



HAL
open science

Approche multi-échelles morphologique et directe pour une classe de composites particulaires fortement chargés hyperélastiques et visco-hyperélastiques.

Marion Touboul

► To cite this version:

Marion Touboul. Approche multi-échelles morphologique et directe pour une classe de composites particulaires fortement chargés hyperélastiques et visco-hyperélastiques.. Sciences de l'ingénieur [physics]. ISAE-ENSMA Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique - Poitiers, 2007. Français. NNT: . tel-00451829

HAL Id: tel-00451829

<https://theses.hal.science/tel-00451829>

Submitted on 31 Jan 2010

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

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

THÈSE

pour l'obtention du Grade de

Docteur de l'Université de Poitiers
Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique
&
Faculté des Sciences Fondamentales et Appliquées
(Diplôme National - Arrêté du 7 août 2006)

Ecole Doctorale : Sciences pour l'Ingénieur & Aéronautique

Secteur de Recherche : Mécanique des Solides, des Matériaux,
des Structures et des Surfaces

présentée par :

Marion TOUBOUL

**Approche multi-échelles morphologique et directe pour une classe de
composites particulaires fortement chargés hyperélastiques et
viscohyperélastiques.**

Directeur de Thèse : **A. DRAGON** – Co-encadrement : **C. NADOT**

Soutenue le 13 Novembre 2007

Manuscrit Définitif

JURY

MM. Frédéric FEYEL	Maître de Recherche, ONERA Châtillon	<i>Rapporteur</i>
Jean-Claude MICHEL	Directeur Recherche CNRS, LMA Marseille	<i>Rapporteur</i>
André ZAOUÏ	Directeur Recherche CNRS, LIM-ENSAM Paris	<i>Examineur</i>
Michel BORNERT	Ingénieur en Chef des Ponts et Chaussées, LMS Palaiseau	<i>Examineur</i>
André DRAGON	Directeur Recherche CNRS, LMPM Poitiers	<i>Examineur</i>
Carole NADOT	Maître de Conférences, LMPM Poitiers	<i>Examineur</i>
Alain FANGET	Ingénieur de Recherche, DGA Gramat	<i>Invité</i>

*A ma famille,
A mes amis...*

REMERCIEMENTS

Quoi de plus naturel que de commencer par remercier les personnes qui ont été à mes côtés, au cœur de ce travail ?

Un grand merci donc tout d'abord à André Dragon, pour sa disponibilité, son intégrité et son souci permanent de me transmettre au maximum les fruits de son expérience, tant sur le plan professionnel que sur le plan personnel. Un grand merci également à Carole Nadot pour son enthousiasme débordant, son aptitude à remonter le moral dans les situations qui le nécessitent, et pour son sens de la précision. Merci enfin à Alain Fanget, notamment pour son investissement très fructueux lors des derniers mois de la thèse, et pour son sens de l'humour qui a contribué au charme de nos réunions champêtres en pays Lotois ! Merci également au reste de la « Gramat-team », Patrick et Gérard.

Je remercie par ailleurs très sincèrement les différents membres de mon Jury d'avoir accepté de lire ce manuscrit en détails et de s'être déplacés pour la soutenance. La discussion qui a suivi et les résultats de la délibération m'ont permis de finir sur une très bonne note, et je leur en suis très reconnaissante.

Je remercie par ailleurs José Mendez pour m'avoir accueillie au LMPM. Au laboratoire, justement, j'ai également à cœur de remercier les différents membres de l'administration : Brigitte, Eliane, Pascale, Francine et Patrick en particulier pour leurs sourires et leur travail.

Merci également à Sylvie Castagnet et à Mikaël Gueguen pour leurs agréables contributions. J'adresse également mes remerciements aux thésards du LMPM, présents et passés, grâce auxquels l'ambiance de travail a été plus que sympathique (ATEM, on t'aime !!!). Mention spéciale à Pierre pour nos innombrables discussions autour d'un thé ou d'une raquette de tennis, à Sophie pour avoir été –entre autre– à de multiples reprises une super collègue de chambre lors de nos déplacements, à Michaël pour cette dernière année de thèse qui n'aurait pas eu le même goût sans lui, et à Jonathan qui m'avait chaudement réservé cette place du bureau 24...

Merci enfin à toutes ces personnes sur lesquelles je peux compter en toutes circonstances : mes parents, ma sœur, Cécile et Thierry, Damien... Ah, Damien, merci beaucoup de m'avoir attendue patiemment pendant ces trois années... Et vive le Québec !!!

Table des matières

Introduction générale	11
1 Position du sujet de thèse	15
1.1 Introduction	17
1.2 Contexte originel de l'étude	17
1.2.1 Une question de sécurité au Centre d'Etudes de Gramat	17
1.2.2 Un exemple de la classe de composites visée : les propergols solides	18
1.2.3 Nécessité de développer un modèle d'homogénéisation	23
1.2.4 Bilan	24
1.3 Présentation générale de l'homogénéisation par les méthodes de moyennes .	25
1.3.1 Remarques préliminaires	25
1.3.2 Séparation des échelles - Notion de Volume Elémentaire Représentatif (VER)	26
1.3.3 Etape de représentation	28
1.3.4 Etape de localisation	29
1.3.5 Etape d'homogénéisation	30
1.4 Etat de l'art en homogénéisation non linéaire	31
1.4.1 Principe général de résolution	31
1.4.2 Techniques de linéarisation	32
1.5 Les enjeux en homogénéisation des milieux non linéaires et viscoélastiques	34
1.5.1 Prise en compte de la microstructure	34
1.5.2 Description de l'hétérogénéité intraphase, accès aux champs locaux	36
1.5.3 Cas particulier des grandes déformations	38
1.5.4 Traitement de la viscoélasticité	39
1.6 Formulation du sujet de thèse	40
1.6.1 Rappel des objectifs de l'étude globale et chronologie	41
1.6.2 Nouveaux aspects et objectifs de la présente thèse	42
2 L'approche morphologique : rappels théoriques et analyse. Application à la viscohyperélasticité	45

2.1	Introduction	47
2.2	Rappel des fondements théoriques	47
2.2.1	Schématisation géométrique	47
2.2.2	Schématisation cinématique	49
2.2.3	Problème de localisation-homogénéisation	49
2.2.4	Principe général de résolution	50
2.3	Réflexions sur l'approche	52
2.3.1	Schématisation géométrique	52
2.3.2	Schématisation cinématique	53
2.3.3	Hétérogénéité dans la phase matrice	54
2.3.4	Condition de compatibilité	54
2.3.5	Système à résoudre	55
2.4	Application à la viscohyperélasticité	57
2.4.1	Introduction	57
2.4.2	Volumes aléatoires de travail	58
2.4.3	Comportements des constituants	60
2.4.3.1	Viscohyperélasticité de la matrice	60
2.4.3.2	Hyperélasticité des grains	63
2.4.4	Résolution du problème dans l'espace-temps réel	63
2.4.5	Mise en œuvre et résultats	67
2.5	Conclusion	68

3 Evaluation de l'approche morphologique sur un composite « modèle » à géométrie simple 71

3.1	Introduction	73
3.2	Matériau de travail	74
3.2.1	Géométrie	74
3.2.2	Description du matériau dans le modèle EF	75
3.2.3	Description du matériau dans l'approche morphologique	76
3.3	Evaluation en hyperélasticité	77
3.3.1	Description de l'hyperélasticité des phases	77
3.3.2	Chargements	78
3.3.3	Principe d'analyse des résultats	80
3.3.4	Simulation d'une compression œdométrique	81
3.3.4.1	Confrontation des résultats macroscopiques	81
3.3.4.2	Confrontation des résultats locaux	82
3.3.5	Simulation d'un glissement simple	87
3.3.5.1	Confrontation des résultats macroscopiques	87
3.3.5.2	Confrontation des résultats locaux	88

3.4	Evaluation en viscohyperélasticité	96
3.4.1	Objectif	96
3.4.2	Comportements des phases	97
3.4.3	Simulations de compressions œdométriques	99
3.4.3.1	Chargement	99
3.4.3.2	Résolution dans l'AM	99
3.4.3.3	Confrontation des résultats EF et AM	99
3.5	Conclusion	104
4	Transition vers une microstructure plus diversifiée	107
4.1	Introduction	109
4.2	Matériau de travail	110
4.2.1	Géométrie retenue	110
4.2.2	Description du matériau dans les deux approches (AM et EF) . . .	113
4.2.3	Comportements des constituants	114
4.3	Simulations numériques	115
4.3.1	Principe d'analyse des résultats	115
4.3.2	Simulation d'une compression œdométrique à faible contraste des phases	116
4.3.2.1	Analyse des résultats macroscopiques	116
4.3.2.2	Analyse des résultats locaux dans les grains	118
4.3.2.3	Analyse des résultats locaux dans la matrice	121
4.3.3	Simulation d'un glissement simple à faible contraste des phases . . .	123
4.3.3.1	Analyse des résultats macroscopiques	123
4.3.3.2	Analyse des résultats locaux dans les grains	124
4.3.4	Simulations à fort contraste de phases	129
4.3.4.1	Simulation d'une compression œdométrique	129
4.3.4.2	Simulation d'un glissement simple	131
4.4	Conclusion	133
5	Vers une application de l'approche morphologique à la butalite 400	137
5.1	Introduction	139
5.2	Démarche adoptée	140
5.3	Essais de compression triaxiale sur la butalite 400	141
5.3.1	Dispositif expérimental et déroulement d'un essai	142
5.3.2	Résultats	144
5.4	Caractérisation morphologique - Définition du Volume Elementaire Statistiquement Représentatif de la morphologie	145
5.5	Schématisation géométrique du matériau réel	147

5.5.1	Démarche adoptée et perspectives	147
5.5.2	Détails concernant la vérification de la représentativité des volumes schématisés	148
5.6	Description et identification du comportement des phases	151
5.6.1	Introduction	151
5.6.2	Essais de traction quasi-statiques	153
5.6.3	Perspectives	155
5.7	Recherche du VER mécanique relatif à l'AM	156
5.7.1	Introduction	156
5.7.2	Recherche du VER des volumes polyédrysés par croissance de sphères - cas de l'élasticité linéaire	157
5.8	Premières confrontations expérience/calculs numériques	159
5.8.1	Comparaison expérience/AM	159
5.8.2	Programme de confrontations multiples (expérience / AM / calculs EF)	161
5.8.3	Résultat des premières confrontations expérience / AM / EF	162
5.9	Conclusion	164
	Conclusion générale	167
	A Rappels concernant les transformations finies	175
	B Etude de maillage réalisée sur la cellule cubique	179
	C Détails concernant la modélisation EF des matériaux périodiques mo- dèles étudiés dans les chapitres 3 et 4	183
	D Travaux préliminaires concernant l'optimisation de la schématisation géo- métrique	185
	Bibliographie	191

Introduction générale

Des secteurs aussi pointus que l'aéronautique ou le spatial nécessitent l'élaboration de matériaux de plus en plus performants. Les composites, savants arrangements de constituants de natures et de propriétés mécaniques différentes, sont des matériaux offrant une grande malléabilité (par exemple, l'ajout de noirs de carbone dans un élastomère est un moyen simple et efficace pour augmenter la rigidité globale des composites utilisés dans le secteur automobile). En revanche, leurs caractéristiques morphologiques et les différentes facettes de leur comportement mécanique -liées au comportement propre de chaque phase et aux interactions à l'échelle locale- en font une classe de matériaux difficile à modéliser. Depuis quelques décennies, les scientifiques développent des modélisations de plus en plus abouties. Ces dernières intègrent un maximum d'information microstructurale de manière à approcher au mieux les propriétés mesurées expérimentalement. On parle alors de « modélisation multi-échelles », d'« homogénéisation » ou encore de « transition d'échelle ». Si le terrain semble défriché pour des composites dont le comportement est indépendant de la vitesse de sollicitation et décrit par un seul potentiel, il n'en est pas de même pour ceux dont les constituants ont des comportements plus complexes. C'est le cas par exemple des propergols solides, point de départ d'un vaste programme de recherche au Centre d'Etudes de Gramat (CEG), lui-même à l'origine de ce travail.

Suite à des accidents inopinément survenus lors de la manipulation de composites énergétiques tels que les propergols solides utilisés dans le secteur de la propulsion spatiale, le CEG s'est lancé dans la construction d'un outil de prédiction de leur vulnérabilité. Cela nécessite au préalable une modélisation mécanique par transition d'échelle apte à estimer non seulement le comportement macroscopique mais aussi les champs locaux, données d'entrée des modèles réactifs.

Compte-tenu des spécificités de ce type de matériaux (fort taux de charges, viscoélasticité et grandes déformations...), une approche non classique a été développée à cet effet. Cette méthode, inspirée des travaux de Christoffersen [CHR83], a été enrichie par Martin [MAR99, NMTDF03] puis par Guiot [GUI05, GND06] de manière à aborder progressivement les différentes facettes du comportement des propergols solides (viscoélasticité et grandes déformations que nous regrouperons sous le vocable « viscohyperélasticité »). La-

dite méthode possède la particularité de définir en amont du processus de changement d'échelle proprement dit un cadre géométrique et cinématique simplificateur, ce qui lui confère un caractère direct. Pour faire ses preuves, cette technique non classique doit aujourd'hui être appliquée à la viscohyperélasticité et évaluée. C'est ce qui fait l'objet de ce document.

Le premier chapitre de ce mémoire concerne la formulation claire des objectifs de la présente thèse. Pour cela, nous commençons par rappeler les fondements de l'étude générale dans laquelle s'inscrit ce projet, de même que les spécificités de la classe de matériaux considérée. Les premiers travaux de modélisation réalisés par Trumel [TRU96] ayant conclu à la nécessité de procéder par transition d'échelle, nous sensibilisons le lecteur à la méthodologie de base de l'homogénéisation par les méthodes de moyennes, actuellement largement utilisées par les mécaniciens. Au travers d'une étude bibliographique, nous énumérons les différentes techniques les plus utilisées en homogénéisation non linéaire et nous faisons apparaître les enjeux propres à cette étude. C'est alors naturellement que le double objectif de la présente thèse émerge. Compte-tenu des travaux antérieurs et du contexte général de l'homogénéisation non linéaire, il faudra non seulement prouver que la transition d'échelle retenue est applicable aux composites énergétiques, mais aussi investiguer ses atouts et ses limites en tant qu'approche directe. Il sera donc nécessaire de tester ses capacités à répondre aux principaux enjeux précédemment formulés.

Le second chapitre s'attache à présenter ladite approche, qualifiée dans la suite d'« approche morphologique » (AM). Afin de faciliter la lecture et la compréhension des fondements de cette méthode d'homogénéisation particulière, nous en déroulons sobrement les principales étapes (voir [GUI05, GND06] pour les détails). Nous détaillons également sa mise en œuvre et son principe de résolution dans le cas général. Ensuite, une discussion sur chacune de ces étapes est menée afin de faire émerger les points théoriques positifs et discutables que l'AM introduit. Nous prenons soin de positionner l'approche vis-à-vis des enjeux présentés dans le chapitre précédent. Pour finir, nous répondons au premier objectif de la thèse c'est-à-dire que nous illustrons la possible applicabilité de l'AM aux composites énergétiques. A cet effet, l'AM est mise en œuvre sur une microstructure aléatoire générée numériquement dont la matrice présente un comportement viscohyperélastique.

Le chapitre 3 initie quant à lui l'évaluation quantitative des performances de l'AM. Comme cela est classiquement fait dans la littérature, nous confrontons les estimations de l'AM à des résultats de référence calculés par éléments finis (EF). Pour une première évaluation, nous considérons une microstructure périodique simple (à grains cubiques) ce qui permet une étude approfondie des résultats tant globaux que locaux donnés par l'AM. Pour un comportement d'abord hyperélastique des phases, des chargements de compression odo-

métrique puis de glissement simple sont considérés. Un comportement viscohyperélastique est ensuite affecté à la matrice.

La microstructure précédemment utilisée étant trop particulière, l'une des hypothèses inhérentes à la schématisation cinématique formulée dans l'AM n'a pas pu être testée au cours du chapitre 3. C'est donc une microstructure plus complexe qui est considérée dans le chapitre 4 qui poursuit l'étude introduite au chapitre précédent. Toujours périodique, la nouvelle microstructure possède cette fois des grains de formes, de tailles et d'orientations différentes. Sa complexité est néanmoins limitée par les difficultés liées à la réalisation du modèle EF. Les résultats AM et EF sur ce matériau « modèle » sont confrontés pour différents trajets de chargement (compression œdométrique, glissement simple) et différents jeux de paramètres hyperélastiques (situation de faible puis de fort contraste).

Le chapitre 5 aborde l'application de l'AM à un composite énergétique réel, la butalite 400. L'objectif est de confronter les estimations macroscopiques de l'AM aux courbes expérimentales obtenues. Ceci constitue la seconde étape indispensable dans la démarche de validation d'une approche micromécanique. Une fois le principe général de confrontation présenté, les différentes étapes à franchir sont détaillées : pour chacune d'entre elles nous présentons les travaux déjà réalisés et nous dressons une liste de ceux restant à effectuer. Nous terminons par une première confrontation expérience/calculs AM sur un essai de compression hydrostatique.. Nous présentons en outre la stratégie et les outils de calcul Elements Finis progressivement mis en place durant la thèse pour découpler les sources d'erreur responsables de l'écart entre courbes expérimentales et estimations de l'AM.

La conclusion reprend les principaux résultats obtenus au cours de cette étude et formule une série de perspectives à ajouter à celles formulées dans le cadre du chapitre 5 précédent.

Chapitre 1

Position du sujet de thèse

Sommaire

1.1	Introduction	17
1.2	Contexte originel de l'étude	17
1.2.1	Une question de sécurité au Centre d'Etudes de Gramat	17
1.2.2	Un exemple de la classe de composites visée : les propergols solides	18
1.2.3	Nécessité de développer un modèle d'homogénéisation	23
1.2.4	Bilan	24
1.3	Présentation générale de l'homogénéisation par les méthodes de moyennes	25
1.3.1	Remarques préliminaires	25
1.3.2	Séparation des échelles - Notion de Volume Élémentaire Représentatif (VER)	26
1.3.3	Etape de représentation	28
1.3.4	Etape de localisation	29
1.3.5	Etape d'homogénéisation	30
1.4	Etat de l'art en homogénéisation non linéaire	31
1.4.1	Principe général de résolution	31
1.4.2	Techniques de linéarisation	32
1.5	Les enjeux en homogénéisation des milieux non linéaires et viscoélastiques	34
1.5.1	Prise en compte de la microstructure	34
1.5.2	Description de l'hétérogénéité intraphase, accès aux champs locaux	36
1.5.3	Cas particulier des grandes déformations	38
1.5.4	Traitement de la viscoélasticité	39
1.6	Formulation du sujet de thèse	40
1.6.1	Rappel des objectifs de l'étude globale et chronologie	41
1.6.2	Nouveaux aspects et objectifs de la présente thèse	42

1.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous commençons par présenter le contexte général dans lequel s'inscrit cette thèse (section 1.2). Nous expliquons pourquoi le Centre d'Etudes de Gramat (CEG) a lancé un projet de recherches à long terme dont le but est d'établir un outil théorique capable de prédire la vulnérabilité des composites énergétiques. Après une brève revue des principales caractéristiques morphologiques et mécaniques de ces matériaux, les premiers travaux de modélisation effectués dans ce sens par Trumel [TRU96, TRU99] sont succinctement présentés. Les limites de ce modèle purement phénoménologique sont alors rappelées et utilisées pour justifier la nécessité de procéder par changement d'échelle (homogénéisation) c'est-à-dire d'intégrer dans la modélisation des informations d'origine microstructurale.

Nous présentons ensuite la démarche générale de l'homogénéisation par les méthodes « de moyenne » [NNH93] (section 1.3) avant de synthétiser les techniques les plus couramment utilisées aujourd'hui en homogénéisation non linéaire (section 1.4). La section 1.5 est ensuite consacrée aux enjeux qui nous concernent, c'est-à-dire aux difficultés que doivent surmonter les modèles d'homogénéisation non linéaires actuels pour être efficaces.

Pour finir (section 1.6), nous rappelons la démarche progressive adoptée par le CEG pour répondre à son objectif, ce qui permet naturellement de situer la présente thèse et de préciser ses objectifs propres.

1.2 Contexte originel de l'étude

1.2.1 Une question de sécurité au Centre d'Etudes de Gramat

Les matériaux énergétiques tels que les propergols solides et explosifs composites utilisés dans le secteur de la propulsion spatiale et de la défense posent des problèmes de sécurité importants. Soumis à des sollicitations soit accidentelles, soit malveillantes, ils peuvent se trouver endommagés. La surface spécifique du matériau (surface offerte à une flamme) est alors augmentée, si bien que les niveaux de sollicitation requis pour qu'il y ait fonctionnement non nominal (combustion simple, déflagration, détonation) sont drastiquement baissés. Richter et al. ont ainsi montré qu'un accroissement de 5% de la porosité dans un matériau multipliait par 2 sa sensibilité aux chocs [RBG⁺89]. Ceci pose des problèmes de sécurité évidents pour les personnes amenées à travailler avec ce type de matériaux. C'est pourquoi le Centre d'Etudes de Gramat a lancé dans les années 90 un projet de recherche visant à *étudier et modéliser la vulnérabilité des composites énergétiques*. Nous présentons succinctement dans le paragraphe qui suit les principales caractéristiques morphologiques et mécaniques de cette classe de matériaux issues de la grande campagne expérimentale initiée par le CEG et réalisée par Trumel.

1.2.2 Un exemple de la classe de composites visée : les propergols solides

Les propergols solides sont principalement utilisés dans le secteur de la propulsion spatiale. Ils permettent d'apporter une part importante de la poussée nécessaire à une navette ou à une fusée dans la première phase de son ascension. Les blocs de propergols solides sont coulés dans les boosters et leur forme permet de maîtriser la loi de poussée que ces derniers apportent. Par exemple, avec un bloc de forme étoilée, la poussée libérée reste à peu près constante au cours du temps (la surface de combustion étant inchangée) tandis qu'avec un bloc cylindrique creux, elle augmente.

Les propergols solides forment une classe particulière de composites : ils sont constitués d'une matrice élastomère (liant) dans laquelle baignent des grains d'explosif ou oxydoréducteurs aléatoirement répartis. Le liant a un comportement viscohyperélastique et les charges sont quasi-rigides. La nature élastomère du liant (polybutadiène, polyuréthane, silicone...) comme celle des charges (aluminium-perchlorate d'ammonium, octrane...) peut varier. Ces matériaux sont cependant tous caractérisés par de *forts taux de charge* : la fraction volumique d'inclusions peut atteindre 80%. Pour arriver à de telles proportions, on trouve souvent plusieurs granulométries : des gros grains dont la taille est de l'ordre de la centaine du micromètre et des petits grains de quelques dizaines de micromètres (voir figure 1.1).

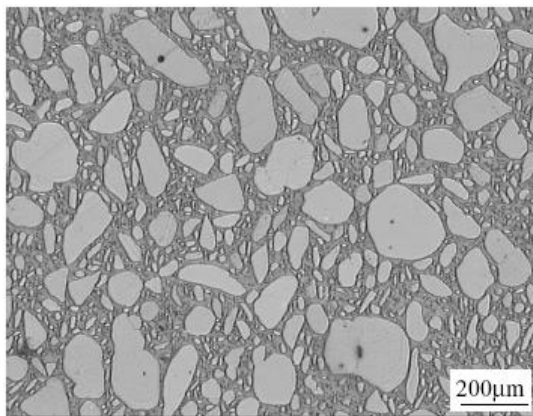


FIG. 1.1 – Microstructure initiale d'un composite énergétique à 80% d'hexogène dans 20% de polybutadiène (fractions volumiques)

D'un point de vue comportemental, la figure 1.2 présente les réponses du composite G2238 (85% massique d'hexogène et 15% de matrice à base PBHT) à des essais de compression uniaxiale monotone, réalisés à différentes vitesses de sollicitation : $0.1\text{mm}\cdot\text{min}^{-1}$,

$1\text{mm}\cdot\text{min}^{-1}$ et $10\text{mm}\cdot\text{min}^{-1}$. Elle traduit le *caractère viscoélastique* du composite, résultant de la viscoélasticité de la matrice : la rigidité globale du matériau augmente avec la vitesse de sollicitation.

