymer matrix. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 49 : 69–90.