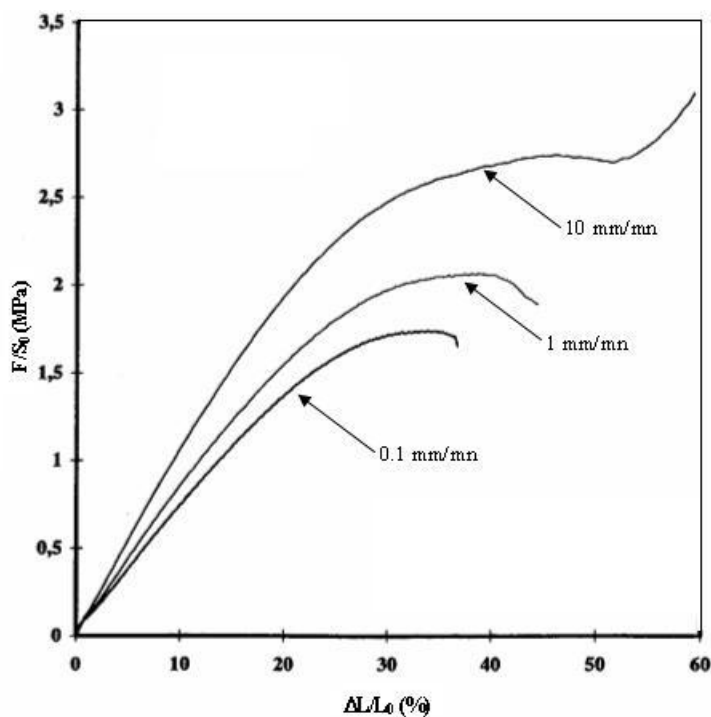


FIG. 1.2 – Résultats de compressions uniaxiales monotones [TRU99] à différentes vitesses

Afin d'observer cette viscoélasticité de ce composite, des essais de compression uniaxiale avec décharge ont alors été réalisés. Des échantillons ont été soumis à une succession de compressions uniaxiales-décharges ($v_{charge} = v_{decharge} = 10\text{mm}\cdot\text{min}^{-1}$) jusqu'à des déplacements maximaux de plus en plus importants. Les résultats conséquents sont donnés sur la figure 1.3. La dissymétrie charge-décharge constatée indique que la viscoélasticité du composite est fortement non linéaire.

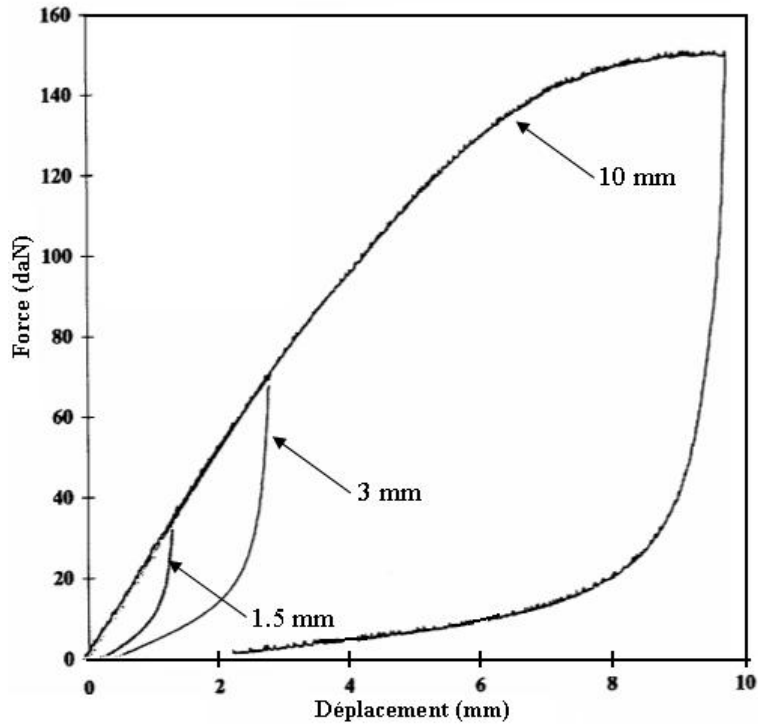


FIG. 1.3 – Résultats de compressions uniaxiales cyclées [TRU99]

D'autre part, le suivi du changement de volume d'une éprouvette au cours d'un essai de traction uniaxiale permet de mettre en évidence une autre source de non linéarité du comportement mécanique de ce type de composites : *l'endommagement*, dont l'apparition est caractérisée par des déformations volumiques positives (voir figure 1.4). L'endommagement des matériaux en question peut être de deux types. Si le matériau est sollicité à faible vitesse (ou à haute température ou encore faible pression), l'endommagement se fera par décohésion aux interfaces grains/matrice dès lors que la matrice, très souple, ne peut plus accommoder les déformations (voir illustration figure 1.5 pour le composite inerte IEX3). En revanche, s'il est sollicité à forte vitesse (ou à basse température ou encore haute pression), on observera un endommagement par fissuration transgranulaire puisque la matrice, vitreuse, voit sa déformabilité fortement réduite (voir illustration figure 1.6 pour l'IEX3).

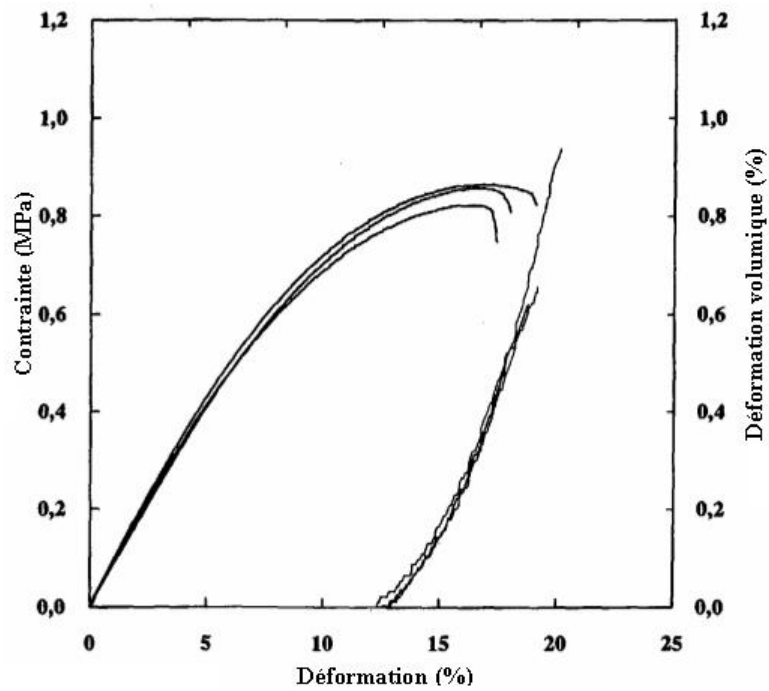


FIG. 1.4 – Résultats de tractions uniaxiales au dilatomètre de Farris sur trois éprouvettes ($v=20\text{mm}\cdot\text{min}^{-1}$) [TRU99]



FIG. 1.5 – Microstructure de l'IEX3 après une compression uniaxiale quasi-statique : décohésion aux interfaces matrice/gros grains [CAG87]

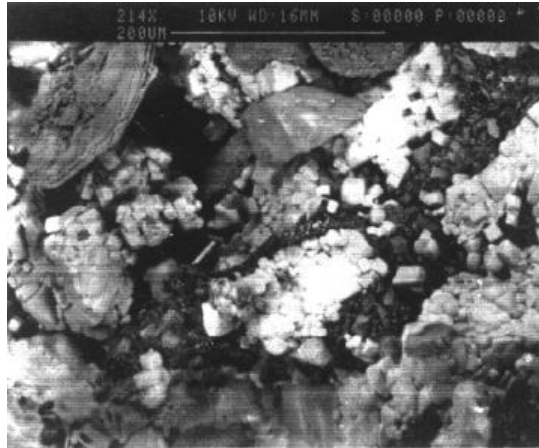


FIG. 1.6 – Microstructure de l’IEX3 après impact de plaque : microfragmentation des gros grains [CAG87]

Pour finir, on peut mentionner un autre élément intervenant de manière significative dans le comportement des composites énergétiques : le taux de charges. La figure 1.7 compare les réponses et les variations de volume observées pour des composites à matrice polybutadiène et à différents taux de charges (massiques) soumis à une traction uniaxiale ($v = 0.1\text{min}^{-1}$). Conformément à ce que l’on attendait, le module d’Young augmente avec le taux de particules quasi-rigides, de même que la contrainte à rupture. La courbe 1.7 b) indique quant à elle que des décohésions (dont on a parlé plus haut) surviennent d’autant plus rapidement que le taux de charges est élevé. Ceci suggère que le liant subit des déformations d’autant plus importantes que le taux de charges est élevé. Cette hypothèse est confirmée par les figures 1.2, 1.4 et 1.7 a) qui montrent que les déformations macroscopiques atteintes sont de l’ordre de quelques dizaines de pourcent. Compte-tenu du facteur d’amplification entre les deux échelles, le liant doit subir localement des déformations encore plus importantes. Par conséquent, pour modéliser le comportement de cette classe de matériaux, il est nécessaire de faire appel à une formulation en *transformations finies*.

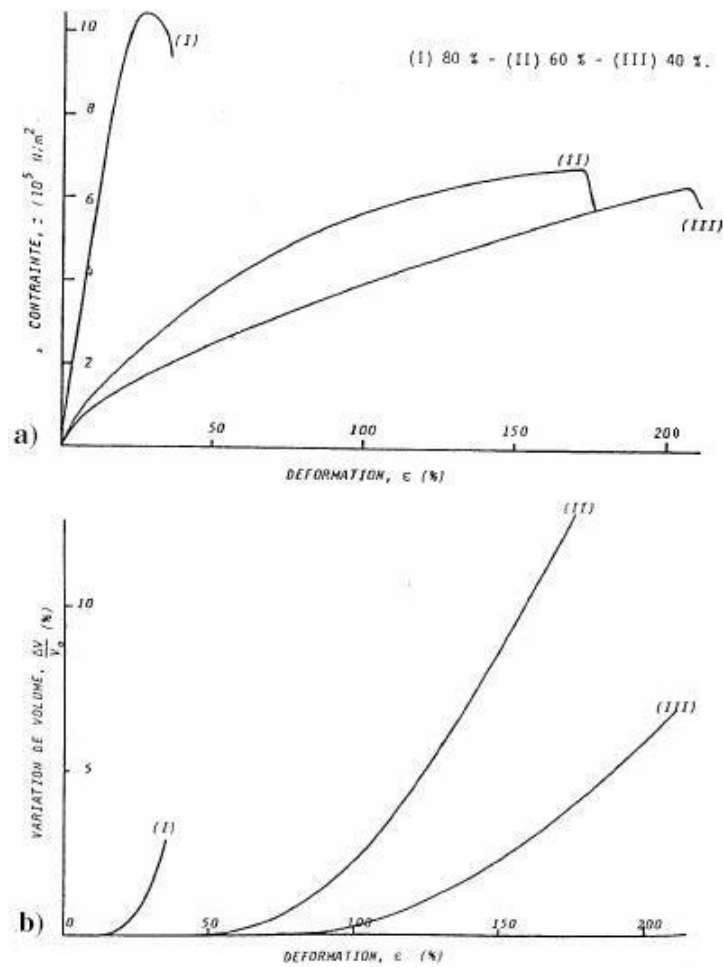


FIG. 1.7 – Effet du taux de charges (massique) sur la réponse et les variations de volume en traction uniaxiale (vitesse de déformation volumique : 0.1 min^{-1}) [SAL81]

1.2.3 Nécessité de développer un modèle d'homogénéisation

Une fois la campagne d'essais expérimentaux terminée, des travaux de modélisation ont été entrepris par Trumel au cours de sa thèse [TRU96]. L'objectif principal était de simuler des essais de pénétration de projectile dans un composite énergétique afin de voir si l'échauffement conséquent était suffisant pour initier une flamme au sein du matériau. A cet effet, Trumel a développé un modèle phénoménologique pour prédire le comportement du composite, permettant notamment de séparer les deux sources intervenant dans l'apparition de l'échauffement : la dissipation mécanique et la friction du projectile.

Il a alors proposé, dans un cadre lagrangien compte tenu des grandes déformations attendues, un modèle thermodynamique tridimensionnel prenant en compte les phénomènes

dissipatifs suivants : viscoélasticité, plasticité, écrouissage, compaction et endommagement. Il a ensuite implanté le modèle dans le code de calcul OURANOS développé au CEG pour simuler des essais de pénétration. Ceci a constitué une étape difficile, tant sur le plan de la programmation que sur le plan de l'identification des paramètres intervenant dans le modèle. Néanmoins, les simulations ont permis d'évaluer l'élévation moyenne de température à 40 degrés, ce qui suggère que l'on peut attendre localement de très forts gradients locaux impliquant des températures suffisantes pour initier une flamme. D'autre part, les simulations ont mis en évidence des zones fortement endommagées au sein du composite. La dissipation mécanique contribue ainsi de manière importante à l'échauffement local qui met en danger l'intégrité du matériau.

Cette première stratégie de modélisation, bien qu'indispensable, souffre cependant de certaines limitations. En premier lieu, de par son côté phénoménologique, le modèle développé manque de malléabilité. En effet, il n'est adapté qu'au composite considéré et son application à un autre composite, même de la même classe, nécessite une nouvelle campagne d'essais de caractérisation et d'identification, lourde et très coûteuse. D'autre part, toujours à cause de son essence macroscopique, le modèle ne permet pas de décrire finement l'évolution microstructurale. Or, si l'on souhaite quantifier la vitesse de combustion afin de mieux cerner les dangers encourus, il devient nécessaire de connaître -en entrée des modèles cinétiques utilisés à cet effet- les champs locaux et l'état microstructural du matériau (position et morphologie des défauts). C'est pourquoi Trumel conclut sur la *nécessité de tenter une modélisation micromécanique et un passage micro-macro* pour pallier aux inconvénients précités. Les modélisations de ce type, partant des informations microstructurales (morphologie, comportement des différentes phases), présentent une adaptabilité accrue par rapport aux modèles phénoménologiques et constituent un outil prometteur dans le domaine du génie des matériaux. En effet, les possibilités des modèles d'homogénéisation leur confèrent un statut privilégié dans l'élaboration de nouveaux matériaux « sur mesure », i.e. pour une application donnée.

1.2.4 Bilan

Les travaux expérimentaux initiés au CEG ont permis de dégager le caractère complexe du comportement des composites énergétiques (voir aussi les travaux récents de Fünfschilling [FUN07]). Ces matériaux, caractérisés par de forts taux de charges, couplent ainsi plusieurs sources de non linéarités : physiques (viscoélasticité, endommagement) et géométrique (transformations finies). La première tentative de modélisation, phénoménologique, a conclu sur la nécessité de procéder par *homogénéisation*.

Afin de bien comprendre les spécificités propres aux modélisations de ce type (multi-échelles), le paragraphe suivant s'attache à présenter les principaux fondements des mé-

thodes d'homogénéisation dites « de moyenne » [NNH93]. Dans la suite, on fera également un bilan rapide des différentes techniques existantes ainsi que des enjeux auxquels ces modélisations doivent répondre compte tenu des points saillants du comportement des composites énergétiques que nous venons de rappeler.

1.3 Présentation générale de l'homogénéisation par les méthodes de moyennes

1.3.1 Remarques préliminaires

Le but général de l'homogénéisation est de déterminer le comportement macroscopique d'un matériau hétérogène à partir de ses caractéristiques à l'échelle microscopique (morphologie et comportement mécanique des constituants). On parle aussi de transition d'échelle.

Il existe différents moyens pour modéliser par homogénéisation le comportement des matériaux hétérogènes. Les plus directs sont les méthodes numériques tels que les éléments finis (EF [FCJ+02], EF² [FEY03]) ou la méthode des transformées de Fourier rapides (FFT, [MS98]). Cependant, dès que l'on traite de microstructures complexes et que l'on considère des comportements non linéaires, les calculs deviennent rapidement très lourds. Ces outils sont pour cette raison d'usage limité, mais constituent néanmoins un élément précieux dans une démarche d'évaluation d'un modèle d'homogénéisation. On peut aussi utiliser une approche mathématique : la théorie asymptotique. Cette dernière introduit un petit paramètre lié à la taille des hétérogénéités du milieu considéré. Les propriétés du milieu homogénéisé sont obtenues en faisant tendre ce paramètre caractéristique vers 0 [SP80]. Il s'agit d'une approche rigoureuse, réservée aux milieux périodiques ou quasi-périodiques [SUQ85]. Enfin, les méthodes de moyenne [NNH93] constituent un autre moyen de traiter le problème d'homogénéisation. Ayant une signification physique plus solide que la théorie asymptotique, elles sont très appréciées par les mécaniciens des matériaux. C'est pour cela que nous détaillons leurs spécificités dans les paragraphes qui suivent.

Remarque : En toute rigueur, le terme « homogénéisation » est réservé à la théorie asymptotique précédemment mentionnée. Cependant, il est courant de regrouper sous ce terme les différentes techniques permettant de remplacer un matériau hétérogène par un matériau homogène équivalent.

1.3.2 Séparation des échelles - Notion de Volume Élémentaire Représentatif (VER)

De nombreux matériaux couramment utilisés nous paraissent homogènes, notre œil ne pouvant pas discerner des éléments de taille inférieure au dixième de millimètre. Cependant, l'observation de tels matériaux au microscope révèle leur nature complexe et fortement hétérogène. Les caractéristiques morphologiques géométriques et la nature des différents constituants (fer, aluminium, élastomère...) ont une forte influence sur les propriétés macroscopiques d'un matériau i.e. celles observées à l'échelle de leur utilisation. La première chose à faire lorsque l'on se lance dans l'élaboration d'un modèle d'homogénéisation, c'est de définir les échelles de travail au travers de trois dimensions caractéristiques (voir illustration sur la figure 1.8).

La première dimension, notée d , définit la taille caractéristique des hétérogénéités que l'on choisit de prendre en compte. On comprend bien que cette dimension doit être suffisamment faible pour ne pas gommer les éléments de la microstructure responsables de propriétés macroscopiques observées mais également suffisamment élevée pour que les outils classiques de la mécanique des milieux continus soient utilisables. Il n'existe pas de critère universel pour déterminer la valeur de d ; le bon sens veut cependant que ce choix soit guidé par la connaissance (ou la supposition !) des processus physiques qui gouvernent les propriétés macroscopiques. Ainsi, si la non linéarité de la réponse d'un composite matrice/inclusions se révèle être due uniquement à de l'endommagement par décohésion entre la matrice et les inclusions, d doit être de l'ordre de la taille caractéristique des inclusions dont le rôle primordial a été observé.

Une fois d choisi, il convient de définir la taille l du volume à partir duquel le comportement macroscopique va être calculé depuis les informations microscopiques disponibles. Cette grandeur doit satisfaire la double séparation d'échelles suivante, avec L , troisième dimension caractéristique, représentant la taille de la structure étudiée (longueur d'un échantillon par exemple) :

$$d \ll l \ll L \quad (1.1)$$

L'inégalité de gauche de cette équation est nécessaire pour pouvoir affecter à chaque point macroscopique M de la structure (en réalité, un volume de taille l , voir figure 1.8) un comportement homogène équivalent. Celle de droite permet de traiter la structure comme un milieu continu.

S'il est possible de définir pour un matériau donné trois tailles caractéristiques satisfaisant la séparation des échelles (1.1) -ce qui n'est pas toujours le cas (voir [ZAO01])- alors on introduit la notion de « volume élémentaire représentatif » (VER) pour définir le comportement du matériau en question. Dans les approches par moyenne, le comportement

homogène équivalent d'un milieu hétérogène est alors établi à partir des moyennes, sur le VER de taille l , des champs mécaniques locaux. Le VER d'un matériau donné n'est pas unique, il dépend entre autre des propriétés que l'on souhaite modéliser. A morphologie microstructurale fixée, la taille d'un VER augmente avec le contraste et la non linéarité du comportement des constituants [FCJ⁺02, KFG⁺03]. Ainsi, il n'y a pas nécessairement coïncidence entre le VESR morphologique (i.e. volume élémentaire statistiquement représentatif de la morphologie du matériau) et le VER mécanique (assurant la stabilité des propriétés macroscopiques) associé à une méthode d'estimation donnée. Ce dernier sera de taille au moins égale à celle du VESR. La recherche et les critères de définition du VER font l'objet de nombreuses études encore aujourd'hui (voir les travaux de Kanit et al. en élasticité HPP [KFG⁺03] ou de Forest et al. [FCJ⁺02]). Bien sûr, pour pouvoir définir un VER, il faut également que la longueur d'onde λ de la fluctuation associée à une sollicitation donnée soit très grande devant la taille du VER ($\lambda \gg l$) afin que lesdites fluctuations n'aient pas de conséquences notables au sein d'un VER.

Très récemment, la notion de VER -à la base des méthodes de moyenne- a été discutée par Zaoui [ZAO06]. Plus précisément, le progrès courant des techniques de mesure des champs a révélé l'apparition précoce de microbandes de localisation dans des polycristaux pour des chargements faibles (apparition en traction monotone avant 1% de déformation macroscopique voir [DOU00] cité dans la thèse de Dexet [DEX06]). L'épaisseur de ces bandes de localisation étant du même ordre de grandeur que la taille des grains et leur longueur environ cinq fois plus grande (cf. [DEX06]), il apparaît nécessaire de redéfinir la notion de phase dans les polycristaux. Dans ce contexte, comment définir un VER ?

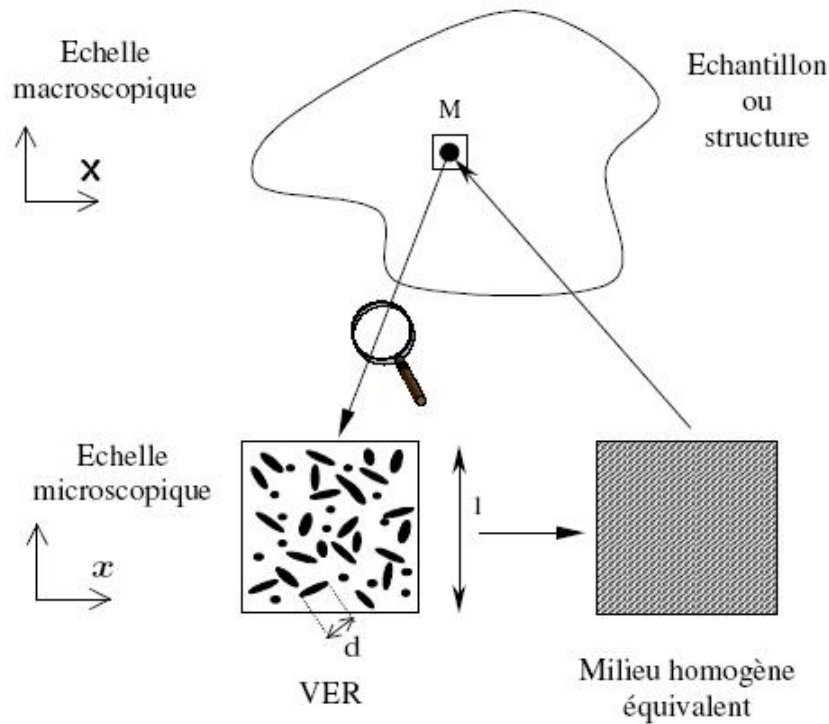


FIG. 1.8 – Echelles et concepts intervenant dans l’analyse des milieux hétérogènes macroscopiquement homogènes

Dans la suite, on suppose que toutes les conditions précédemment exposées sont réunies pour pouvoir définir et travailler sur un VER. Les trois paragraphes suivants (1.3.3 à 1.3.5) définissent les trois étapes de base des méthodes de moyenne : la représentation, la localisation et l’homogénéisation proprement dite.

1.3.3 Etape de représentation

Il s’agit ici de définir au mieux les constituants présents dans le VER retenu, en terme de morphologie (forme, taille, arrangement spatial, orientation...) et de comportement mécanique. Ceci constitue une étape clé dans la mesure où l’information microstructurale prise en compte au cours de cette phase a une nette influence sur la qualité des prévisions du comportement macroscopique comme nous le détaillerons plus loin (voir paragraphe 1.5.1).

Soulignons néanmoins qu’il est impossible de fournir une description complète du VER, sauf dans le cas des milieux périodiques où ce dernier est assimilé à une cellule de base. C’est pourquoi le comportement homogène équivalent obtenu par les différentes méthodes de transition d’échelle ne peut tenir lieu que d’*indicateur*. Plus particulièrement, lorsqu’on se contente des informations disponibles sans faire d’hypothèses sur les informations man-

quantes, on débouche sur des *encadrements* ou *bornes* qui définissent des domaines plus ou moins larges d'existence des propriétés macroscopiques. En revanche, lorsque l'on est amené à faire des hypothèses sur les informations manquantes, on débouche sur des *estimations* approchant la solution exacte (expérimentale). Ces dernières doivent se situer entre les éventuelles bornes existantes sous peine d'être irrecevables. Nous en reparlerons plus loin.

1.3.4 Etape de localisation

Le but de cette étape est d'exprimer les champs mécaniques locaux, dans le VER V , en fonction du champ macroscopique appliqué $\bar{\epsilon}$ ou $\bar{\sigma}$, suivant que l'on travaille en déformation ou en contrainte moyenne imposée. Dans le cas de l'élasticité HPP et des déformations imposées (respectivement contraintes imposées), on est amené à résoudre le problème de localisation suivant :

$$\begin{cases} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \mathbf{C}(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x}) & \text{dans } V \\ \text{div}(\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x})) = 0 & \text{dans } V \\ \epsilon_{ij} = \frac{1}{2}(u_{i,j} + u_{j,i}) & \text{dans } V \\ \langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle_V = \bar{\boldsymbol{\epsilon}} & \text{(resp. } \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_V = \bar{\boldsymbol{\sigma}}) \end{cases} \quad (1.2)$$

où $\langle G \rangle_V$ désigne la moyenne spatiale sur V de la grandeur G : $\langle G \rangle_V = \frac{1}{V} \int_V G dV$. La grandeur macroscopique non imposée $\bar{\boldsymbol{\sigma}}$ (respectivement $\bar{\boldsymbol{\epsilon}}$) est alors *définie* par $\bar{\boldsymbol{\sigma}} = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_V$ (respectivement $\bar{\boldsymbol{\epsilon}} = \langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle_V$).

La formulation de ce problème est très proche de celle d'un problème de structure, la structure considérée étant le VER. On remarque cependant quelques différences notables avec un problème classique illustrant la difficulté propre à l'étape de localisation dans une démarche d'homogénéisation. Premièrement, l'information sur la structure étudiée n'est que partielle -sauf cas particulier- comme nous l'avons déjà mentionné dans le paragraphe précédent (1.3.3). Aussi la répartition des modules locaux $\mathbf{C}(\mathbf{x})$ dans le VER est-elle rarement connue de manière exacte. D'autre part, la relation (1.2)₄ caractérise l'état de chargement dans lequel se trouve le VER. Il ne s'agit pas de conditions aux limites classiques. Cette relation traduit le fait que le VER se trouve *en moyenne* dans l'état de déformation (respectivement de contrainte) imposé par le chargement macroscopique appliqué aux bords de la structure macroscopique étudiée (éprouvette) i.e. loin des bords du VER sur lequel le système (1.2) est formulé. De ce fait, le problème est mal posé. Pour y remédier, il est classique de remplacer la relation (1.2)₄ par des conditions de déformations (respectivement de contraintes) homogènes sur le contour ∂V de normale $\vec{\mathbf{n}}$:

$$\begin{aligned} \mathbf{u} &= \bar{\boldsymbol{\epsilon}} \cdot \mathbf{x} && \text{sur } \partial V \\ \text{(resp. } \vec{\mathbf{t}} &= \bar{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \vec{\mathbf{n}} && \text{sur } \partial V) \end{aligned} \quad (1.3)$$

Dans ces conditions, on peut montrer que la relation $(1.2)_4$ est automatiquement vérifiée (voir par exemple [ZAO01]). Toutefois, ces relations ne sont justifiées que si la séparation des échelles $d \ll l$ est respectée. Les deux types de conditions aux limites (1.3) présentées -en déformations homogènes et en contraintes homogènes- ne sont théoriquement pas équivalentes et mènent à des propriétés effectives différentes. Cependant, l'écart entre les deux solutions s'amenuise d'autant plus que la séparation des échelles est bien satisfaite. Une manière (lourde mais rigoureuse) de déterminer la taille d'un VER mécanique d'un milieu hétérogène consiste ainsi à appliquer des conditions aux limites homogènes en déformations et en contraintes à un volume de plus en plus grand, jusqu'à obtenir convergence vers une valeur moyenne des modules homogénéisés prévus par les deux approches [MIC01, KFG⁺03].

Dans le cas d'un matériau périodique, la dimension caractéristique des hétérogénéités peut être du même ordre de grandeur que celle du VER. Les conditions aux limites (1.3) ne sont donc plus utilisables. La périodicité du milieu conduit à adopter les conditions suivantes, qui assurent elles aussi les égalités $(1.2)_4$ (voir [MMS01]) :

$$\begin{aligned} \mathbf{u} - \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} \cdot \mathbf{x} & \text{ périodique sur } \partial V \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \vec{\mathbf{n}} & \text{ antipériodique sur } \partial V \end{aligned} \tag{1.4}$$

Soulignons que des conditions aux limites périodiques peuvent également être utilisées sur des milieux aléatoires sous réserve de définir une « cellule de base » de taille au moins égale à celle du VESR. Avec ce type de conditions aux limites appliquées à des cellules de taille croissante Forest et al. ont montré une convergence plus rapide des propriétés à estimer qu'avec des conditions aux limites homogènes au contour [FJH⁺06].

1.3.5 Etape d'homogénéisation

A l'issue des étapes précédentes on dispose de deux types de relation entre grandeurs aux deux échelles :

- des relations de moyenne, qui expriment des grandeurs macroscopiques à partir de leurs homologues microscopiques.
- des relations de localisation, obtenues par des modélisations particulières, qui expriment les grandeurs microscopiques en fonction de leurs homologues macroscopiques.

En les utilisant conjointement, il est possible de relier $\bar{\boldsymbol{\sigma}}$ à $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$ et d'exprimer par là-même le comportement homogénéisé du matériau hétérogène.

Il convient ici de présenter le principe de macro-homogénéité de Hill-Mandel [HIL67, MAN71], au coeur des méthodes d'homogénéisation classiques. Il s'énonce comme suit :

Pour tout champ de contrainte statiquement admissible avec $\bar{\boldsymbol{\sigma}}$ (i.e. vérifiant (1.2)₂, les conditions aux limites et la propriété de moyenne $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_V = \bar{\boldsymbol{\sigma}}$) et pour tout champ de déformation cinématiquement admissible avec $\bar{\boldsymbol{\epsilon}}$ (i.e. vérifiant (1.2)₃, les conditions aux limites et la propriété de moyenne $\langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle_V = \bar{\boldsymbol{\epsilon}}$) non nécessairement associé :

$$\langle \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\epsilon} \rangle_V = \bar{\boldsymbol{\sigma}} : \bar{\boldsymbol{\epsilon}} \quad (1.5)$$

Ce principe assure l'égalité entre la moyenne spatiale du travail microscopique et le travail macroscopique. Il est très utile dans les approches variationnelles, où les formulations sont souvent énergétiques, pour calculer les propriétés effectives d'un milieu hétérogène.

1.4 Etat de l'art en homogénéisation non linéaire

1.4.1 Principe général de résolution

L'homogénéisation des milieux non linéaires est un domaine de recherches encore ouvert qui a connu d'importants développements depuis les vingt dernières années. L'idée principale consiste à reformuler le problème non linéaire initial de manière appropriée, afin de tirer partie de l'expérience acquise en homogénéisation linéaire. Dans le cas de comportements non linéaires des phases, le système à résoudre est le suivant (cas des déformations homogènes) :

$$\begin{cases} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \mathbf{C}(\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x})) : \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x}) & \text{dans } V \\ \text{div}(\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x})) = 0 & \text{dans } V \\ \epsilon_{ij} = \frac{1}{2}(u_{i,j} + u_{j,i}) & \text{dans } V \\ \mathbf{u} = \bar{\boldsymbol{\epsilon}} \cdot \mathbf{x} & \text{sur } \partial V \end{cases} \quad (1.6)$$

Ce problème est encore plus complexe que (1.2) : en plus des difficultés précédemment mentionnées au paragraphe 1.3.4, les modules des phases dépendent ici de la déformation. Cependant, si l'on fige par la pensée le composite non linéaire dans un état de déformation donné, il est possible d'affecter à chaque point des propriétés linéarisées. On peut donc définir un « composite linéaire de comparaison » (CLC) [PC91], associé au composite non linéaire considéré. Le système (1.6) peut ainsi être réécrit de la manière suivante :

$$\begin{cases} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \mathbf{C}^{lin} : \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x}) \quad (+\boldsymbol{\tau}^r) & \text{dans } V \\ \text{div}(\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x})) = 0 & \text{dans } V \\ \epsilon_{ij} = \frac{1}{2}(u_{i,j} + u_{j,i}) & \text{dans } V \\ \mathbf{u} = \bar{\boldsymbol{\epsilon}} \cdot \mathbf{x} & \text{sur } \partial V \\ \mathbf{C}^{lin} = \mathbf{C}^{lin}(\boldsymbol{\epsilon}^{ref}) \quad (, \boldsymbol{\tau}^r = \boldsymbol{\tau}^r(\boldsymbol{\epsilon}^{ref})) & \end{cases} \quad (1.7)$$

C^{lin} est un tenseur des modules linéarisés, τ^r une précontrainte éventuelle dans la phase r et ϵ^{ref} une déformation de référence dont nous parlerons plus loin. On remarque que les quatre premières équations de (1.7) constituent un problème d'homogénéisation linéaire (éventuellement précontraint) qui peut être résolu par l'un des nombreux schémas d'homogénéisation existant : Hashin-Shtrikman, auto-cohérent, Mori-Tanaka... La non linéarité des lois de comportement locales se trouve prise en compte uniquement dans les relations complémentaires (1.7)₅.

Il est possible d'obtenir des bornes ou des estimations pour le comportement effectif en travaillant avec des formulations variationnelles. Le comportement homogénéisé du milieu hétérogène non linéaire est défini à partir du *potentiel effectif*, approché par des formulations variationnelles dérivées du principe du minimum de l'énergie potentielle. Ces approches sont plus rigoureuses d'un point de vue thermodynamique dans la mesure où elles assurent que le comportement effectif dérive d'un potentiel, mais plus délicates à mettre en oeuvre. Réservées aux comportements décrits par un potentiel (convexe) unique, elles ne sont donc pas adaptées -pour l'instant- aux milieux viscoélastiques, décrits par un potentiel thermodynamique et par un potentiel de dissipation. Le principe général reste le même que précédemment, mais la linéarisation porte cette fois sur le potentiel et non plus sur la relation contrainte/déformation directement. Ces approches peuvent mener à des solutions dont le statut est confirmé : ainsi l'approche variationnelle de Ponte-Castañeda débouche-t-elle sur une borne lorsqu'elle est associée à un schéma d'homogénéisation linéaire fournissant lui-même une borne pour le comportement effectif du CLC [MS04b].

1.4.2 Techniques de linéarisation

La formulation (1.7) n'est pas unique. Il existe tout d'abord différentes manières de définir le tenseur des modules linéarisés. La procédure de linéarisation dite « tangente » (voir les travaux de Hill et Hutchinson [HIL65, HUT76]), issue d'une approche incrémentale, suggère de définir les modules linéarisés à l'aide de la tangente à la courbe contrainte/déformation (cas uniaxial). Cependant, les estimations obtenues par cet intermédiaire se sont révélées inadéquates (violation fréquente de la borne de Hashin-Shtrikman supérieure). D'autres procédures de linéarisation ont donc été proposées. Berveiller et Zaoui [BZ79] ont introduit la notion de modules « sécants » tandis que Masson et al. [MBSZ00] ont travaillé sur une linéarisation « affine » (voir illustration sur la figure 1.9). Dans ce dernier cas, la linéarisation de la loi de comportement locale dans la phase r fait intervenir une précontrainte τ^r ; le problème non linéaire initial est transformé en un problème thermoélastique associé.

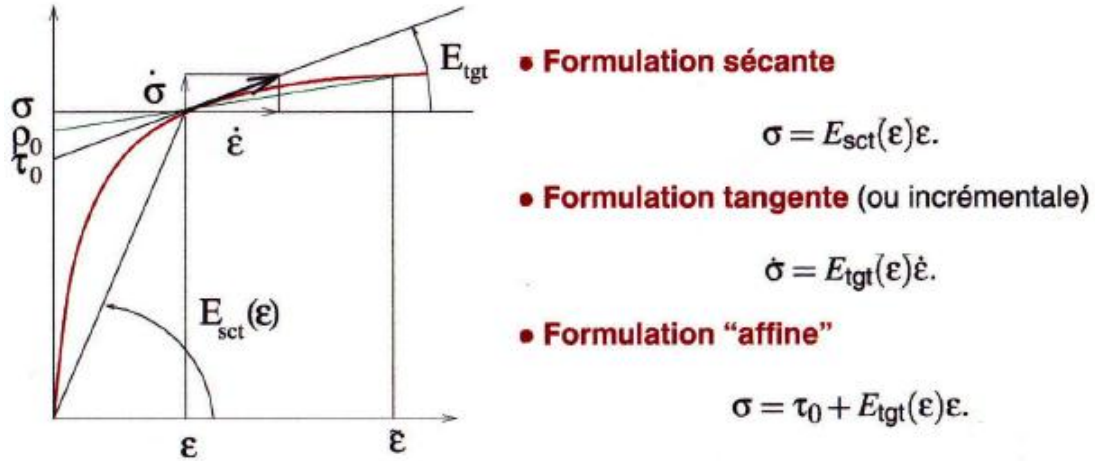


FIG. 1.9 – Différentes procédures de linéarisation du comportement local [SUQ03]

Une fois le choix de la procédure de linéarisation arrêté, un autre paramètre intervenant dans (1.7) doit être défini : la déformation de référence ϵ^{ref} . Elle a une influence sur la définition des modules linéarisés (et donc sur le problème linéarisé associé) puisque c'est elle qui précise en quel endroit ces derniers doivent être évalués : à la déformation moyenne sur la phase r ? A la déformation équivalente moyenne ? A la déformation maximale ? Les possibilités sont multiples. Jusqu'à aujourd'hui les déformations de référence envisagées ont été : les déformations moyennes par phase (on parle alors d'approches en champs moyens), et plus récemment les seconds moments des champs de déformation. Nous en reparlerons plus loin (paragraphe 1.5.2).

Dans sa version originelle, l'approche variationnelle du second ordre [PC96] commence par approximer ω^r , potentiel thermodynamique dans la phase r , par son développement à l'ordre 2 en série de Taylor faisant intervenir les modules tangents calculés aux déformations moyennes par phase (il s'agit donc d'une approche en champs moyens). Le principe du minimum de l'énergie potentiel est alors réécrit suivant cette simplification et souvent approché par un principe de stationnarité. Dans la version modifiée, la linéarisation fait appel à des modules sécants généralisés tenant compte des fluctuations intraphases (voir [PC02a, PC02b]).

Les différents aspects précédemment évoqués concernant les étapes clés de l'homogénéisation non linéaire ont subi beaucoup de développements, d'extensions annexes qui ne sont pas détaillés ici (voir par exemple les travaux de Ponte-Castañeda et Tiberio [PCT00] qui étendent la procédure du second-ordre au cas des grandes déformations, ou ceux de Lahellec et Suquet qui traitent en plus de la compressibilité [LMM04]). L'objectif de ce

paragraphe était de présenter de manière succincte le principe de résolution d'un problème d'homogénéisation non linéaire. On retiendra donc que :

- Le problème non linéaire initial est reformulé de manière à faire apparaître un problème linéaire -que l'on sait résoudre- sur un composite linéaire de comparaison dont les modules sont caractérisés par des relations complémentaires non linéaires.
- Les différentes techniques se distinguent les unes des autres à deux niveaux : d'abord au travers de la procédure de linéarisation retenue (définition des modules linéarisés et des déformations de référence auxquelles ils sont évalués), ensuite au travers du schéma d'homogénéisation linéaire choisi pour résoudre le problème linéarisé.
- Les formulations variationnelles sont plus rigoureuses et peuvent conduire à l'élaboration de bornes.

1.5 Les enjeux en homogénéisation des milieux non linéaires et viscoélastiques

Le contexte de l'homogénéisation non linéaire a fortement évolué au cours de ces dernières années. La diversité des techniques existantes et des résultats qu'elles fournissent ont poussé les scientifiques à s'interroger sur les origines des performances et/ou limites des différents modèles, faisant ainsi émerger un certain nombre d'enjeux. Ces derniers constituent aujourd'hui des lignes directrices pour l'élaboration de nouveaux modèles. Dans cette section, nous présentons les principaux enjeux intervenant dans le domaine qui nous intéresse (milieux non linéaires, grandes déformations, viscoélasticité) ainsi que, sans rentrer dans les détails ni même être exhaustif, les moyens couramment proposés pour y répondre.

1.5.1 Prise en compte de la microstructure

La microstructure joue un rôle essentiel dans le comportement macroscopique d'un matériau hétérogène. Pour s'en convaincre, on peut imaginer deux composites C1 et C2, constitués de charges sphériques isotropes contenues dans une matrice isotrope. Dans le composite C1, les charges sont réparties de manière aléatoire, tandis que dans le composite C2, elles sont arrangées de manière périodique selon le schéma de la figure 1.10 b). On s'attend naturellement à ce que les composites C1 et C2 présentent un comportement macroscopique respectivement isotrope et à symétrie cubique. Ceci illustre l'effet de l'arrangement spatial de la microstructure dans un milieu hétérogène sur son comportement à l'échelle globale. Outre la distribution des différentes phases, d'autres paramètres géométriques (taille, forme, orientation) peuvent influencer sur les propriétés macroscopiques d'un milieu hétérogène (voir par exemple [BOR01, MS98, FCJ⁺02]). On comprend donc que la qualité des résultats donnés par une approche multi-échelles dépend de la richesse

de l'information microstructurale que cette dernière prend en compte. Aussi les bornes de Hashin-Shtrikman [HS63] sont-elles plus resserrées que celles de Voigt et de Reuss, les premières intégrant une information supplémentaire (distribution isotrope des phases) par rapport aux secondes qui ne considèrent que les fractions volumiques des constituants [GIL01, BOR96]. Bien entendu, la description de la microstructure ne peut être que partielle -sauf dans le cas particulier des matériaux périodiques- et il s'agit alors de retenir les paramètres accessibles les plus pertinents.

Pour pouvoir intégrer des informations relatives à la microstructure d'un matériau dans un modèle micromécanique, on a classiquement recours à une approche probabiliste (voir [JEU01] pour les détails). Les différents critères caractérisant une microstructure aléatoire, tels la distribution des tailles ou l'agencement spatial des constituants, sont pris en compte par l'intermédiaire d'outils mathématiques (éléments structurants, fonctions de covariance, etc...) identifiés par analyse d'images 2D ou 3D de microstructures réelles. Ces outils sont des fonctions du point et ne peuvent par conséquent pas traduire certains aspects morphologiques comme par exemple le fait qu'une phase soit présente sous forme d'inclusion dans une autre. Pour remédier à ce problème, Stolz et Zaoui ont introduit le concept de « motif morphologique représentatif » (voir [SZ91] cités dans [BSZ96]). Un motif est un domaine dans lequel une distribution des modules est donnée (exemple : une sphère de matrice contenant un grain sphérique). Un matériau est alors défini par la connaissance de tous ses motifs morphologiques, et de leur répartition spatiale. De cette manière, de nouvelles bornes plus resserrées que les précédentes ont pu être établies dans le cas linéaire, les interactions entre phases étant mieux décrites [BOR96] ; l'utilisation de cet outil dans le domaine des comportements non linéaires est également possible.

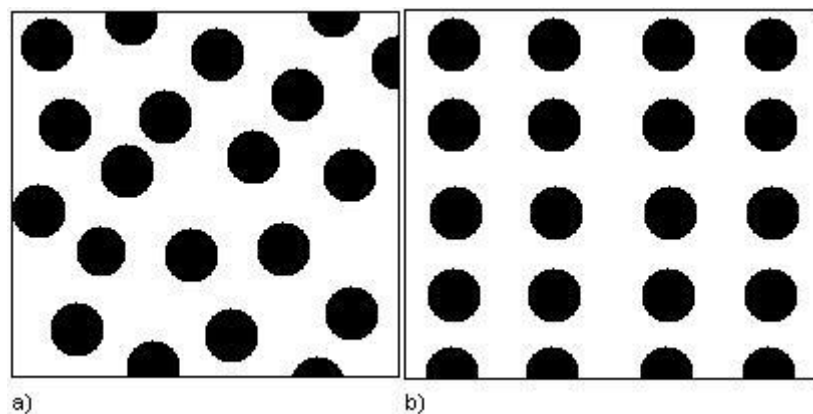


FIG. 1.10 – Effet de la répartition spatiale des constituants : composite à comportement macroscopique a) isotrope b) à symétrie cubique (vues 2D)

1.5.2 Description de l'hétérogénéité intraphase, accès aux champs locaux

L'hétérogénéité des champs locaux dans les milieux multiphasés est divisée en deux catégories. La première, qualifiée d'hétérogénéité interphase, traduit les fluctuations des champs d'une phase à une autre. La seconde, appelée hétérogénéité intraphase, désigne les variations des champs au sein même d'une phase. Dans les approches en champs moyens, on utilise des grandeurs moyennes définies sur chaque phase, si bien que seule la première catégorie d'hétérogénéité est transcrite. Cependant, pour les milieux hétérogènes à constituants linéaires, cela ne pose pas de problème puisqu'il n'est pas nécessaire de décrire l'hétérogénéité intraphase de manière rigoureuse : la connaissance des quantités moyennes par phase suffit à élaborer des bornes et des estimations satisfaisantes du comportement homogénéisé [MIC01]. Les techniques d'homogénéisation non linéaire se ramenant le plus souvent à la résolution d'un problème linéarisé particulier, il n'est pas étonnant que les premières tentatives réalisées dans le cadre non linéaire aient elles aussi négligé les fluctuations intraphases des champs locaux. Les estimations des propriétés macroscopiques se sont alors souvent révélées trop raides, allant jusqu'à violer une borne supérieure (cf. les travaux de Gilormini [GIL96] ou de Bornert [BPC98]). Les quantités moyennes par phase ne suffisant plus dans le cadre non linéaire, les scientifiques ont pris conscience de la nécessité d'introduire dans les modèles des indicateurs permettant de prendre en compte au moins partiellement les fluctuations intraphases des champs locaux (voir par exemple [BS01, BM05, MS04b]).

Dans une première mesure, l'approche par motifs mentionnée plus haut (paragraphe 1.5.1) répond à cet enjeu. En effet, la définition de motifs particuliers permet d'affecter à une seule et même phase réelle des déformations différentes. Par exemple, on peut décrire un matériau à inclusions comme une combinaison de sphères composites constituées d'un grain entouré de plusieurs couches de matrice (voir figure 1.11) auxquelles on affecte des modules sécants différents [BOR03]. Ceci permet par exemple de traduire le fait que les interactions entre inclusions et matrice s'estompent au fur et à mesure que l'on s'éloigne de l'interface charge/matrice. La notion de phase est ainsi généralisée : une seule et même phase -la matrice- est décrite par une distribution de modules, ce qui permet de définir dans une seule et même phase réelle des champs non uniformes.

Un autre moyen consiste à utiliser les moments d'ordre supérieur des champs locaux. On a vu récemment beaucoup d'auteurs utiliser le « moment d'ordre 2 », ou « second moment » (les moments d'ordre supérieur étant difficilement accessibles) pour définir la déformation de référence à laquelle les modules linéarisés sont évalués (voir paragraphe 1.4). Le second moment est obtenu de manière directe à partir du tenseur des modules homogénéisés \mathbf{C}^{hom} , des modules \mathbf{C}_r et de la concentration c_r de la phase r et de la déformation macroscopique

$\bar{\epsilon}$:

$$\langle \epsilon \otimes \epsilon \rangle_r = \frac{1}{c_r} \bar{\epsilon} : \frac{\partial \mathbf{C}^{hom}}{\partial \mathbf{C}_r} : \bar{\epsilon} \quad (1.8)$$

Cette quantité peut être calculée de manière analytique dans les cas simples, et de manière numérique dans les cas plus complexes. Les termes « diagonaux » de ce tenseur ($\langle \epsilon_{ij}^2 \rangle_r$) renseignent sur l'hétérogénéité locale du champ de déformation dans la phase r dans la mesure où :

$$\langle \epsilon_{ij}^2 \rangle_r \geq \langle \epsilon_{ij} \rangle_r^2 \quad (1.9)$$

l'égalité n'ayant lieu que si la déformation est homogène dans la phase r . Le moment d'ordre deux apporte une indication supplémentaire, par rapport à la déformation moyenne, et assouplit par conséquent les estimations. Par une analyse numérique détaillée des premier et second moments des champs de déformation estimés par les méthodes sécantes classiques, Moulinec et Suquet ont pu établir le lien entre sous-estimation des moments d'ordre 2 et rigidité excessive des modules macroscopiques [MS03b] (voir aussi [PC02a, RBAZ05]).

Enfin, la NTFA (voir [MS03a, MS04a]), extension récente de la TFA proposée par [DVO92], permet elle aussi de prendre en compte des hétérogénéités intraphases dans les estimations des propriétés macroscopiques de composites à constituants non linéaires. Cette approche s'appuie sur une décomposition du champ local de déformation anélastique en une somme finie de champs de transformation.

Il peut parfois arriver que l'assouplissement résultant de la prise en compte de fluctuations intraphase soit trop important. Rekik et al. considèrent un composite particulière périodique à constituants non linéaires et observent que les modules macroscopiques estimés par la procédure du second ordre modifiée sont plus souples que ceux donnés par la solution de référence, calculée par la méthode des éléments finis [RABZ07]. Se pose alors la question de la validité de cette « amélioration »... D'autre part, les différentes techniques d'homogénéisation conduisent parfois à des résultats proches, si bien qu'on ne peut pas clairement privilégier une procédure de linéarisation par rapport à une autre pour résoudre un problème donné. De même, parmi les multiples manières de définir la déformation de référence, laquelle retenir ? Des éléments de réponses à ces questions peuvent être apportés au travers de l'analyse des réponses locales. Outre des éclairages sur les propriétés homogénéisées et notamment sur l'origine microscopique des performances ou des limites des différents modèles, l'analyse des réponses locales prévoit d'être un outil essentiel pour la compréhension des phénomènes non linéaires locaux tels que la plasticité ou l'endommagement [PCS98, IMPCS06].

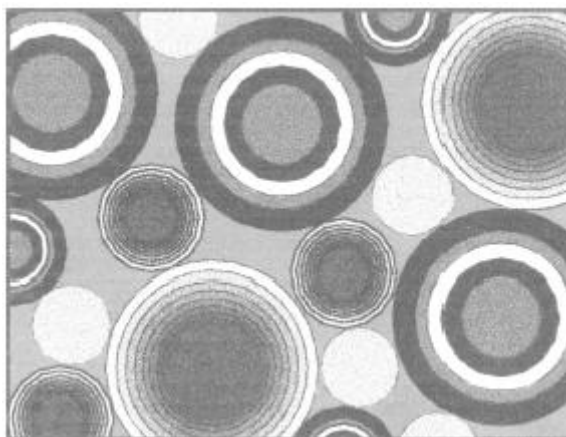


FIG. 1.11 – Inclusions multicouches [BOR03]

1.5.3 Cas particulier des grandes déformations

Outre la prise en compte d'une information microstructurale riche sur la morphologie initiale du matériau étudié, certains travaux soulignent l'importance de suivre l'évolution de la microstructure au cours du chargement, notamment dans le cas particulier où de grandes déformations sont localement attendues [KPC98, LMM04, LPPC06, PCT00]. En effet, la modification de la taille, de la forme ou encore de l'orientation des charges peut fortement influencer la réponse macroscopique et parfois même conduire à des phénomènes d'instabilité, déjà mentionnés dans [ZR93]. Dans [KPC98], Kailasam et al. montrent que la réponse d'un composite formé de charges réparties de manière isotrope dans une matrice viscoélastique linéaire est anisotrope et viscoélastique non linéaire. Cette anisotropie et cette non linéarité macroscopiques sont les conséquences directes des changements morphologiques dus aux grandes déformations. D'autre part, Lahellec et al. se penchent sur l'évolution de la microstructure pour analyser les phénomènes qu'ils observent sur la réponse macroscopique estimée de composites hyperélastiques périodiques à fibres longues [LMM04]. Ainsi, les deux enjeux précédemment cités (paragraphe 1.5.1 et 1.5.2) sont particulièrement manifestes et imbriqués dans le contexte des transformations finies.

Comme nous l'avons déjà mentionné, les différents modèles micromécaniques ne peuvent prendre en compte qu'une information morphologique partielle et sont bien souvent adaptés à un type particulier de microstructure (répartition isotrope des constituants pour les bornes de Hashin-Shtrikman (H-S), répartition anisotrope dans l'extension de H-S proposée par Ponte-Castañeda et Willis [PCW95]). Ils ne peuvent par conséquent pas rendre compte des changements microstructuraux apparaissant au cours d'un chargement. Pour pallier à ce problème, Kailasam et al. [KPC98] introduisent des variables internes pour « actualiser »

la microstructure au cours du chargement. L'utilisation des résultats de l'homogénéisation pour alimenter les lois d'évolution des variables internes permet de suivre l'évolution de la microstructure. Dans le cas de comportements hyperélastiques, comme dans les travaux [LMM04, LPPC06], la description du mouvement est naturellement faite dans un cadre Lagrangien ; il n'est pas nécessaire d'ajouter des équations supplémentaires pour suivre les évolutions microstructurales puisqu'elles sont implicitement contenues lors du calcul du comportement homogénéisé. En effet, comme ces auteurs le suggèrent, on peut remonter aux changements microstructuraux par calculs annexes -puisque l'on dispose de tous les ingrédients pour connaître les mouvements de chaque point du composite à un instant donné) et faire des liens avec la réponse macroscopique pour mieux appréhender les phénomènes observés.

1.5.4 Traitement de la viscoélasticité

Lorsque l'on considère des milieux hétérogènes à constituants viscoélastiques, le couplage entre viscosité et élasticité génère à l'échelle locale des interactions complexes, retardées, ayant une conséquence notable à l'échelle macroscopique appelée « effet mémoire longue » [SUQ87]. Pour illustrer cet effet, Rougier et al. considèrent un composite biphasé à constituants Maxwelliens [RSZ93]. Ils montrent au travers de l'étude du spectre de relaxation du composite, que le comportement macroscopique n'est pas pour autant de type Maxwellien ! En particulier, au lieu de se réduire à une raie discrète, le spectre de relaxation revêt un caractère continu, illustrant l'effet des interactions retardées. Il est donc primordial de décrire correctement ces interactions locales, au travers de lois d'accommodation véritablement viscoélastiques (cf. article de Zaoui et Raphanel [ZR93]). Enfin, ici encore, la microstructure a une nette influence sur l'effet mémoire longue (voir par exemple Beurthey et Zaoui [BZ00]).

Dans la plupart des cas, on utilise le principe de correspondance pour transformer le problème hétérogène viscoélastique en un problème élastique symbolique. Ce dernier est résolu par une méthode d'homogénéisation linéaire dans l'espace de Laplace. On revient ensuite dans l'espace réel par inversion des transformées de Laplace-Carson. Ce principe est schématisé sur la figure 1.12 dans le cas de la viscoélasticité linéaire. Lorsque des comportements viscoélastiques non linéaires sont considérés, le problème est d'abord linéarisé (voir paragraphe 1.4) puis la procédure résumée sur le schéma 1.12 est mise en œuvre pour le problème linéarisé.

Il s'agit d'un processus relativement lourd, dont l'étape la plus problématique est celle du retour à l'espace temps réel. En effet, le calcul de l'inversion des transformées de Laplace-Carson est souvent très lourd et implique un recours à des approximations. Ainsi Brenner et Masson commencent-ils par proposer une méthode numérique d'approximation du

calcul de l'inverse des transformées de Laplace-Carson [BM05]. Li et Weng proposent et appliquent quant à eux une méthode pour déterminer le comportement homogénéisé de composites particulaires à matrice élasto-viscoplastique [LW98]. Ils commencent par écrire le problème élastique symbolique associé au problème viscoélastique initial, et font intervenir une viscosité tangente en cisaillement définie à partir d'un problème viscoplastique. Les multiples passages entre les trois problèmes (élastique symbolique, viscoélastique et viscoplastique) contribuent à une perte de lisibilité globale. D'autre part, pour pouvoir effectuer de manière analytique le retour à l'espace réel, les auteurs procèdent à des simplifications importantes. Enfin, dans une très récente contribution, Lahellec et Suquet proposent une méthode de résolution permettant de s'affranchir du principe de correspondance [LS07]. Ils opèrent directement dans l'espace-temps réel en ramenant l'intégration des lois d'évolution des variables internes à un problème variationnel incrémental. Ce dernier est approché par un problème de stationnarité (suivant la procédure variationnelle de Ponte-Castañeda [PC92]) et résolu analytiquement pour des composites périodiques bidimensionnels. Ce travail constitue une avancée notable pour l'homogénéisation des milieux viscoélastiques.

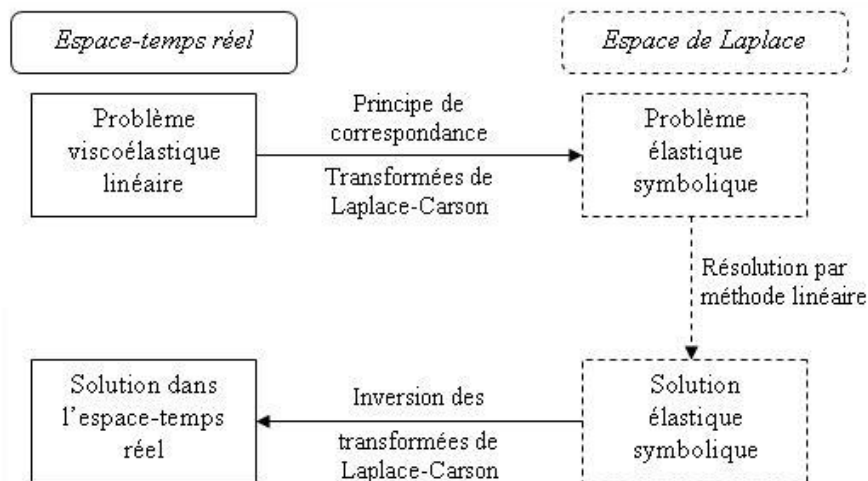


FIG. 1.12 – Principe de résolution classique d'un problème viscoélastique linéaire hétérogène

1.6 Formulation du sujet de thèse

Les sections 1.3 à 1.5 précédentes ont permis de présenter le principe général de l'homogénéisation des milieux non linéaires par les méthodes de moyenne. Les concepts majeurs de ces techniques ainsi que les difficultés sous-jacentes (prise en compte de la microstructure, description de l'hétérogénéité intraphase, cas particuliers des grandes déformations et de la viscoélasticité) permettent de finaliser la formulation des objectifs de la présente

thèse.

1.6.1 Rappel des objectifs de l'étude globale et chronologie

On rappelle que l'objectif que s'est fixé à long terme le CEG est de disposer d'un outil théorique de prédiction de la vulnérabilité des composites énergétiques. Le modèle phénoménologique élaboré par Trumel a conclu entre autre à la nécessité de procéder par changement d'échelle afin de pouvoir décrire plus finement les mécanismes locaux qui influencent la vulnérabilité des composites énergétiques (voir paragraphe 1.2.3). Suivant ces recommandations, la technique de Christoffersen [CHR83] a été choisie comme base de travail. Cette approche non classique, dont l'extension au cadre des transformations finies sera rappelée dans le chapitre suivant, a séduit pour différentes raisons. D'abord, elle introduit une schématisation *explicite* de la microstructure réelle, proposant notamment une caractérisation fine des interfaces grains/matrice, suggérant ainsi la possibilité d'intégrer dans le modèle la prise en compte d'endommagement par décohésion aux interfaces grains/matrice. D'autre part, elle a été développée pour des composites à fort taux de charge. Or, la plupart des modèles d'homogénéisation existants ne sont pas adaptés à ce type de matériaux, les estimations qu'ils fournissent se détériorant avec l'augmentation du taux de charges (voir par exemple [MS03b] ou [FUN07]). Enfin, elle fournit l'accès à une estimation des champs locaux. Ces trois arguments, couplés à la simplicité du formalisme de l'approche non classique de Christoffersen (voir chapitre suivant), permettent d'entrevoir cette dernière comme une base théorique solide pour répondre aux objectifs que l'on s'est donné.

La méthode de Christoffersen étant initialement formulée dans un contexte élastique linéaire, elle a progressivement été étendue à des comportements plus complexes, de manière à se rapprocher du cadre de l'application envisagée. La démarche suivante a été adoptée :

- Nadot a tout d'abord étendu l'approche au cadre de la viscoélasticité linéaire HPP [MAR99]. Considérant des grains élastiques dans une matrice viscoélastique de type solide de Zener, elle a montré que la technique étendue permettait de décrire des interactions locales véritablement viscoélastiques entre les constituants et a mis en évidence l'effet mémoire longue conséquent par analyse des formules analytiques obtenues (voir aussi [NMTDF03]). Elle a ensuite étendu la transition d'échelle en présence d'endommagement par décohésion aux interfaces grains/matrice (état fixé) [NDTF06].
- Guiot a étendu l'approche au cadre des transformations finies pour un matériau sain [GUI05]. Il a adapté les hypothèses de base de l'approche de Christoffersen au cadre géométrique non linéaire et a poussé les développements analytiques relatifs à la mise en place du problème de localisation-homogénéisation le plus loin possible pour

un comportement viscohyperélastique de la matrice. D'un point de vue pratique, il a appliqué l'approche (que nous qualifierons dans la suite d'« approche morphologique ») à un composite périodique simple à constituants hyperélastiques de manière à illustrer les points saillants de cette nouvelle approche. La résolution du problème de localisation-homogénéisation hyperélastique a finalement été effectuée de manière numérique [GND06].

- Dartois [DHN⁺07] s'attache quant à elle à enrichir le modèle en présence d'endommagement développé par Nadot dans le cadre HPP. Elle a ainsi introduit deux critères. Le premier traite de la nucléation des défauts aux interfaces grains/matrice. Le second permet de gérer l'ouverture/fermeture des défauts présents. Ces deux critères permettent de décrire l'évolution de l'endommagement à l'échelle locale (chronologie d'apparition et position des défauts) et ses conséquences sur les propriétés mécaniques macroscopiques du composite (dégradation, anisotropie induite, effet unilatéral).

1.6.2 Nouveaux aspects et objectifs de la présente thèse

Les travaux effectués jusqu'à aujourd'hui sur l'approche de type Christoffersen ont eu pour vocation d'étudier les aptitudes théoriques de la technique à appréhender les différentes sources de non linéarité intervenant dans le comportement des élastomères fortement chargés (viscoélasticité, grandes déformations, endommagement). Il s'agissait par conséquent d'études de faisabilité. Concernant le matériau sain, il convient à présent de regarder s'il est possible de traiter *conjointement* viscoélasticité et grandes déformations c'est-à-dire, si l'approche est *concrètement applicable à un composite à matrice viscohyperélastique*. C'est le premier objectif auquel la présente thèse se propose de répondre.

D'autre part, il convient aujourd'hui de s'interroger sur les *performances quantitatives* de l'approche morphologique dans un cadre géométriquement non linéaire pour en cerner les points forts et les points faibles. Cette étude devrait permettre de délimiter un domaine de validité de l'approche morphologique et/ou de proposer des solutions pour améliorer ses performances. Comme nous l'avons mentionné dans les sections 1.4 et 1.5, l'homogénéisation des milieux non linéaires a fortement progressé au cours de ces vingt dernières années. Ainsi, parallèlement aux extensions de l'approche de Christoffersen énumérées au paragraphe précédent, de nouveaux enjeux ont émergé (voir section 1.5). L'évaluation de l'approche engendrera donc également une discussion sur sa position face à ces difficultés saillantes. Enfin, bien que l'approche étudiée ait été développée pour une application aux composites énergétiques, rien n'empêche de l'appréhender en tant que prototype pour de nouvelles approches d'homogénéisation non linéaire, à base morphologique et au principe de résolution direct. Cet aspect là sera également exploré au cours de cette étude.

En résumé, les deux principaux objectifs de la présente thèse sont les suivants :

- mettre en œuvre l’approche proposée dans un cadre viscohyperélastique pour illustrer son applicabilité aux composites énergétiques, dont la matrice présente ce type de comportement
- procéder à une première évaluation des performances de l’approche morphologique, à la fois vis-à-vis de l’application qu’on lui prévoit, mais aussi vis-à-vis de ses points originaux (base morphologique, principe de résolution direct) par rapport aux autres techniques d’homogénéisation des milieux non linéaires

La difficulté principale se situe donc au niveau de la recherche d’un compromis équilibré entre application et caractère ouvert de l’approche proposée.

Chapitre 2

L'approche morphologique : rappels théoriques et analyse. Application à la viscohyperélasticité

Sommaire

2.1	Introduction	47
2.2	Rappel des fondements théoriques	47
2.2.1	Schématisation géométrique	47
2.2.2	Schématisation cinématique	49
2.2.3	Problème de localisation-homogénéisation	49
2.2.4	Principe général de résolution	50
2.3	Réflexions sur l'approche	52
2.3.1	Schématisation géométrique	52
2.3.2	Schématisation cinématique	53
2.3.3	Hétérogénéité dans la phase matrice	54
2.3.4	Condition de compatibilité	54
2.3.5	Système à résoudre	55
2.4	Application à la viscohyperélasticité	57
2.4.1	Introduction	57
2.4.2	Volumes aléatoires de travail	58
2.4.3	Comportements des constituants	60
2.4.3.1	Viscohyperélasticité de la matrice	60
2.4.3.2	Hyperélasticité des grains	63
2.4.4	Résolution du problème dans l'espace-temps réel	63
2.4.5	Mise en œuvre et résultats	67
2.5	Conclusion	68

2.1 Introduction

Dans cette partie, nous nous attachons au cours d'une première section à rappeler de manière synthétique les fondements théoriques de l'approche morphologique (AM) c'est-à-dire de l'extension au cadre des transformations finies de l'approche originelle de Christoffersen. Pour de plus amples détails, le lecteur pourra se reporter à [CHR83, MAR99, NMTDF03, GUI05]. Les différentes étapes clé constituant l'essence de cette méthode sont énumérées afin de montrer le cheminement suivi pour arriver à un problème de « localisation-homogénéisation » particulier. Le principe général de résolution dudit problème est également présenté.

Dans une seconde section, nous revenons sur chacune des hypothèses formulées à la base de l'approche et nous discutons des conséquences théoriques qu'elles engendrent. Les remarques formulées conduisent ainsi à présenter les limites théoriques que l'approche morphologique laisse entrevoir, tout autant qu'un certain nombre de cartouches dont elle dispose pour répondre aux enjeux généraux de l'homogénéisation des milieux non linéaires (détaillés dans le paragraphe 1.5).

Enfin, dans la dernière section, l'approche morphologique est mise en œuvre dans un contexte viscohyperélastique. Au cours de la présentation de l'algorithme de résolution développé à cet effet, l'accent est notamment mis sur le caractère direct de la résolution du problème de localisation-homogénéisation (voir aussi [TNMDF07]).

2.2 Rappel des fondements théoriques

2.2.1 Schématisation géométrique

La première étape de l'approche morphologique consiste à schématiser le composite fortement chargé à microstructure aléatoire considéré selon une procédure particulière (voir illustration sur la figure 2.1).

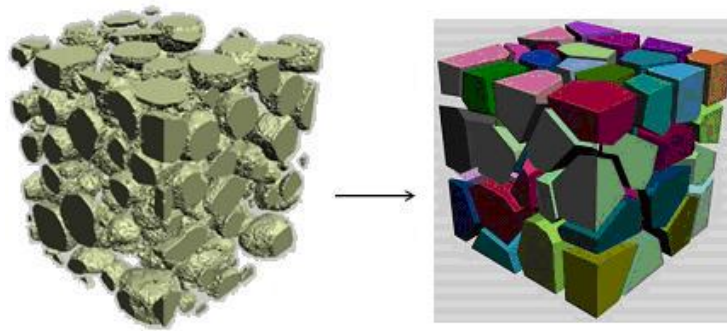


FIG. 2.1 – Illustration de l'étape de schématisation géométrique de l'AM : tomographie d'un matériau réel et volume schématisé associé selon la procédure de Christoffersen

Dans la configuration initiale, le composite particulaire considéré est ainsi schématisé par un assemblage de grains polyédriques convexes, de tailles et de formes quelconques, séparés par de fines couches de liant. Chaque couche de matrice est définie par un jeu de quatre paramètres morphologiques définis dans un cadre lagrangien :

- h^α , épaisseur *constante* de la couche α . L'épaisseur peut varier d'une couche à une autre.
- \vec{d}^α , vecteur reliant les centroïdes des deux grains séparés par la couche α .
- A^α , aire projetée de la couche α .
- \vec{n}^α , vecteur unitaire normal à l'interface grain/couche α .

Ces paramètres, définis une fois pour toute dans la configuration initiale non déformée, sont représentés sur la figure 2.2. Ils font partie des *données* du problème.

Les points essentiels de cette schématisation géométrique préliminaire seront discutés au paragraphe 2.3.1, où l'on précisera notamment la notion d'aire projetée.

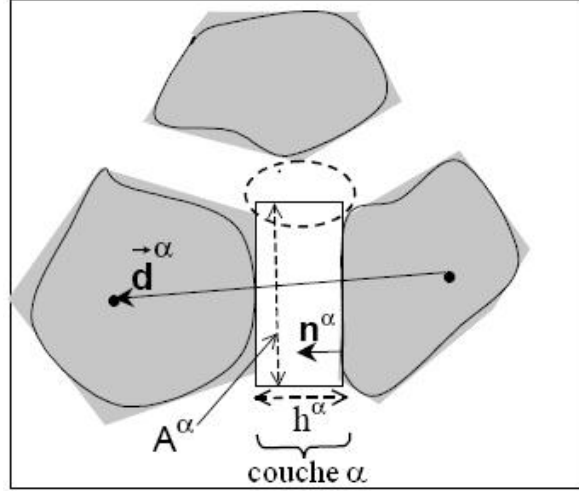


FIG. 2.2 – Schématisation géométrique de Christoffersen (représentation 2D)

2.2.2 Schématisation cinématique

La seconde étape de l'approche morphologique consiste à formuler une série d'hypothèses concernant le champ de déplacement régnant au sein du volume schématisé. Dans le cadre des transformations finies, elles s'énoncent comme suit :

- Les centroïdes des grains sont supposés avoir un mouvement d'ensemble défini par le gradient de transformation global \mathbf{F} (donnée du problème).
- Le gradient de transformation dans les grains, noté \mathbf{f}^0 , est supposé homogène et identique pour tous les grains.
- Le gradient de transformation dans la couche α , noté \mathbf{f}^α , est supposé homogène dans la couche α . Il peut varier d'une couche à une autre.
- Les perturbations localisées aux coins et arêtes des grains sont négligées (zone encadrée sur la figure 2.2).

2.2.3 Problème de localisation-homogénéisation

Dans ce contexte doublement schématisé (géométrique et cinématique), la continuité du champ de déplacement \mathbf{u} à l'interface grain/couche α est exploitée. Ceci débouche sur l'expression suivante, qui exprime le gradient de transformation dans la couche α :

$$f_{iJ}^\alpha = f_{iJ}^0 + (F - f^0)_{iK} \frac{d_K^\alpha n_J^\alpha}{h^\alpha} \quad (2.1)$$

La compatibilité entre la description précédente du mouvement local et le mouvement

global devant en outre être assurée, l'équation suivante est imposée :

$$(1 - c)\mathbf{f}^0 + \frac{1}{V_0} \sum_{\alpha} \mathbf{f}^{\alpha} A^{\alpha} h^{\alpha} = \mathbf{F} \quad (2.2)$$

où V_0 désigne le volume schématisé (grains + couches) et c la concentration en couches de ce volume : $c = \frac{1}{V_0} \sum_{\alpha} A^{\alpha} h^{\alpha}$. L'injection de la formule (2.1) dans (2.2) fait émerger la condition suivante sur les paramètres morphologiques du volume pour que la compatibilité (2.2) soit effectivement satisfaite :

$$\frac{1}{V_0} \sum_{\alpha} d_I^{\alpha} n_J^{\alpha} A^{\alpha} = \delta_{IJ} \quad (2.3)$$

avec δ_{IJ} symbole de Kronecker. Cette « condition de compatibilité » fera l'objet d'une discussion dans la section suivante (voir paragraphe 2.3.4).

Ensuite, l'application du principe de macrohomogénéité de Hill-Mandel -généralisé aux grandes déformations (voir par exemple Stolz [STO87]) et adapté au contexte en question-débouche sur le système suivant dans le cas de conditions aux limites homogènes en contraintes :

$$\begin{cases} \bar{\mathbf{S}}_{Ji} = \langle \bar{\mathbf{s}}_{Ji} \rangle_{v_0} = (1 - c)\bar{\mathbf{s}}_{Ji}^0 + \frac{1}{V_0} \sum_{\alpha} \bar{\mathbf{s}}_{Ji}^{\alpha} A^{\alpha} h^{\alpha} \\ \bar{\mathbf{S}}_{Ji} = \frac{1}{V_0} \sum_{\alpha} t_i^{\alpha} d_J^{\alpha} \quad ; \quad t_i^{\alpha} = \bar{\mathbf{s}}_{Ii}^{\alpha} n_I^{\alpha} A^{\alpha} \end{cases} \quad (2.4)$$

$\bar{\mathbf{S}}$, $\bar{\mathbf{s}}^0$ et $\bar{\mathbf{s}}^{\alpha}$ désignent respectivement les tenseurs des contraintes : nominales macroscopiques, nominales moyennes dans les grains puis nominales moyennes dans la couche α . $\bar{\mathbf{t}}^{\alpha}$ représente la force totale transmise via la couche α dans la configuration actuelle, exprimée dans la configuration initiale. Par différence des deux équations de (2.4), on obtient la relation suivante :

$$(1 - c)\bar{\mathbf{s}}_{Ji}^0 + \frac{1}{V_0} \sum_{\alpha} \bar{\mathbf{s}}_{Ji}^{\alpha} A^{\alpha} h^{\alpha} - \frac{1}{V_0} \sum_{\alpha} t_i^{\alpha} d_J^{\alpha} = 0 \quad (2.5)$$

En pratique, c'est cette équation qu'il faut résoudre pour mener à bien l'homogénéisation de milieux hétérogènes avec l'approche morphologique.

Remarque : L'extension en transformations finies des travaux de Christoffersen a été opérée par Guiot en suivant la même méthodologie que Christoffersen en HPP. Aussi, le lecteur intéressé par le détail des développements nécessaires à la mise en place des relations (2.1) et (2.4), au coeur de l'AM, pourra se référer à [CHR83, MAR99, NMTDF03] et à [GUI05, GND06].

2.2.4 Principe général de résolution

A ce stade, il est nécessaire de choisir des lois de comportement pour caractériser la réponse mécanique des grains et de la matrice. Une fois ce choix fait, on peut :

- exprimer $\bar{\mathbf{s}}^0$ en fonction de \mathbf{f}^0
- exprimer $\bar{\mathbf{s}}^\alpha$ dans chaque couche α en fonction de \mathbf{f}^0 , de \mathbf{F} et des paramètres morphologiques (en utilisant la relation (2.1))

En remplaçant $\bar{\mathbf{s}}^0$ et $\bar{\mathbf{s}}^\alpha$ par leurs expressions dans (2.5), on obtient une équation dont la seule inconnue reste le gradient de transformation dans les grains : \mathbf{f}^0 (les paramètres morphologiques et le gradient de transformation macroscopique \mathbf{F} constituant les **données** du problème). Il s'agit donc de trouver \mathbf{f}^0 tel que l'équation (2.5) soit satisfaite.

Une fois \mathbf{f}^0 déterminé, les champs locaux et globaux (homogénéisés) peuvent être calculés. Concernant les grains, la connaissance de \mathbf{f}^0 et de la loi de comportement permet de calculer le tenseur des contraintes nominales par exemple. Concernant les couches, on remonte d'abord au gradient de transformation dans la couche α par l'intermédiaire de l'équation (2.1). Le tenseur des contraintes dans la couche α est alors calculé à partir de \mathbf{f}^α et de la loi de comportement de la matrice. Concernant le tenseur des contraintes nominales homogénéisé, il est calculé par moyenne du champ de contraintes nominales microscopiques selon (2.4)₁.

Les grandes lignes de l'approche morphologique et de la démarche de résolution sont recensées sur la figure 2.3.

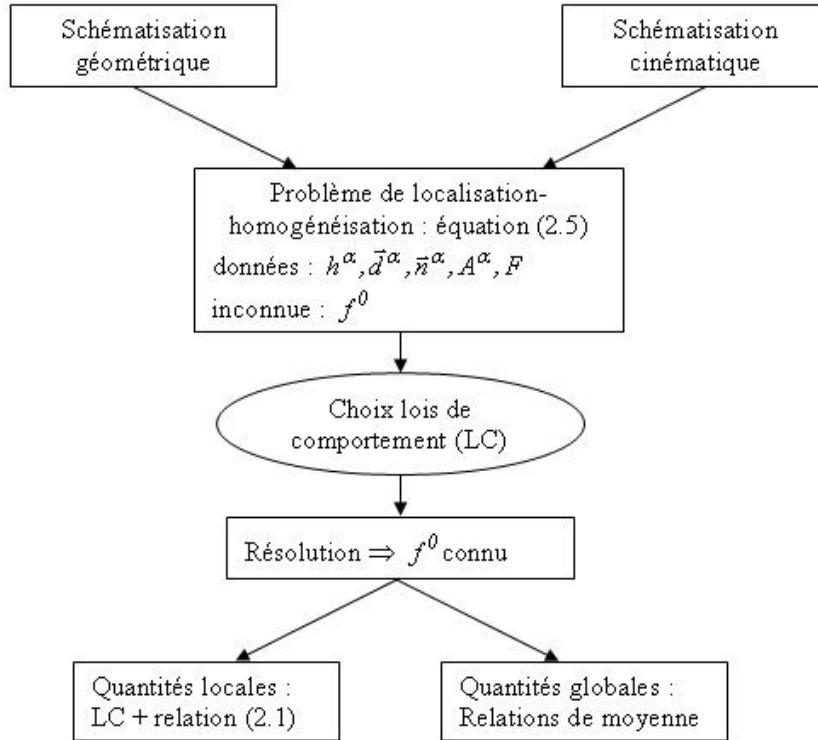


FIG. 2.3 – Méthodologie et principe de résolution de l’approche morphologique

2.3 Réflexions sur l’approche

2.3.1 Schématisation géométrique

Les techniques d’homogénéisation se ramènent le plus souvent à la résolution d’un problème (thermo)élastique fictif, formulé sur un volume dont la constitution est bien souvent éloignée de celle du matériau considéré, excepté dans le cas des approches à motifs morphologiques (voir paragraphe 1.5.1). Ici au contraire, la schématisation géométrique proposée par Christoffersen permet de travailler sur un volume, certes caricaturé, mais possédant néanmoins un lien étroit avec la microstructure du matériau réel, ce qui contribue à la lisibilité de la méthode. L’approche morphologique prend ainsi en compte, de manière explicite par l’intermédiaire des paramètres morphologiques (cf. paragraphe 2.2.1), une information microstructurale riche allant jusqu’à caractériser les interfaces grains/couches, ce qui constitue un point positif pour qui veut modéliser l’endommagement. D’autre part, Christoffersen a montré dans son article que les estimations dépendaient de la texture éventuelle du composite étudié, des irrégularités de forme des grains et d’épaisseurs de couches (i.e. de distances intergranulaires) [CHR83] ; une telle dépendance est conservée en transformations finies. Pour finir, contrairement aux autres approches où l’anisotropie d’un

composite peut poser un problème particulier (voir [PCW95]), la technique proposée par Chrisoffersen opère indifféremment des symétries du matériau considéré, les paramètres morphologiques constituant des indicateurs directs d'une anisotropie éventuelle.

En revanche, une telle schématisation, réalisée à partir d'images tomographiques du matériau considéré -avec les contraintes fortes auxquelles elle doit répondre (tel que le parallélisme des facettes de grains en regard)- demande à être optimisée. Cette schématisation doit donc être la plus proche possible du matériau réel afin de conférer le maximum de pertinence aux paramètres morphologiques $\vec{d}^\alpha, \vec{n}^\alpha$ et h^α . Notons qu'une fois les grains polyédralisés, les paramètres précédemment cités sont directement identifiables alors qu'il reste un degré de liberté concernant la définition de l'aire projetée A^α . En effet, elle peut être définie de différentes manières : la prendre égale à la moyenne arithmétique des deux surfaces en regard n'est pas la seule possibilité. Nous en reparlerons plus loin (paragraphe 2.4.2). Mentionnons pour finir que pour optimiser la correspondance entre matériau réel et matériau schématisé nous verrons un peu plus loin que la condition de compatibilité est l'un des paramètres dont il faut tenir compte.

2.3.2 Schématisation cinématique

Les hypothèses cinématiques formulées une fois la schématisation géométrique effectuée constituent un point théorique discutable de l'approche morphologique. Cependant, étant donné l'application qu'on lui prévoit, elles sont justifiables de la manière suivante :

- L'hypothèse « f^0 homogène dans un grain » est a priori acceptable dans la mesure où les particules sont supposées être quasi-rigides, ou tout au moins avoir des modules beaucoup plus élevés que ceux de la matrice (fort contraste).
- Concernant l'hypothèse « f^0 identique pour tous les grains » , c'est le fort taux de charge qui entre ici en ligne de compte. En effet, les particules étant présentes en très forte proportion, on peut s'attendre à ce qu'elles suivent un mouvement d'ensemble en particulier en matière de rotation. Cette hypothèse reste néanmoins à notre avis la plus discutable et sera quantitativement analysée au chapitre 4.
- L'hypothèse « f^α homogène dans la couche α » revient quant à elle à considérer un champ de déplacement linéaire par morceaux dans la phase matrice vue comme un assemblage de couches. Cette linéarisation peut au premier abord paraître inadéquate dans un contexte géométriquement non linéaire, mais deux arguments s'opposent à cette idée. D'abord, compte tenu de la faible épaisseur des couches, il est très probable que les champs locaux soient relativement homogènes dans une couche, excepté près des zones médianes. Ensuite, à l'échelle du VER, une couche est un élément si petit que l'hypothèse de linéarité dans cette zone ne doit pas être si contraignante.
- Enfin, l'hypothèse consistant à négliger les effets dans les « zones médianes » (zones

encerclées sur la figure 2.2) peut se justifier par le fait que ces zones occupent une place faible dans le volume, compte tenu de la faible épaisseur des couches elle-même consécutive du fort taux de charges des matériaux auxquels l'approche est destinée. Là encore nous reviendrons sur une analyse quantitative de cet aspect dans les chapitres 3 et 4.

2.3.3 Hétérogénéité dans la phase matrice

L'exploitation de la double schématisation (géométrique et cinématique) a conduit dans un premier temps à la relation (2.1) qui exprime le gradient de transformation de la couche α en fonction du gradient de transformation macroscopique, de celui des grains et des paramètres géométriques propres à la couche α . D'une couche à une autre, ce sont les paramètres géométriques qui vont varier, et par conséquent, le gradient de transformation d'une couche α' sera différent de celui de la couche α . La double schématisation proposée offre donc un moyen de décrire une certaine hétérogénéité dans la phase matrice représentée par un assemblage de couches aux caractéristiques différentes, et ce, quel que soit le comportement de la matrice. Ceci constitue un avantage certain de la méthode (voir paragraphe 1.5.2 du chapitre 1).

Cependant, il est important de souligner que cette hétérogénéité est obtenue au prix d'hypothèses simplificatrices importantes formulées sur les champs locaux, contribuant au même titre que la schématisation géométrique directe au caractère non classique de l'approche. Même si ces hypothèses ont été justifiées par des arguments théoriques dans le paragraphe précédent, il conviendra de vérifier d'un point de vue quantitatif la véracité de nos propos ; ce sera fait au cours des études présentées aux chapitres 3 et 4.

En revanche, on pourrait déplorer le manque d'hétérogénéité dans la phase grain, comme l'impliquent les hypothèses formulées sur \mathbf{f}^0 . Cependant, en ce qui concerne l'application prévue, cela paraît raisonnable : étant donné le fort contraste entre les phases on s'attend à ce que ce soit la matrice qui accomode l'essentiel de la déformation. C'est sur l'aspect rotation que cette hypothèse risque d'être la plus gênante, mais comme avancé au paragraphe 2.3.2 précédent on peut espérer que le fort taux de charges de ces composites joue dans ce sens.

2.3.4 Condition de compatibilité

La compatibilité entre mouvements global et local au sens de la relation de moyenne (2.2) (voir paragraphe 2.2.3) a fait émerger une condition portant sur les paramètres géométriques du volume schématisé (cf. (2.3)). Cette dernière, qualifiée de condition de compatibilité (ou condition de cohérence), doit être perçue comme un critère d'applicabilité de

la méthode. En effet, cette relation implique la taille du volume considéré mais aussi des conditions sur les paramètres morphologiques introduits lors de la schématisation géométrique, et par conséquent, sur le matériau réel. On peut très bien imaginer que certains matériaux ne puissent pas être schématisés selon la procédure de Christoffersen en assurant l'égalité (2.3) et ce, quelle que soit la taille du volume considéré. Pour de tels matériaux, la compatibilité entre mouvements global et local n'est alors pas satisfaite, si bien que l'approche morphologique ne leur est pas applicable.

D'autre part, cette relation est l'un des critères de choix du VER. Il s'ajoute au critère relatif à la stabilisation des propriétés macroscopiques (voir paragraphe 1.3.2). En effet, un volume statistiquement représentatif de la morphologie du matériau réel pourra être considéré seulement si, une fois schématisé, ses paramètres morphologiques satisfont la condition de compatibilité (2.3). Ainsi, le VER mécanique associé à la méthode de Christoffersen ne coïncide pas nécessairement avec le VER morphologique : il peut a priori être plus grand. Dans le chapitre 5, nous préciserons sur l'exemple d'un composite énergétique spécifique les étapes nécessaires à la détermination du VER relatif à l'AM.

D'un point de vue pratique, le passage du matériau réel au matériau schématisé devra donc concilier représentativité des paramètres morphologiques et respect de (2.3).

2.3.5 Système à résoudre

Le système (2.4) auquel la démarche proposée aboutit mérite d'être détaillé. Tout d'abord, il est important de noter que la première équation (voir (2.4)₁) constitue une relation de moyenne « classique » (adaptée toutefois au contexte simplifié considéré) tandis que la seconde, (2.4)₂, est une relation propre à la démarche de Christoffersen exploitant le caractère granulaire du matériau. Elle traduit le fait que la transmission des efforts au sein de l'agrégat se fait uniquement au travers des interfaces grains/couches (voir illustration sur la figure 2.4), les couches jouant le rôle de zones de contact entre les grains. Les effets dans les zones médianes n'étant pas décrits, aucune transmission d'une couche à une autre n'est directement possible. Cette dernière est décrite via les grains comme le montre aussi la présence de \mathbf{f}^0 dans (2.1). Ceci constitue naturellement un point discutable de l'approche.

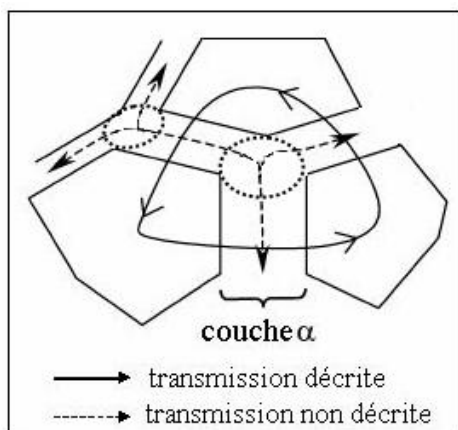


FIG. 2.4 – Transmission des effets au sein de l’agrégat dans l’approche de Christoffersen

Une deuxième remarque concerne la formulation unique à laquelle on arrive, quel que soit le comportement des constituants, linéaire ou non. On a vu que les approches d’homogénéisation classiques étaient fondées sur une linéarisation du problème non linéaire initial et que la diversité des procédures de linéarisation et des définitions des modules linéarisés pouvait constituer une difficulté pour l’utilisateur, dans la mesure où les différentes techniques ne sont pas encore hiérarchisées (voir paragraphe 1.5.2). De même, le choix d’un schéma d’homogénéisation linéaire est problématique : il peut s’avérer que ses hypothèses de base, satisfaites en début de chargement, ne soient plus vérifiées à mesure que le chargement progresse (voir par exemple [IMPCS06] où l’hypothèse implicite de petites fluctuations des champs locaux dans la procédure d’Hashin-Shtrikman est rapidement mise à défaut pour des comportements fortement non linéaires). L’approche morphologique s’affranchit quant à elle de toute procédure de linéarisation, ce qui contribue à son caractère direct et par suite à une lisibilité globale certaine et à une simplicité d’utilisation. C’est alors la complexité des modèles retenus pour décrire le comportement des différentes phases qui peut constituer l’une des limites de l’approche morphologique. En effet, une loi de comportement locale très aboutie influera directement sur la difficulté de résolution de l’équation (2.5). Nous verrons cependant dans la section suivante que le problème peut être résolu dans le cadre très ardu de la viscohyperélasticité.

On peut également souligner le fait que la résolution de l’équation (2.5) aboutit à la connaissance du gradient de transformation dans le composite (la détermination de \mathbf{f}^0 implique la connaissance du gradient de transformation dans n’importe quelle couche du composite via (2.1)). On a ainsi accès à des informations concernant les déformations mais aussi les rotations locales. D’autre part, il est possible de remonter à n’importe quelle mesure de déformation ou de contrainte à partir du gradient de transformation (voir annexe

A).

Enfin, on attire l'attention du lecteur sur le fait que le chargement est piloté par le gradient de transformation macroscopique \mathbf{F} (donnée du problème) et que les conditions aux limites en contraintes homogènes ne sont utilisées que d'un point de vue théorique pour la mise en place du système (2.4) depuis l'écriture du principe de macrohomogénéité. Ce dernier est formulé pour des champs de contraintes et de déformations respectivement statiquement et cinématiquement admissibles (voir paragraphe 1.3.5). Dans le cas considéré, il est clair que le champ de contraintes estimé à l'issue de la résolution de (2.5) n'est pas statiquement admissible. En effet, l'homogénéité par morceaux du gradient de transformation local engendre l'homogénéité par morceaux du champ de contraintes local dès lors que les propriétés mécaniques des grains et de la matrice sont homogènes. Nous n'avons en particulier pas réciprocity des contraintes à l'interface grain/couche α . Ensuite, le champ de déformation n'est pas non plus cinématiquement admissible. En effet, si la continuité du champ de déplacement est assurée aux interfaces grains/couches, elle ne l'est pas d'une couche à une autre puisque les effets dans les zones médianes ne sont pas décrits. En revanche, \mathbf{f}^0 est calculé de manière à satisfaire le système (2.4), si bien que le champ de contrainte obtenu vérifie néanmoins la relation fondamentale $\langle \bar{\mathbf{s}} : \mathbf{f} \rangle_{V_0} = \bar{\mathbf{S}} : \mathbf{F}$ avec $\bar{\mathbf{S}} = \langle \bar{\mathbf{s}} \rangle_{V_0}$.

2.4 Application à la viscohyperélasticité

2.4.1 Introduction

L'objectif de cette section est double. Il s'agit en premier lieu de prouver que l'approche morphologique est capable de traiter le problème viscohyperélastique et par conséquent, qu'il est envisageable de l'utiliser pour modéliser le comportement des propegols solides sains. Parallèlement, l'application que l'on souhaite présenter sera menée de manière à illustrer concrètement deux avantages conceptuels majeurs de l'approche morphologique : sa simplicité de mise en œuvre et sa résolution directe, y compris dans le contexte de la viscohyperélasticité, couplant les difficultés propres aux grandes déformations et au traitement de la viscoélasticité (voir paragraphes 1.5.3 et 1.5.4).

Pour cela, nous commençons par présenter le volume schématisé sur lequel l'approche morphologique va être mise en œuvre. Ensuite, nous déroulons la loi de comportement viscohyperélastique retenue pour décrire le comportement de la matrice, ainsi que la loi hyperélastique affectée aux grains. Enfin, nous détaillons l'algorithme de résolution développé pour venir à bout du problème viscohyperélastique considéré avant de présenter les premiers résultats obtenus (voir aussi [TNMDF07]).

2.4.2 Volumes aléatoires de travail

En vue de prouver la faisabilité de la résolution en viscohyperélasticité, nous avons opté pour la génération numérique de volumes aléatoires à grains polyédriques conformes à la schématisation géométrique de Christoffersen. Ces derniers ont été réalisés par Gérard Contesse (numéricien au CEG) selon la procédure suivante, que nous qualifierons dans la suite de méthode de « croissance de sphères » :

- Des sphères identiques sont placées de manière aléatoire dans une boîte cubique.
- Par homothétie, ces sphères sont gonflées, et les plans de tangence apparaissant lorsque deux sphères rentrent en contact sont conservés.
- Cette opération est répétée aussi longtemps que des sphères ne sont pas entrées en contact avec leurs voisines. A la fin, l'espace à l'intérieur de la boîte est entièrement polyédrisé.
- Pour former la matrice, une homothétie globale est appliquée à l'espace polyédrisé dans la boîte jusqu'à ce que la concentration en matrice atteigne la valeur souhaitée. L'homothétie assure que les faces de deux grains en regard sont parallèles (i.e. que chaque couche a bien une épaisseur constante).

Remarque : La polyédrisation de l'espace présentée ci-dessus est à rapprocher du schéma classique de Voronoï.

De cette manière, plusieurs séries de volumes comportant 75% de grains polyédriques ont été réalisés : des volumes à 75 grains (i.e. 75 sphères identiques ont été placées initialement dans la boîte), des volumes à 150 grains, à 400 grains, à 1200 grains. Pour chacun d'entre eux, les informations suivantes ont été stockées :

- Les paramètres morphologiques de chaque couche α : h^α , \vec{d}^α , \vec{n}^α et A^α .
- Le nombre total de couches dans le volume.
- Le volume total occupé par les polyèdres.

Elles constituent une partie des données du problème que nous allons résoudre.

Remarque : Les volumes ainsi générés n'ayant pas de bords périodiques, il est difficile de définir les paramètres morphologiques des couches situées sur les bords. Par exemple, le vecteur reliant le centroïde d'un grain situé près du bord avec un grain extérieur ne peut pas être défini.

Concernant le paramètre A^α , nous avons précédemment mentionné que sa définition n'était pas arrêtée (voir paragraphe 2.3.1). Nous avons donc proposé deux moyens pour le calcul de l'aire projetée. Notons A^1 et A^2 les aires des facettes en regard séparées par la couche α (voir figure 2.5). Les définitions considérées sont les suivantes :

- *Définition 1* : $A^\alpha = \frac{A^1 + A^2}{2}$ (moyenne arithmétique des aires de facettes).
- *Définition 2* : $A^\alpha = \frac{A^{1'} + A^{2'}}{2}$ avec $A^{1'}$ et $A^{2'}$ les aires obtenues par projection, depuis les

centroïdes des grains, des facettes sur le plan médian de la couche α (voir illustration sur la figure 2.5).

On notera que cette seconde définition est a priori celle que semble suggérer Christoffersen dans son article originel.

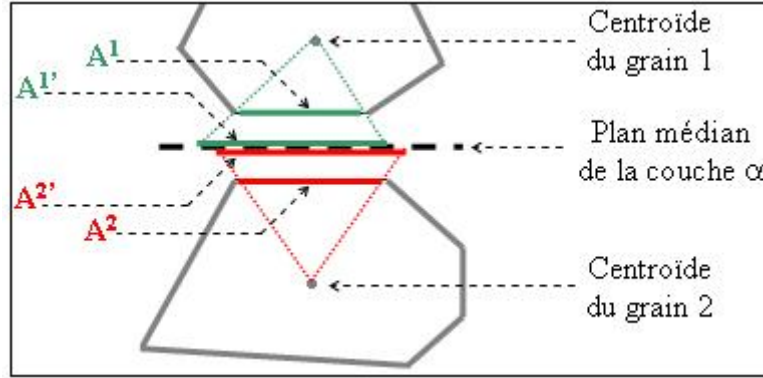


FIG. 2.5 – Illustration des aires intervenant dans les deux définitions testées pour l'aire projetée A^α d'une couche α (2D)

Nous avons ensuite constitué, pour chacune des deux définitions de l'aire projetée et pour chaque volume généré, les tenseurs $\mathfrak{N} = \frac{1}{V_0} \sum_{\alpha} \mathbf{d}^{\alpha} \otimes \mathbf{n}^{\alpha} A^{\alpha}$ intervenant dans la condition de compatibilité (2.3). On observe que l'augmentation du nombre de grains dans le volume améliore la condition de compatibilité. D'autre part, à nombre de grains fixé, c'est la seconde définition de l'aire projetée qui fournit les meilleurs résultats en terme de compatibilité i.e. des tenseurs \mathfrak{N} les plus proches du tenseur identité d'ordre 2 (voir illustration sur la figure 2.6 où l'on a porté les tenseurs \mathfrak{N} obtenus sur un volume à 75 grains pour les deux définitions de A^α). Nous travaillerons donc dans la suite avec la deuxième définition de l'aire projetée afin de minimiser l'écart entre $\langle \mathbf{f} \rangle_{V_0}$ et \mathbf{F} .

Remarque : Sans doute la valeur de la compatibilité aurait-elle été meilleure pour des volumes à bords périodiques pour lesquels on aurait pu compter dans le tenseur \mathfrak{N} la contribution des couches du bord.

$$\begin{array}{cc} \begin{pmatrix} 0,66 & 7.10^{-4} & 6.10^{-3} \\ 3.10^{-3} & 0,68 & 7.10^{-3} \\ 2.10^{-3} & 1.10^{-3} & 0,68 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0,8 & 2.10^{-3} & 6.10^{-3} \\ 4.10^{-3} & 0,81 & 8.10^{-3} \\ 2.10^{-3} & 1.10^{-3} & 0,81 \end{pmatrix} \\ \text{avec définition 1} & \text{avec définition 2} \end{array}$$

FIG. 2.6 – Tenseurs \mathbf{N} obtenus avec les deux définitions de l’aire projetée sur un volume à 75 grains polyédriques

Nous disposons donc d’un panel de volumes satisfaisant les conditions (dont (2.3)) imposées lors de l’étape de schématisation géométrique de l’AM. Dans ce qui suit, afin de limiter les temps de calcul (voir plus loin, paragraphe 2.4.5), nous travaillerons avec le volume à 75 grains dont nous avons présenté les résultats en terme de compatibilité sur la figure 2.6. Comme ce n’est pas la fiabilité des estimations qui nous intéresse dans cette partie, nous pouvons nous contenter de ce volume même s’il ne s’agit pas d’un VER. Le volume retenu sert ici uniquement de support de travail pour prouver l’aptitude de l’AM à résoudre le problème viscohyperélastique sur une microstructure aléatoire.

2.4.3 Comportements des constituants

2.4.3.1 Viscohyperélasticité de la matrice

Pour décrire le comportement du liant élastomérique, on utilise une approche thermodynamique à variable interne. Cette dernière est formulée dans un cadre Lagrangien d’une part pour s’affranchir de tout problème d’objectivité (problème caractéristique des grandes déformations : voir annexe A), d’autre part par souci de simplicité puisque l’approche morphologique est formulée dans ce même cadre. Le modèle retenu est proche dans sa structure de celui de Trumel et al. [TDFL01], lui-même inspiré des travaux de Simo [SIM87] et de leurs dérivés [GS92, RG97].

Les variables d’état considérées sont :

- \mathbf{E} : tenseur des déformations de Green-Lagrange (voir annexe A)
- γ : variable interne tensorielle homogène à une déformation, traduisant l’état de relaxation de la matrice. Lorsque cette dernière est parfaitement relaxée, γ est nul. Notons que γ est ici de nature non cinématique (i.e. elle ne nécessite pas de décomposition multiplicative du gradient de transformation local), contrairement aux variables internes des modèles de [SIM87, GS92, RG97]. Ce choix sera justifié plus loin (paragraphe 2.4.4).

On postule ensuite l'existence d'un potentiel thermodynamique w , énergie libre par unité de volume initial, somme d'une part réversible ne dépendant que de \mathbf{E} et d'une part visqueuse ne dépendant que de γ :

$$w(\mathbf{E}, \gamma) = w^{(r)}(\mathbf{E}) + w^{(v)}(\gamma) \quad (2.6)$$

De même, on suppose la décomposition additive de la contrainte de Piola-Kirchhoff 2 notée \mathbf{s} :

$$\mathbf{s} = \mathbf{s}^{(r)} + \mathbf{s}^{(v)} \quad (2.7)$$

Les parties réversible et visqueuse de \mathbf{s} , traduisant respectivement les parts à l'équilibre et hors équilibre de la réponse, sont données par :

$$\mathbf{s}^{(r)} = \frac{\partial w^{(r)}(\mathbf{E})}{\partial \mathbf{E}} \quad ; \quad \mathbf{s}^{(v)} = \frac{\partial w^{(v)}(\gamma)}{\partial \gamma} \quad (2.8)$$

Part réversible du comportement

$\mathbf{s}^{(r)}$ caractérise l'élasticité caoutchoutique de la matrice. Elle dérive de l'énergie instantanément récupérable $w^{(r)}$. Cette contrainte réversible est modélisée par l'intermédiaire des lois de comportements hyperélastiques elles-mêmes définies à partir de densités d'énergie de déformation.

Lors de ses travaux, Guiot [GUI05] a fait une étude des différents modèles hyperélastiques existant et son choix s'est arrêté sur une loi de type Mooney-Rivlin compressible (avec une loi pression hydrostatique/variation de volume linéaire). Il convient de rappeler que le choix de ce modèle d'hyperélasticité a résulté d'un compromis entre performances et simplicité puisque l'objectif était à l'époque de pousser les développements analytiques relatifs à la résolution de (2.5) le plus loin possible. Ayant aujourd'hui recours au numérique, nous pourrions considérer une loi de comportement plus performante, notamment en ce qui concerne la part volumique de la réponse dont la linéarité n'est pas satisfaisante. Cependant, nous n'envisageons pas un tel enrichissement dans cette partie puisqu'il ne s'agit pas de représenter au mieux le comportement d'un composite énergétique, mais uniquement de montrer l'aptitude de l'approche morphologique à traiter le problème viscohyperélastique. Nous travaillerons donc avec la densité de déformation suivante, somme d'une énergie de déformation de type Mooney-Rivlin et d'un terme de prise en compte de la compressibilité :

$$w^{(r)} = C_{10}(\bar{I}_1 - 3) + C_{01}(\bar{I}_2 - 3) + \frac{K}{2}(J - 1)^2 \quad (2.9)$$

avec :

- C_{10}, C_{01} : coefficients de Mooney-Rivlin
- K : module de compressibilité

– $\bar{I}_1 = I_1 J^{-2/3}$, $\bar{I}_2 = I_2 J^{-4/3}$: invariants modifiés (les invariants classiques étant donnés par : $I_1 = \text{tr}(\mathbf{C})$, $I_2 = \frac{1}{2}((\text{tr}\mathbf{C})^2 - \text{tr}\mathbf{C}^2)$ et $I_3 = \det\mathbf{C} = J^2$)

On notera néanmoins que contrairement aux précédents travaux de Guiot, la densité d'énergie de déformation est cette fois écrite en invariants modifiés de manière à découpler les effets distorsionnels des effets volumiques, ce qui est plus rigoureux. Nous pouvons en effet nous attendre à ce que ces derniers soient effectivement importants compte-tenu du fort taux de charge et des niveaux de pressions attendus, notamment pour des chargements compressifs tels que ceux que nous souhaitons modéliser en priorité (voir chapitre 5). Plus généralement, le découplage du potentiel thermodynamique en une part déviatoire et une part volumique vient du fait qu'expérimentalement, les niveaux d'énergie atteints en cisaillement et en dilatation sont très différents [LEJ06]. De plus, pour des matériaux quasi-incompressibles de telles formulations sont avantageuses sur le plan numérique dans la mesure où l'incompressibilité totale est une contrainte sévère, difficile à traiter [BOU06]. En termes de contraintes de Piola-Kirchhoff 2 \mathbf{s} , on a ainsi :

$$s_{IJ}^{(r)} = 2[C_{10}I_3^{-1/3}\delta_{IJ} + C_{01}I_3^{-2/3}(I_1\delta_{IJ} - C_{IJ}) - (\frac{C_{10}}{3}I_1I_3^{-4/3} + \frac{2C_{01}}{3}I_2I_3^{-5/3})I_3C_{IJ}^{-1}] + K(I_3 - I_3^{1/2})C_{IJ}^{-1} \quad (2.10)$$

Part visqueuse du comportement

$\mathbf{s}^{(v)}$ caractérise la part « hors équilibre » de la réponse ; elle est due aux interactions retardées entre les chaînes moléculaires. L'énergie « bloquée » dont elle dérive, $w^{(v)}$, est entièrement récupérable après relaxation.

Comme dans les travaux de Guiot, on suppose dans la suite que $w^{(v)}$ est une fonction quadratique de γ , ce qui implique que $\mathbf{s}^{(v)}$ dépend linéairement de la variable interne γ via le tenseur de rigidité visqueuse $\mathbf{L}^{(v)}$:

$$w^{(v)} = \frac{1}{2}\gamma : \mathbf{L}^{(v)} : \gamma ; \quad \mathbf{s}^{(v)} = \mathbf{L}^{(v)} : \gamma \quad (2.11)$$

Enfin, la variable interne γ , qui peut être interprétée comme une déformation élastique retardée, est supposée évoluer selon la loi suivante :

$$\dot{\gamma} + \frac{1}{\tau}\gamma = \dot{\bar{\mathbf{E}}} ; \quad \gamma(t=0) = 0 \quad (2.12)$$

τ est un temps de relaxation et $\dot{\bar{\mathbf{E}}}$ la dérivée temporelle de la partie déviatoire de \mathbf{E} . Cette loi suppose donc que les effets visqueux ne dépendent que de la part déviatoire de la déformation, ce qui est expérimentalement justifiable. En effet, l'étude du comportement des élastomères employés dans les composites énergétiques montre que les temps de relaxation associés à la part volumique de la déformation sont beaucoup plus longs que ceux associés aux déformations déviatoires : les premiers sont alors souvent « gelés »

(voir [TDFL01, ROG06, FUN07]).

Notons pour finir que le modèle proposé est thermodynamiquement admissible : il assure notamment la positivité de la dissipation viscoélastique $d^{(v)} = \mathbf{s}^{(v)} : (\dot{\bar{\mathbf{E}}} - \dot{\boldsymbol{\gamma}})$. Dans ce qui précède, le potentiel de dissipation n'a pas été introduit. En pratique, ce sont les lois d'évolution que l'on mesure, mais il est vrai que l'expression d'un potentiel de dissipation dont dériverait la loi d'évolution contribuerait à une rigueur certaine du modèle thermodynamique présenté.

Le modèle retenu pour décrire la viscohyperélasticité de la matrice peut être critiqué sur plusieurs points :

- Il n'est pas représentatif du caractère non linéaire de la viscoélasticité des élastomères.
- L'identification du tenseur de rigidité visqueuse $\mathbf{L}^{(v)}$ n'est pas arrêtée.
- La loi d'évolution de la variable interne ne fait intervenir qu'un seul temps de relaxation, ce qui limite sa validité à un domaine de vitesses de déformations restreint.

(voir la thèse de Guiot [GUI05] pour plus de détails concernant les deux derniers points). Cependant, nous nous satisferons de ce modèle, en arguant qu'il décrit de manière relativement classique des éléments essentiels du comportement des élastomères (grandes déformations, viscoélasticité). La modélisation retenue est par là même suffisante pour illustrer l'aptitude de l'AM à traiter de manière directe le problème viscohyperélastique.

2.4.3.2 Hyperélasticité des grains

Concernant les grains, afin de faciliter le passage à la moyenne, on a choisi de rester dans le formalisme des grandes déformations pour décrire leur comportement, même s'ils sont très peu déformables. On affecte donc aux grains aussi un comportement hyperélastique. Par souci de simplicité, la densité d'énergie des grains w^{grains} est exprimée à partir de la part réversible du comportement de la matrice (voir (2.9)) et d'un contraste. Autrement dit, on prend :

$$w^{grains} = w^{(r)} \times \text{contraste} \quad (2.13)$$

2.4.4 Résolution du problème dans l'espace-temps réel

Conformément au principe exposé au paragraphe 2.2.4, les lois décrivant le comportement des grains et de la matrice sont injectées dans (2.5). Elles permettent d'exprimer le tenseur des contraintes de Piola-Kirchhoff 2 dans les grains et dans chaque couche α . L'équation (2.5) fait intervenir le tenseur des contraintes nominales moyennes $\bar{\mathbf{s}}$; on utilise alors la relation suivante reliant ce dernier au tenseur des contraintes de Piola-Kirchhoff 2 \mathbf{s} :

$$\bar{\mathbf{s}} = \mathbf{s} \mathbf{f}^T \quad (2.14)$$

Rappelons que la matrice est schématisée par un assemblage de couches. Chacune d'entre elles est le siège d'un gradient de transformation qui lui est propre, puisque ce dernier dépend explicitement des paramètres morphologiques caractérisant la couche à laquelle il est associé (voir équation (2.1)). Ainsi, à chaque couche correspond un tenseur des déformations de Green-Lagrange homogène qui lui est propre ($\mathbf{E}^\alpha = \frac{1}{2}(\mathbf{f}^{\alpha T} \cdot \mathbf{f}^\alpha - \mathbf{Id})$ avec \mathbf{Id} tenseur identité d'ordre 2). A fortiori, $\overline{\mathbf{E}}$ diffère également d'une couche à une autre, si bien que chaque couche est dans son propre état de relaxation selon (2.12), caractérisé par γ^α homogène pour la couche α . Il y a donc autant de variables internes qu'il y a de couches dans le volume schématisé considéré.

Ce constat mène à deux remarques :

- D'abord, il justifie la nature non cinématique choisie pour la variable interne γ . En effet, le choix d'une variable de nature cinématique conduit à procéder à une décomposition multiplicative du gradient de transformation (cf. par exemple [SID74]). Compte tenu du nombre de couches dans un volume polyédrique aléatoire, procéder à cette décomposition représenterait un travail important et alourdirait les calculs de manière significative.
- Ensuite, il est clair que la distribution des orientations et des épaisseurs des couches engendrera des vitesses de déformations locales très variées. Or, l'intervention d'un unique temps de relaxation dans la loi d'évolution (2.12) ne permet pas de décrire correctement les processus de dissipation viscoélastique sur une large gamme de vitesses. Cependant, une fois encore, nous rappelons que compte tenu des objectifs que nous nous sommes fixé dans cette partie, nous nous en accommoderons.

Une fois les lois de comportements retenues injectées, l'équation (2.5) est complétée par un système différentiel relatif à l'évolution des variables internes introduites. Les équations suivantes doivent donc être résolues simultanément :

$$\left\{ \begin{array}{l} (1-c)\overline{\mathbf{s}}^0 + \frac{1}{V_0} \sum_{\alpha} \overline{\mathbf{s}}^\alpha A^\alpha h^\alpha - \frac{1}{V_0} \sum_{\alpha} \mathbf{t}^\alpha \otimes \mathbf{d}^\alpha = \mathbf{0} \\ \dot{\gamma}^\alpha + \frac{1}{\tau} \gamma^\alpha = \overline{\mathbf{E}}^\alpha ; \quad \gamma^\alpha(t=0) = 0 \quad \forall \alpha \end{array} \right. \quad (2.15)$$

Dans ce système :

- $\overline{\mathbf{s}}^0$ est une fonction de \mathbf{f}^0 .
- $\overline{\mathbf{s}}^\alpha$ dans chaque couche α est une fonction de \mathbf{f}^0 , \mathbf{F} (le gradient de transformation macroscopique, connu) et de la variable interne γ^α (via (2.1)).
- $\overline{\mathbf{E}}^\alpha$ dans chaque couche α est une fonction de \mathbf{f}^0 et \mathbf{F} (via (2.1)).

Toutes les équations formant (2.15) sont donc fortement couplées.

Algorithme de résolution

Pour résoudre le problème viscohyperélastique (2.15), nous avons proposé la démarche itérative suivante, également récapitulée sur la figure 2.7.

On considère un intervalle de temps $[0; T]$ discrétisé en n pas de temps constants et un chargement défini par la donnée de \mathbf{F} aux instants t_n (\mathbf{F}_n) :

- \mathbf{f}^0_{n-1} , gradient de transformation dans les grains à l'instant t_{n-1} , est connu : pour le premier pas de temps où le matériau est initialement non déformé, il s'agit de l'identité, pour les autres, il s'agit de la valeur calculée au pas de temps précédent. De même, les γ^{α}_{n-1} sont connus (nuls au premier pas de temps, calculés à la fin du pas de temps précédent pour les autres).

- Nous supposons ensuite classiquement que \mathbf{f}^0 est linéaire sur l'intervalle $[t_{n-1}; t_n]$ c'est-à-dire que :

$$\forall t \in [t_{n-1}; t_n], \mathbf{f}^0(t) = \frac{\mathbf{f}^0_n - \mathbf{f}^0_{n-1}}{t_n - t_{n-1}} t + \frac{\mathbf{f}^0_{n-1} t_n - \mathbf{f}^0_n t_{n-1}}{t_n - t_{n-1}}.$$

Cette approximation est recevable dès lors que l'on travaille sur un pas de temps suffisamment petit.

- Il est alors possible d'exprimer les tenseurs vitesse de déformation $\overline{\mathbf{E}}^{\alpha}_n$ dans chaque couche α (seconds membres des équations différentielles (2.15)₂) en fonction \mathbf{F}_n et de la valeur finale \mathbf{f}^0_n de \mathbf{f}^0 , inconnue sur le pas de temps n considéré.
- Les équations différentielles (2.15)₂ sont analytiquement résolues. Ceci permet d'exprimer chaque variable interne γ^{α}_n en fonction de \mathbf{F}_n et de l'inconnue \mathbf{f}^0_n .
- Ces expressions sont reportées dans (2.15)₁ et \mathbf{f}^0_n est calculé numériquement par un algorithme de Newton-Raphson.
- Une fois \mathbf{f}^0_n déterminé, les valeurs *numériques* des variables internes au temps t_n (γ^{α}_n) sont calculées. Elles servent de conditions initiales au pas de temps suivant au même titre que \mathbf{f}^0_n .

Ainsi, à chaque instant t_n , nous disposons des valeurs numériques de \mathbf{f}^0 et des variables viscoélastiques γ^{α} . Par suite, nous pouvons calculer toutes les grandeurs (locales et globales) souhaitées selon le principe exposé au paragraphe 2.2.4.

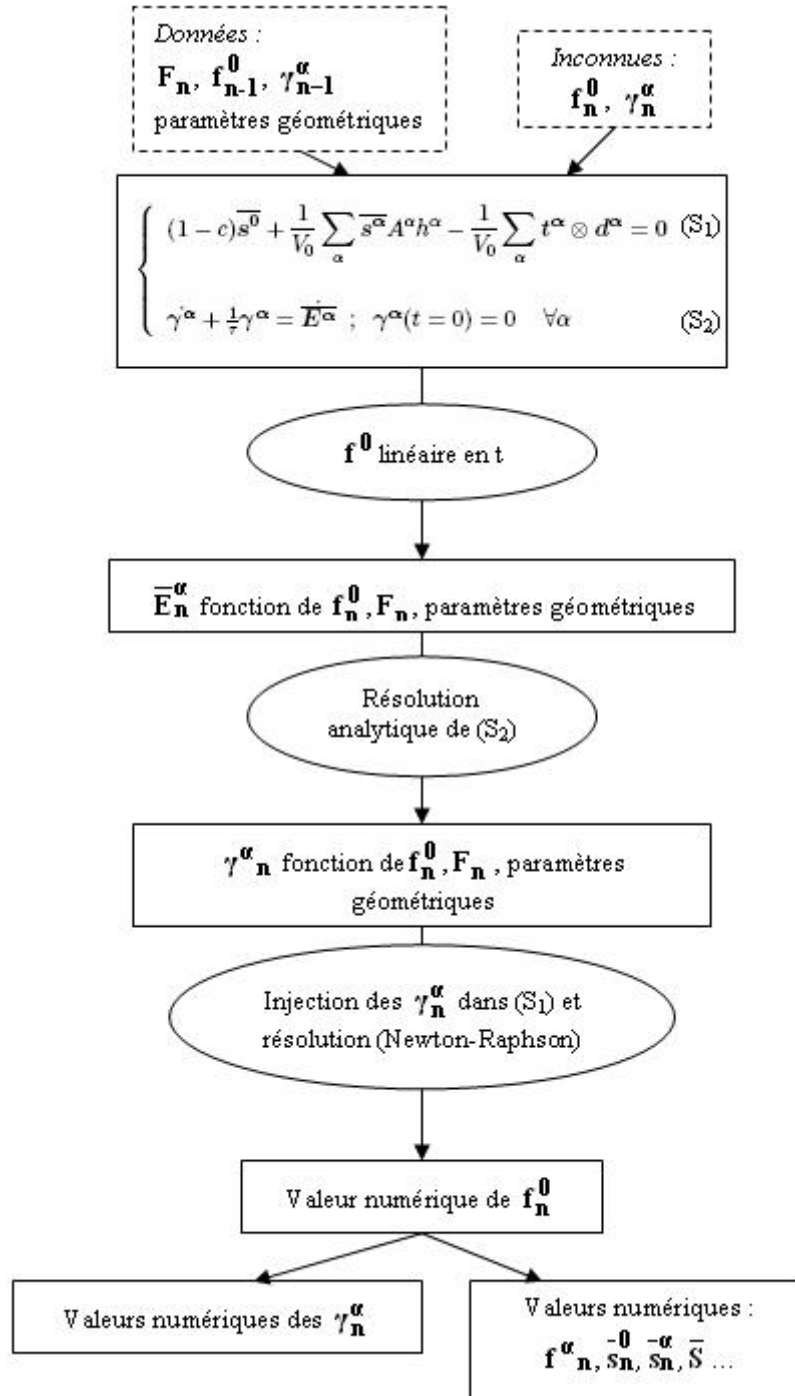


FIG. 2.7 – Algorithme de résolution du problème viscohyperélastique considéré ; illustration sur le pas de temps $[t_{n-1}, t_n]$

2.4.5 Mise en œuvre et résultats

L'algorithme de résolution que nous venons de présenter a été programmé à l'aide du logiciel Mathematica[®] et mis en œuvre pour la microstructure présentée au paragraphe 2.4.2, à matrice viscohyperélastique et à grains hyperélastiques décrits par les modèles présentés aux paragraphes 2.4.3.1 et 2.4.3.2. Les paramètres matériaux retenus sont les suivants : $C_{10} = C_{01} = 0.5\text{MPa}$, $K = 100\text{MPa}$ concernant la part réversible du comportement de la matrice. Pour ce qui est de la part visqueuse, $\tau = 50\text{s}$ et le tenseur $\mathbf{L}^{(v)}$ est supposé isotrope, défini par les deux « modules visqueux » suivants : $E^{(v)} = 50\text{MPa}$ et $\nu^{(v)} = 0.49$. Pour les grains, le contraste est pris égal à 10. La microstructure est soumise à un chargement de glissement simple défini par le gradient de transformation macroscopique suivant :

$$\mathbf{F}^{gliss} = \begin{pmatrix} 1 & \beta & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.16)$$

Le facteur de charge β varie linéairement dans le temps : $\beta = vt$ avec v vitesse de glissement. Deux simulations constituées d'une charge et d'une décharge pour β variant de 0 à 0.5 ont été lancées : la première avec $v = v_1 = 10^{-2}\text{s}^{-1}$, la seconde avec $v = v_2 = 5.10^{-3}\text{s}^{-1}$.

Les temps de calcul pour les deux simulations sont respectivement de 107,9 heures (soit 4 jours et demi) et de 220.7 heures (9 jours et 5 heures environ). Il convient de souligner ici que l'algorithme de résolution n'a pas été optimisé puisque l'objectif que l'on s'est fixé dans cette étude est uniquement de *prouver* la faisabilité de l'AM en viscohyperélasticité. Il conviendra naturellement de s'intéresser à cette question dès lors que l'on voudra implanter l'AM dans un code de calcul. Il faudra également recourir à un langage de programmation compilé (ce qui n'est pas le cas Mathematica[®]) pour que les calculs soient menés de manière plus efficace.

Une fois les calculs terminés, nous commençons par regarder l'erreur faite sur le gradient de transformation macroscopique lorsque nous l'approchons par la moyenne des gradients de transformation locaux sur le volume schématisé V_0 (cf remarque sur la compatibilité du volume au paragraphe 2.4.2). Sur la composante F_{12} , l'écart relatif $\frac{|F_{12}^{gliss} - \langle f_{12} \rangle_{V_0}|}{F_{12}^{gliss}}$ reste inférieur à 3%, excepté pour $\beta = 0.025$ lors de la décharge de la deuxième simulation où l'on atteint 6%. Sur les composantes diagonales de \mathbf{F} , il est de 0,01% au maximum. Les autres composantes de $\langle \mathbf{f} \rangle_{V_0}$ sont en 10^{-5} , sauf $\langle f_{21} \rangle_{V_0}$ qui est en 10^{-3} . Ainsi, même si la condition de compatibilité n'est pas exactement vérifiée sur le volume considéré, l'erreur faite en approchant \mathbf{F} par $\langle \mathbf{f} \rangle_{V_0}$ demeure acceptable.

Sur la figure 2.8 nous présentons les contraintes de Piola-Kirchhoff 1 macroscopiques Π_{12}

en fonction de β obtenues lors de ces deux simulations. Les courbes suivent des tendances conformes d'un point de vue qualitatif à ce que l'expérience prévoit : phénomène d'hystérésis et augmentation de la rigidité globale avec l'augmentation de la vitesse de sollicitation.

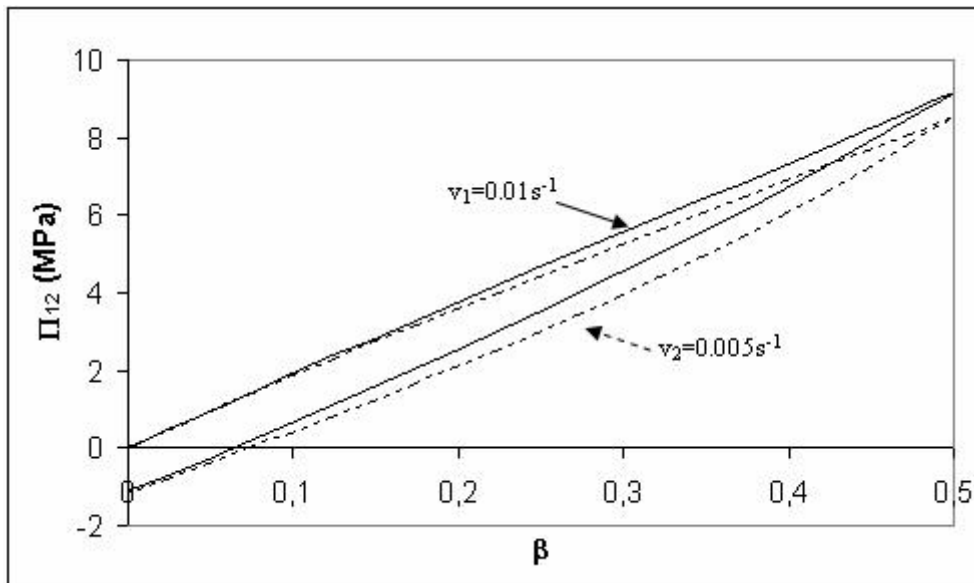


FIG. 2.8 – Réponse macroscopique selon l'AM pour un composite viscohyperélastique à grains polyédriques aléatoirement répartis soumis à des glissements simples (deux vitesses de sollicitations)

2.5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons tout d'abord rappelé les principales spécificités et étapes de l'approche morphologique.

Nous avons ensuite discuté des avantages et inconvénients théoriques qu'elle semble présenter non seulement vis-à-vis de l'application prévue, mais aussi vis-à-vis des grands enjeux de l'homogénéisation des milieux non linéaires.

Dans une troisième partie, nous avons illustré la capacité de l'approche morphologique à traiter le problème viscohyperélastique. Pour ce faire, nous avons considéré un volume aléatoire généré numériquement, à matrice viscohyperélastique et à grains polyédriques hyperélastiques. Nous avons soumis ce volume à des glissements simples à différentes vitesses et calculé la réponse homogénéisée estimée par l'AM. La présentation de l'algorithme développé à cet effet a permis d'insister sur le caractère *direct* de la résolution réalisée dans *l'espace-temps réel*. Les résultats obtenus semblent qualitativement corrects. Nous avons donc répondu au premier objectif que nous nous étions fixé : prouver que l'AM est un outil

théoriquement capable de traiter le problème de l'homogénéisation de milieux à constituants viscohyperélastiques.

Il est maintenant nécessaire d'évaluer *quantitativement* les performances et points d'amélioration de cette approche. Nous allons dans le chapitre qui suit faire un pas dans ce sens en comparant, sur une microstructure périodique simple pour limiter les temps de calcul et pour faciliter les analyses locales, les estimations fournies par l'approche morphologique à des résultats de référence calculés par éléments finis.

Chapitre 3

Evaluation de l'approche morphologique
sur un composite « modèle » à
géométrie simple

Sommaire

3.1	Introduction	73
3.2	Matériau de travail	74
3.2.1	Géométrie	74
3.2.2	Description du matériau dans le modèle EF	75
3.2.3	Description du matériau dans l'approche morphologique	76
3.3	Evaluation en hyperélasticité	77
3.3.1	Description de l'hyperélasticité des phases	77
3.3.2	Chargements	78
3.3.3	Principe d'analyse des résultats	80
3.3.4	Simulation d'une compression œdométrique	81
3.3.4.1	Confrontation des résultats macroscopiques	81
3.3.4.2	Confrontation des résultats locaux	82
3.3.5	Simulation d'un glissement simple	87
3.3.5.1	Confrontation des résultats macroscopiques	87
3.3.5.2	Confrontation des résultats locaux	88
3.4	Evaluation en viscohyperélasticité	96
3.4.1	Objectif	96
3.4.2	Comportements des phases	97
3.4.3	Simulations de compressions œdométriques	99
3.4.3.1	Chargement	99
3.4.3.2	Résolution dans l'AM	99
3.4.3.3	Confrontation des résultats EF et AM	99
3.5	Conclusion	104

3.1 Introduction

Dans le chapitre précédent, nous avons présenté l’approche morphologique et discuté des points forts et limites théoriques qu’elle semble présenter. L’objectif de ce chapitre est de procéder à une première évaluation *quantitative* des performances de cette approche, en hyperélasticité puis en viscohyperélasticité, sur un composite « modèle » à géométrie simple.

L’un des moyens de mener à bien cette évaluation serait de comparer à des courbes expérimentales les résultats donnés par l’AM. Cependant, en procédant de la sorte nous serions confrontés aux problèmes suivants :

- Les différentes sources d’erreur à l’origine des écarts entre réponses estimées par l’AM et courbes obtenues expérimentalement ne seraient pas dissociées. Ainsi, on ne pourrait pas mesurer les influences respectives de la schématisation géométrique (pas encore optimisée), de la schématisation cinématique, de la description et de l’identification des comportements mécaniques des phases (sans parler d’un endommagement éventuel, non pris en compte dans ces travaux).
- La détermination de la taille du VER du matériau non linéaire considéré, étape nécessairement lourde comme nous le verrons au chapitre 5, serait prématurée vis-à-vis de l’objectif (première évaluation) que nous nous fixons dans ce chapitre.
- Enfin, l’un des atouts théoriques de l’AM est sa capacité à fournir des estimations des champs locaux. Or, expérimentalement, il est très difficile, voire impossible aujourd’hui, d’effectuer des mesures locales en particulier *in situ* [IGM⁺07]. Une comparaison à l’expérience ne permettrait donc pas pour l’instant d’évaluer la qualité des estimations locales données par l’AM.

Dans le but d’appréhender une à une les différentes sources d’erreur possibles, nous commençons par comparer les estimations données par l’AM à des résultats de référence, calculés ici par éléments finis (EF). De nombreux auteurs se sont trouvés face à des problèmes similaires et ont choisi de procéder de la sorte : Michel et al. [MMS99], Inglis et al. [IGM⁺07], Rekik et al. [RABZ07] qui utilisent les EF, ou encore Moulinec et Suquet [MS04b], Idiart et al. [IMP06], Lahellec et Suquet [LS07] qui prennent pour référence la solution calculée par la méthode des transformées de Fourier rapides ([MS98, MS03b]). Cette dernière technique est plus performante que les EF (temps de calculs et lourdeur moindres) puisqu’elle ne nécessite pas de maillage mais n’a pas été développée dans le contexte des grandes déformations.

La comparaison à des résultats numériques est donc aujourd’hui un moyen classique et reconnu intervenant dans l’évaluation d’un modèle d’homogénéisation, *bien qu’elle ne constitue pas un outil suffisant pour valider une approche*. En utilisant dans les deux méthodes

(schéma d'homogénéisation à évaluer et technique de calcul de la solution de référence) les mêmes lois de comportement, on annihile une source d'erreur : celle liée à la description du comportement mécanique des phases. Dans notre cas, il est également possible de s'affranchir des effets de la schématisation géométrique en choisissant comme socle de travail une microstructure satisfaisant d'emblée les critères requis par l'AM (grains polyédriques, parallélisme des faces en regard). Ainsi, seule la description cinématique est évaluée.

La première partie de ce chapitre s'attache à présenter le matériau retenu et ses représentations dans les deux modélisations (EF et AM). La seconde partie concerne l'évaluation des performances de l'AM dans un cadre hyperélastique. Nous commençons par présenter les lois de comportement des deux phases (grain, matrice). Nous détaillons ensuite la mise en œuvre des deux approches (notamment en ce qui concerne l'application du chargement), ainsi que la démarche adoptée pour analyser les résultats. Les estimations globales et locales obtenues par les deux approches sont confrontées pour deux types de sollicitation : une compression oedométrique et un glissement simple (voir aussi [TNMDF07]). Enfin, la dernière partie présente une évaluation de l'AM dans un cadre viscohyperélastique. Après avoir présenté la loi de comportement affectée à la matrice du matériau « modèle », nous comparons aux deux échelles les estimations de l'AM aux résultats obtenus par calcul EF.

3.2 Matériau de travail

3.2.1 Géométrie

Dans la continuité des travaux de Guiot [GUI05], nous considérons ici un matériau périodique « modèle » comportant des grains cubiques de côté $T_g = 0.2\text{mm}$ régulièrement répartis dans une matrice (distance intergranulaire = 0.02mm ; voir figure 3.1). La concentration volumique de matrice est de 25%.

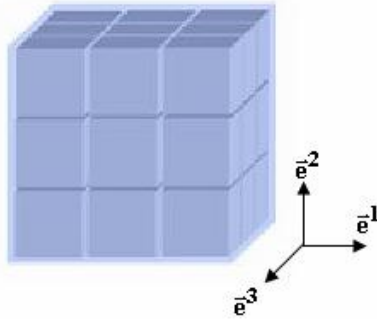


FIG. 3.1 – Matériau « modèle » périodique pour l'évaluation préliminaire de l'AM

Comme annoncé dans l'introduction, une telle microstructure permet de ne tester que les hypothèses cinématiques formulées dans l'AM. En effet, les hypothèses de la schématisation géométrique sont automatiquement vérifiées : grains polyédriques (cubiques), planéité et parallélisme des interfaces en regard, faibles épaisseurs des couches. De plus, le choix d'un matériau périodique nous permet de travailler sur une cellule de base, ce qui rend abordables des calculs éléments finis tridimensionnels fortement non linéaires (la place mémoire et les temps de calcul conséquents sont considérablement réduits par rapport à ceux que l'on aurait en travaillant sur le VER d'une microstructure aléatoire). Pour finir, la simplicité de la microstructure proposée facilite l'analyse des résultats à l'échelle locale, ce qui est un aspect important pour une première évaluation.

On notera pour terminer qu'en toute rigueur on ne devrait pas travailler sur une cellule de base. En effet, les études menées sur les milieux périodiques hyperélastiques ont conduit au constat suivant : la non convexité des énergies de déformation peut mener à des instabilités microscopiques qui réduisent l'énergie macroscopique (voir [MUL87] cité dans [LMM04, LPPC06]). Cependant, de même que ces derniers auteurs, nous faisons l'hypothèse que de telles instabilités n'apparaissent pas pour les niveaux de déformation considérés afin de pouvoir travailler sur une cellule de base.

3.2.2 Description du matériau dans le modèle EF

La cellule de base considérée pour la modélisation EF est représentée sur la figure 3.2 (huitième). Elle est constituée d'un grain entouré d'une fine couche uniforme de matrice, d'épaisseur égale à la demi distance intergranulaire (0.01mm). Le grain est maillé avec 1000 mailles identiques cubiques (C3D8H dans Abaqus[®]) et la matrice avec 21184 mailles du même type. Cette dernière a été maillée plus finement puisqu'elle est beaucoup plus souple que le grain. C'est donc elle qui va accommoder la majeure partie de la déformation et c'est

probablement dans cette zone que l'hétérogénéité des champs sera la plus marquée.

Remarques : Les deux phases ont été collées l'une à l'autre d'une part pour traduire l'adhésion parfaite supposée dans cette étude entre les deux phases, et d'autre part pour que la différence de maillage ne pose pas de problème. En outre, des calculs ont également été lancés avec un maillage plus fin (dans le grain comme dans la matrice). Les résultats obtenus se sont révélés identiques à ceux que nous allons présenter, voir les détails en annexe B.

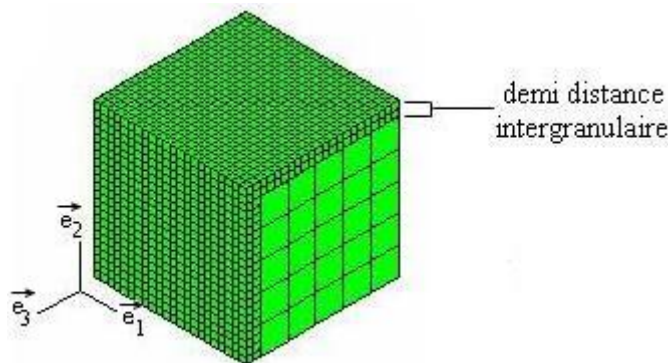


FIG. 3.2 – Huitième de la cellule de base de la modélisation EF

3.2.3 Description du matériau dans l'approche morphologique

Concernant l'AM, il faut définir le volume V_0 du matériau sur lequel sera ultérieurement résolue l'équation (2.5) et identifier les paramètres morphologiques caractéristiques des couches définis au paragraphe 2.2.1. Compte tenu de la périodicité de la microstructure, il est suffisant de ne considérer qu'un grain (de côté T_g) assorti de trois couches : la « couche 1 » de vecteur normal $\vec{n}^1 = \vec{e}^1$, la « couche 2 » de vecteur normal $\vec{n}^2 = \vec{e}^2$, la « couche 3 » de vecteur normal $\vec{n}^3 = \vec{e}^3$.

Les couches ont naturellement :

- La même épaisseur $h = 0.02\text{mm}$ (distance intergranulaire).
- La même norme de vecteur centroïde : $\|\vec{d}\| = d = h + T_g = 0.22\text{mm}$. Les orientations sont en revanche différentes : \vec{d}^1 est colinéaire à \vec{e}^1 , \vec{d}^2 à \vec{e}^2 et \vec{d}^3 à \vec{e}^3 .
- La même aire projetée A .

L'aire projetée, définissant le volume Ah de chaque couche, peut dans ce cas précis être calculée de manière à satisfaire exactement la condition de compatibilité (2.3), c'est-à-dire de manière à satisfaire la compatibilité entre mouvements local et global au sens de l'équation (2.2) présentée au chapitre 2. En effet, pour $I \neq J$, on a bien

$$\frac{1}{V_0} \sum_{\alpha=1}^3 d_I^\alpha n_J^\alpha A^\alpha = 0$$

par les orientations des vecteurs \vec{n}^α et \vec{d}^α . Pour $I = J$, on obtient la condition à satisfaire par A : $\frac{1}{V_0}dA = 1$ avec $V_0 = T_g^3 + 3Ah$. Après calcul, il vient $A = 0.05\text{mm}^2$.

On peut remarquer que A est supérieure à l'aire de facette des grains ($T_g^2 = 0.04\text{mm}^2$). Par conséquent, le volume Ah d'une couche est plus élevé que celui de la zone de matrice strictement confinée entre les facettes de deux grains en regard. Ceci génère des zones de recouvrement (qualifiées de « zones médianes » dans la suite) au niveau des arêtes et coins du grain considéré (voir zone encerclée sur la figure 2.2).

Soulignons que le volume représentatif ainsi associé à l'AM ne correspond pas à une cellule de base classique (la géométrie « réelle » ne se retrouve pas exactement par pavage de l'espace avec une telle cellule). La périodicité du milieu est ici prise en compte au travers des paramètres morphologiques définissant les couches. Le volume V_0 peut être perçu comme un motif élémentaire équivalent propre à l'approche de type Christoffersen et suffisant pour mettre en œuvre l'AM sur le matériau périodique considéré.

On notera l'amélioration par rapport aux précédents travaux de Guiot ([GUI05, GND06]). En effet, la recherche du VER associé à l'approche pour le composite étudié de même que l'identification des paramètres caractéristiques des couches ont été largement optimisées.

3.3 Evaluation en hyperélasticité

3.3.1 Description de l'hyperélasticité des phases

Dans cette section, les deux phases (grain et matrice) sont hyperélastiques. Pour modéliser le comportement de la matrice, on utilise la même loi que celle présentée dans le chapitre 2 (voir paragraphe 2.4.3.1), à savoir la loi de Mooney-Rivlin compressible suivante disponible dans Abaqus[®] :

$$w^{matrice} = C_{10}(\bar{I}_1 - 3) + C_{01}(\bar{I}_2 - 3) + \frac{K}{2}(J - 1)^2 \quad (3.1)$$

avec :

C_{10}, C_{01} : coefficients de Mooney-Rivlin

K : module de compressibilité

$\bar{I}_1 = I_1 J^{-2/3}, \bar{I}_2 = I_2 J^{-4/3}$: invariants modifiés (les invariants classiques étant donnés par :

$I_1 = \text{tr}(\mathbf{C}), I_2 = \frac{1}{2}((\text{tr}\mathbf{C})^2 - \text{tr}\mathbf{C}^2)$ et $I_3 = \det\mathbf{C} = J^2$)

De même que précédemment, le comportement du grain est relié à celui de la matrice par l'intermédiaire d'un contraste :

$$w^{grain} = w^{matrice} \times \text{contraste} \quad (3.2)$$

Pour les simulations que nous allons présenter dans cette partie, nous avons retenu les modules suivants : $C_{10} = C_{01} = 0.5\text{MPa}$ et $K = 100\text{MPa}$ pour la matrice. Le contraste entre grain et matrice est égal à 10.

Des valeurs arbitraires pour les modules C_{10} et C_{01} ont été prises. Elles mènent néanmoins à un module de cisaillement initial de $\mu = 2(C_{10} + C_{01}) = 2\text{MPa}$, ce qui est un ordre de grandeur satisfaisant vis-à-vis des liants utilisés dans la composition des composites énergétiques. Le choix $K = 100\text{MPa}$ conduit à un coefficient de Poisson initial de 0.49 et nous permet ainsi d'envisager la simulation de chargements compressibles.

Il convient de discuter ici d'un problème important concernant les matériaux hyperélastiques : la stabilité matérielle de l'énergie de déformation. Il est en effet très difficile dans le cadre des grandes déformations d'assurer l'existence et l'unicité d'une solution à un problème hyperélastique. Un premier débat concerne tout d'abord l'élaboration de conditions *physiquement motivées* portant sur l'énergie libre de déformation pour assurer l'admissibilité thermodynamique d'un modèle. La diversité des conditions proposées illustre bien la complexité du problème (voir l'introduction de l'article d'Hartmann et Neff pour un listing [HN03] ou le premier chapitre de la thèse de Lejeunes [LEJ06]). Ensuite, ces conditions à elles seules n'assurent pas que le problème de minimisation que l'on veut résoudre est bien posé i.e. qu'il existe une solution unique. Ici, ce sont des considérations *mathématiques* qui introduisent d'autres conditions sur l'énergie libre. On peut citer par exemple la quasi-convexité [MOR52], condition mathématique très difficile à exploiter, ou encore la polyconvexité [BAL77], condition plus maniable assurant l'existence mais pas l'unicité d'une solution.

Hartmann et Neff montrent que la loi hyperélastique que nous avons retenue n'est malheureusement pas polyconvexe à cause du terme en $\overline{I_2}$ [HN03]. Cependant, si la polyconvexité d'un potentiel nous permet de conclure sur l'existence d'au moins une solution au problème, la non-polyconvexité d'un potentiel ne permet pas pour autant de le rejeter. Nous avons donc conservé le potentiel présenté et nous nous sommes assurés de sa stabilité matérielle au sens de Drucker pour le jeu de paramètres retenu à l'aide du module proposé par Abaqus®. Ce dernier vérifie que l'inégalité de Drucker est bien satisfaite, i.e. que pour tout incrément de déformation logarithmique $d\epsilon$, l'incrément de contrainte de Cauchy conséquent $d\sigma$ est tel que $d\sigma : d\epsilon > 0$.

3.3.2 Chargements

Le composite étudié est soumis tour à tour à une compression oedométrique et à un glissement simple dans le plan (\vec{e}^1, \vec{e}^2) , respectivement définis par les gradients de trans-

formation macroscopiques suivants :

$$\mathbf{F}^{comp} = \begin{pmatrix} \lambda & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.3)$$

$$\mathbf{F}^{gliss} = \begin{pmatrix} 1 & \beta & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.4)$$

Comme mentionné au chapitre 1 dans le cadre de l'élasticité HPP (voir paragraphe 1.3.4), tout chargement macroscopique sur une structure hétérogène « homogénéisable » résulte en un chargement « en moyenne » sur tout VER. Ainsi, l'application d'un gradient de transformation macroscopique \mathbf{F} à une structure entière S constituée d'un grand nombre de cellules de base, résulte en un état de chargement « moyen » \mathbf{F} sur une cellule de base de volume V_{cell} située dans la zone utile (i.e. loin des zones d'application des charges), c'est-à-dire que l'on a :

$$\langle \mathbf{f} \rangle_{V_{cell}} = \mathbf{F} \quad (3.5)$$

En ce qui concerne la modélisation EF, il est habituel de remplacer cette condition de moyenne par des conditions aux limites en déplacement sur le contour de V_{cell} : $\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{H} \cdot \mathbf{x}$, avec $\mathbf{H} = \mathbf{F} - \mathbf{I}$, \mathbf{I} étant le tenseur identité d'ordre 2. Elles assurent (3.5) [ZAO01]. Le champ local $\mathbf{h}(\mathbf{x})$ est alors décomposable en la somme d'une partie moyenne \mathbf{H} (gradient de déplacement dans le milieu s'il était homogène) et d'une partie fluctuante $\mathbf{h}'(\mathbf{x})$ tenant compte de l'hétérogénéité réelle du milieu et telle que $\langle \mathbf{h}'(\mathbf{x}) \rangle_{V_{cell}} = \mathbf{0}$. \mathbf{h}' dérive d'un champ de déplacement fluctuant \mathbf{u}' périodique de par la périodicité du milieu. Ainsi on a :

$$\forall \mathbf{x} \in V_{cell}, \quad \mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{H} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{u}'(\mathbf{x}), \quad \mathbf{h}(\mathbf{u}(\mathbf{x})) = \mathbf{H} + \mathbf{h}'(\mathbf{u}'(\mathbf{x})), \quad \mathbf{u}' \text{ périodique} \quad (3.6)$$

Pour deux points A et B de la cellule de base tels que $\mathbf{x}^B = \mathbf{x}^A + \mathbf{x}^P$ (\mathbf{x}^P vecteur de périodicité du milieu), on a donc :

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}^A) - \mathbf{u}(\mathbf{x}^B) = \mathbf{H} \cdot (\mathbf{x}^A - \mathbf{x}^B) \quad (3.7)$$

Ce sont ces relations que l'on exploite dans la modélisation EF pour signifier au calcul que le milieu est périodique et que le chargement se fait « en moyenne » sur la cellule. Il faut donc expliciter les relations (3.7) pour les points situés au bord de la cellule de base. Ceci représente un travail important à deux niveaux. D'une part, cela implique une série de contraintes à respecter par le maillage de la cellule (voir annexe C pour les détails et la façon dont nous avons procédé). D'autre part, une fois le modèle bien défini, il faut réécrire dans le fichier de calcul les nouvelles équations associées à chaque nouveau chargement.

Pour l’approche morphologique, on rappelle que la résolution pratique du problème de localisation-homogénéisation ne nécessite pas d’appliquer de conditions aux limites du volume schématisé, correspondant ici à un « motif » constitué d’un grain assorti de 3 couches (voir paragraphe 3.2.3). La donnée de \mathbf{F} en entrée de l’équation (2.5) est suffisante pour signifier le chargement imposé. Notons par ailleurs que la description cinématique permet naturellement de rendre compte de la périodicité de la solution via les seules données morphologiques caractéristiques des couches. Pour s’en convaincre, il suffit de considérer un assemblage de plusieurs « motifs » : \mathbf{f}^0 sera identique pour tous les grains, et par suite \mathbf{f}^α , donné par (2.1), sera le même pour toutes les couches de même catégorie i.e. possédant la même normale (à savoir soit $\vec{\mathbf{e}}^1$, soit $\vec{\mathbf{e}}^2$, soit $\vec{\mathbf{e}}^3$, cf. paragraphe 3.2.3).

3.3.3 Principe d’analyse des résultats

Les estimations données par l’AM vont être confrontées aux résultats EF à deux niveaux : macroscopique et microscopique.

Concernant les résultats macroscopiques, le calcul EF fournit les différentes quantités (gradient de transformation \mathbf{f} , tenseur des contraintes de Piola-Kirchhoff 1 $\boldsymbol{\pi}$...) aux points d’intégration de chaque élément du modèle. Les résultats macroscopiques sont donc calculés par moyenne de ces grandeurs additives sur tous les éléments de la cellule de base.

Dans l’AM, comme nous l’avons exposé au paragraphe 2.2.4, la connaissance du gradient de transformation dans les grains \mathbf{f}^0 permet d’accéder aux quantités locales dans le grain et dans chaque couche. Les quantités macroscopiques correspondantes, lorsqu’elles sont additives, sont calculées par moyenne sur le grain et les couches de leurs homologues microscopiques (exemple : voir équation (2.4)₁ pour le calcul de la contrainte nominale macroscopique).

Concernant les estimations locales, on rappelle que l’AM suppose que le gradient de transformation est homogène par morceaux dans le volume schématisé. Il est en effet supposé homogène dans le grain et homogène dans chacune des trois couches définies au paragraphe 3.2.3 qui, rappelons-le, empiètent sur les zones dites « intergranulaires » strictement comprises entre les facettes des grains qu’elles séparent. La figure 3.3 fournit une illustration 2D des zones intergranulaires (ZI) précitées dans le modèle EF : la région noire correspond à la ZI 1 (normale à $\vec{\mathbf{e}}^1$) et la région hachurée à la ZI 2 (normale à $\vec{\mathbf{e}}^2$).

On regarde dans un premier temps la validité qualitative de l’hypothèse d’homogénéité par morceaux du gradient de transformation local en observant des cartographies EF pour cibler la localisation et l’étendue de l’hétérogénéité réelle.

D’autre part, il est clair que les champs dans les zones de matrice non comprises entre les facettes des grains (i.e. les zones médianes représentées par des carrés blancs sur la figure 3.3) seront mal estimés par l’AM puisque cette dernière néglige les perturbations induites dans ces zones (voir paragraphe 2.2.2). Aussi, d’un point de vue quantitatif, nous

choisissons de comparer les résultats locaux de l'AM à des résultats « locaux moyens » calculés sur le modèle EF. Plus précisément, les champs homogènes estimés par l'AM dans la « couche 1 » sont comparés aux résultats EF « moyens » sur la « zone intergranulaire 1 » (en noire sur la figure 3.3), ceux de la « couche 2 » aux résultats EF dans la « zone intergranulaire 2 » hachurée sur la figure 3.3, etc...

De plus, afin d'obtenir une indication sur l'influence éventuelle, sur les résultats locaux moyens EF, des effets dans les « zones médianes » (carrés blancs sur la figure 3.3) -*mal décrits dans l'AM*- on relève également des résultats « ponctuels ». Dans le grain et dans chaque zone intergranulaire du modèle EF, on prélève les résultats sur un élément situé loin des zones médianes (voir ronds rouges sur la figure 3.3).

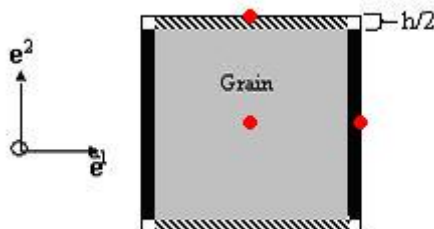


FIG. 3.3 – Illustration des zones intergranulaires du modèle EF utilisées pour le calcul de « champs locaux moyens » et des points utilisés pour étudier l'influence des zones médianes

3.3.4 Simulation d'une compression œdométrique

Le chargement (3.3) est appliqué au matériau périodique considéré. Le facteur de charge λ varie linéairement de 1 à 0.3. La résolution de l'équation (2.5) en hyperélasticité est réalisée grâce à l'algorithme de Newton-Raphson déjà implanté dans le logiciel Mathematica[®]. Les temps CPU sur station SG sont de 3400s pour la méthode des EF et de 132s pour l'AM.

3.3.4.1 Confrontation des résultats macroscopiques

On a porté sur la figure 3.4 les évolutions des composantes non nulles des tenseurs des contraintes macroscopiques de Piola-Kirchhoff 1 Π donnés par les deux approches (AM et EF) en fonction du facteur de charge λ . Compte-tenu des symétries de la cellule de base et du chargement appliqué, on a $\Pi_{22} = \Pi_{33}$. Les estimations données par l'AM sont très satisfaisantes vis-à-vis de la solution EF (écarts relatifs maximaux de l'ordre de 4.5%).

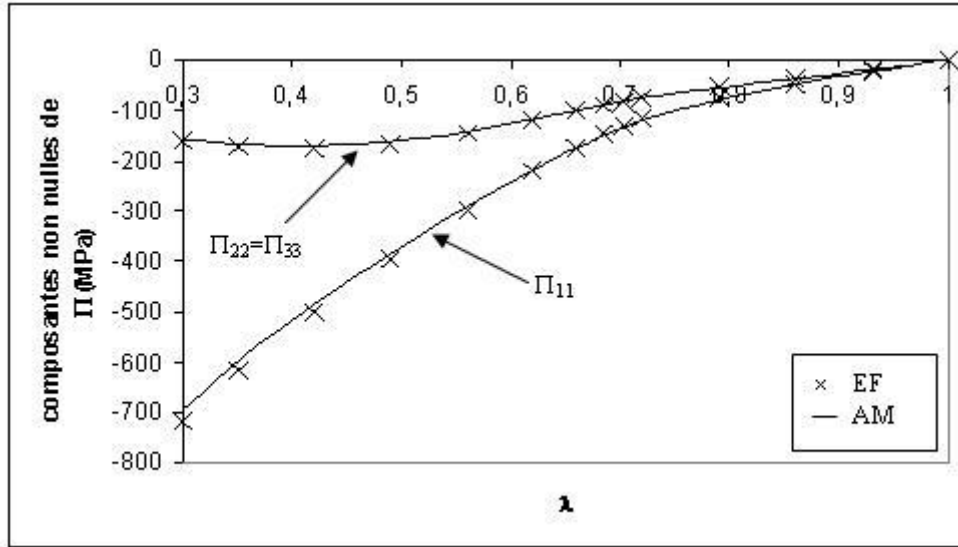


FIG. 3.4 – Comparaison des composantes non nulles du tenseur des contraintes de Piola-Kirchhoff 1 macroscopiques $\mathbf{\Pi}$ estimées par les deux approches (AM et EF) lors de la simulation d’une compression œdométrique

3.3.4.2 Confrontation des résultats locaux

Tout d’abord il convient de vérifier que l’hypothèse d’homogénéité par morceaux du gradient de transformation formulée dans l’AM est acceptable. Comme l’illustrent les cartographies 3.5 et 3.6, on constate que les hétérogénéités dans la matrice sont localisées près des arêtes du grain (i.e. aux abords des zones médianes ZM et dans les ZM elles-même). Ainsi, le gradient de transformation local est qualitativement quasiment homogène dans chacune des trois zones intergranulaires du modèle EF. Dans le grain, l’hypothèse « \mathbf{f}^0 homogène » est également acceptable d’un point de vue qualitatif (voir illustration pour $\lambda = 0.86$ sur la figure 3.6, coupe réalisée au plan médian de la cellule, orthogonal à \vec{e}^3). Ces remarques sont valables tout au long du chargement, également pour la composante f_{33} non représentée (les autres composantes de \mathbf{f} sont nulles).

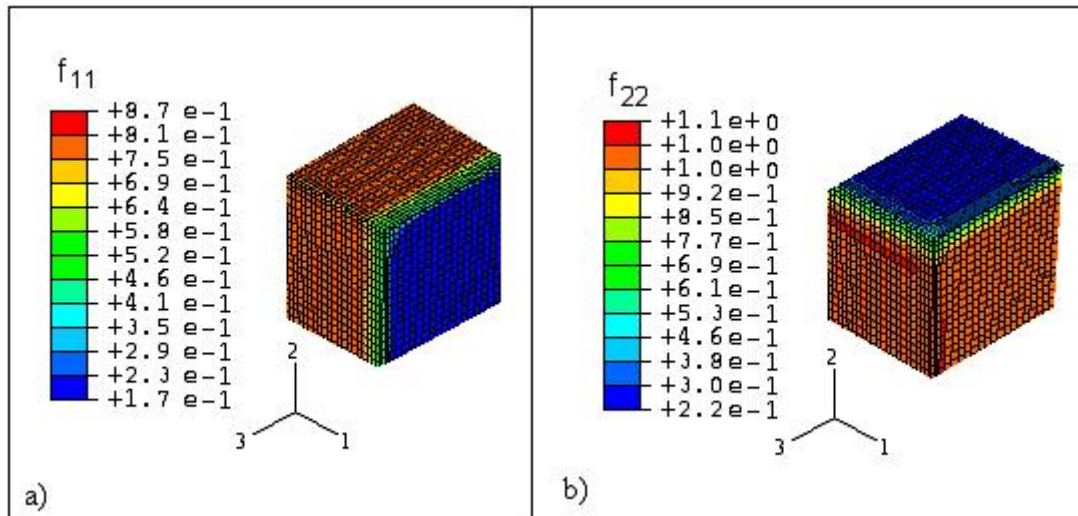


FIG. 3.5 – EF : composantes f_{11} et f_{22} du gradient de transformation local sur le huitième de la cellule de base (vue 3D) dans la simulation d’une compression œdométrique ($\lambda = 0.72$) : a) f_{11} ; b) f_{22}

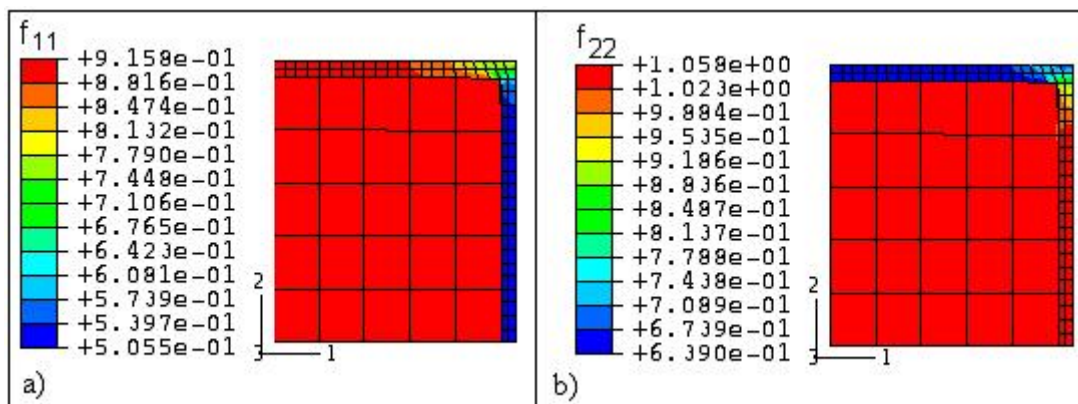


FIG. 3.6 – EF : composantes f_{11} et f_{22} du gradient de transformation local sur le huitième de la cellule de base (vue 2D) dans la simulation d’une compression œdométrique ($\lambda = 0.86$) : a) f_{11} ; b) f_{22}

Sur la figure 3.7, on a tracé les évolutions de f_{11} et f_{22} (valeurs EF moyennes et valeurs EF ponctuelles) en fonction de λ . La superposition des deux séries de courbes montre que l’hétérogénéité observée près des zones médianes est de faible intensité puisqu’elle n’éloigne pas significativement la valeur moyenne de la valeur ponctuelle relevée loin des ZM (écart relatif inférieur à 5.5%).

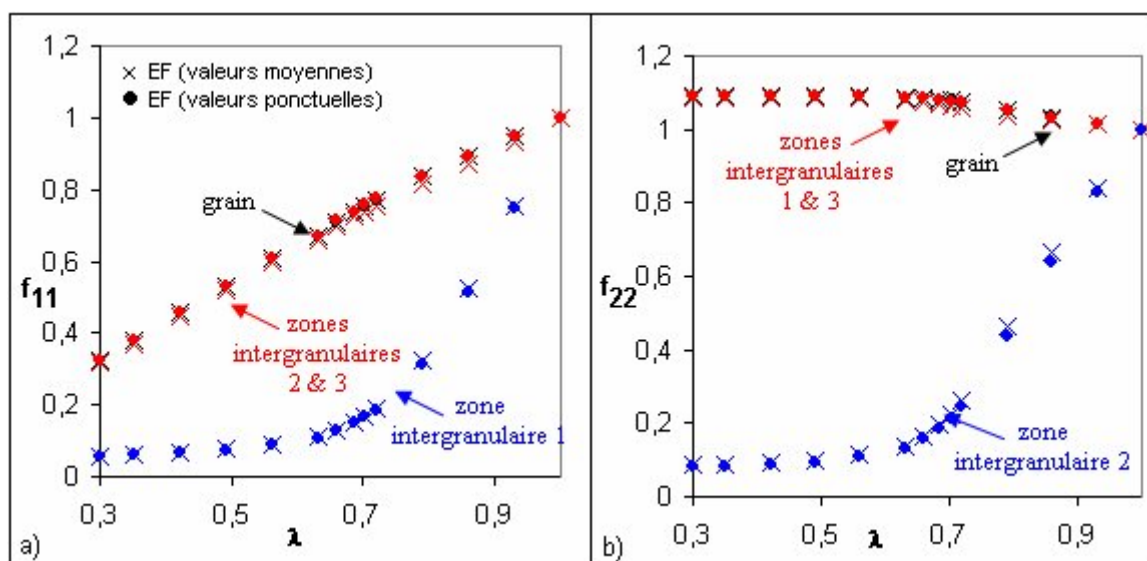


FIG. 3.7 – EF : f_{11} et f_{22} moyens et f_{11} et f_{22} ponctuels sur les différentes régions locales (grain et zones intergranulaires) dans la simulation d’une compression oedométrique : a) f_{11} ; b) f_{22}

On souhaite maintenant regarder la qualité quantitative des estimations locales fournies par l’AM. Pour ce faire, on confronte les dilatations principales locales moyennes dans les directions 1 et 2 fournies par les deux approches (croix pour les EF, lignes pour l’AM sur la figure 3.8). Tout au long du chargement, on constate un très bon accord entre les différentes courbes : un écart relatif de 14% est ponctuellement atteint (pour f_{11} dans ZI 1 (respectivement f_{22} dans ZI 2) lorsque $0.65 < \lambda < 0.7$ alors qu’ailleurs les écarts sont inférieurs à 3%.

Les dilatations principales locales moyennes dans la direction 3 ne sont pas détaillées ici puisqu’elles n’apportent pas d’indication supplémentaire. En effet, les conclusions dans la direction 3 sont identiques à celles dans la direction 2 sauf que les rôles des zones intergranulaires 2 et 3 sont inversés.

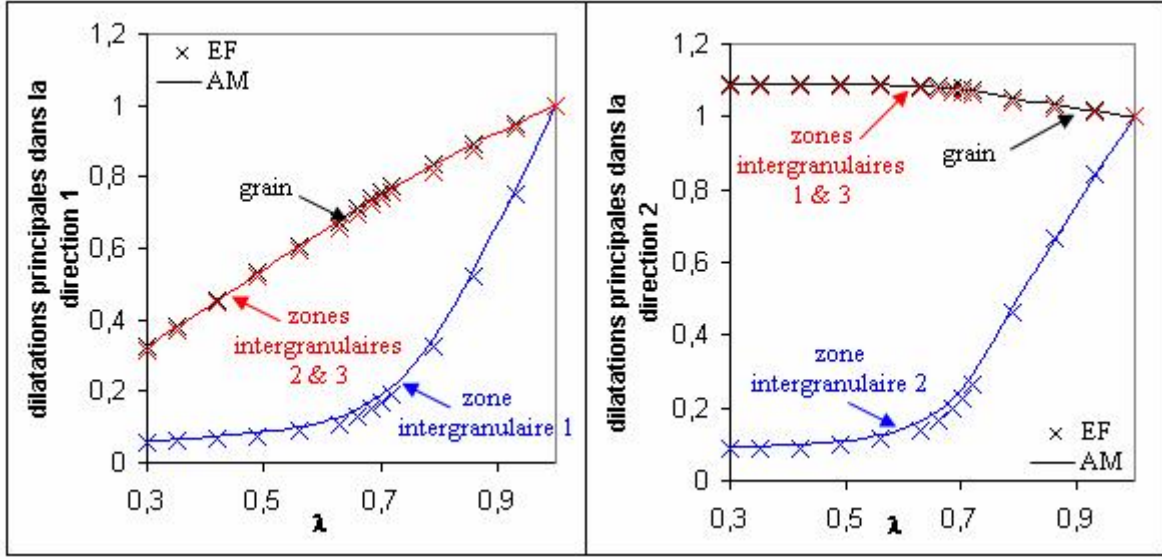


FIG. 3.8 – Dilatations principales locales moyennes (AM et EF) lors de la simulation d’une compression œdométrique : a) dans la direction 1 ; b) dans la direction 2

On peut noter que dans l’approche morphologique, seule la composante kk du gradient de transformation dans la couche k , f_{kK}^k , peut différer de f_{kK}^0 . En effet, on rappelle que le gradient de transformation dans la couche α est donné par :

$$f_{iJ}^\alpha = f_{iJ}^0 + (F - f^0)_{iK} \frac{d_K^\alpha n_J^\alpha}{h^\alpha} \quad (3.8)$$

Pour la microstructure retenue, la composante f_{iJ}^k dans la couche k devient :

$$f_{iJ}^k = f_{iJ}^0 + (F - f^0)_{iL} \frac{d}{h} e_L^k e_J^k \quad (3.9)$$

Le produit $e_L^k e_J^k$ est non nul dans la couche k seulement si $L = J = k$. Ainsi, les autres composantes du gradient de transformation dans la couche k sont confondues avec celles du gradient de transformation dans le grain. Ceci est également observé dans le modèle EF (contrairement à ce qu’attendaient Guiot et al [GND06] avant que la confrontation ne soit faite) : sur les cartographies précédentes (figure 3.6) on a $f_{11}^2 = f_{11}^0$ dans la zone intergranulaire 2 et $f_{22}^1 = f_{22}^0$ dans la zone intergranulaire 1, sauf au voisinage immédiat des ZM (voir aussi la quasi superposition des croix rouges et des croix noires sur la figure 3.8 ; cette petite différence est d’ailleurs due à la très faible influence de l’hétérogénéité dans les ZM sur les valeurs moyennes des grandeurs dans les ZI).

Les contraintes locales moyennes dans le grain et dans chacune des ZI sont elles aussi relativement bien estimées par l’AM (voir figure 3.9). Un écart relatif maximum de 18%

est atteint en fin de chargement pour π_{11} (respectivement π_{22}) dans la zone intergranulaire 1 (respectivement 2). Dans le grain, les écarts relatifs sont au maximum de 6%, ce qui explique la bonne corrélation macroscopique précédemment observée (figure 3.4). En effet, comme l'illustre la figure 3.10 pour la composante 11 du tenseur des contraintes $\mathbf{\Pi}$, c'est le grain qui contribue le plus à la contrainte homogénéisée.

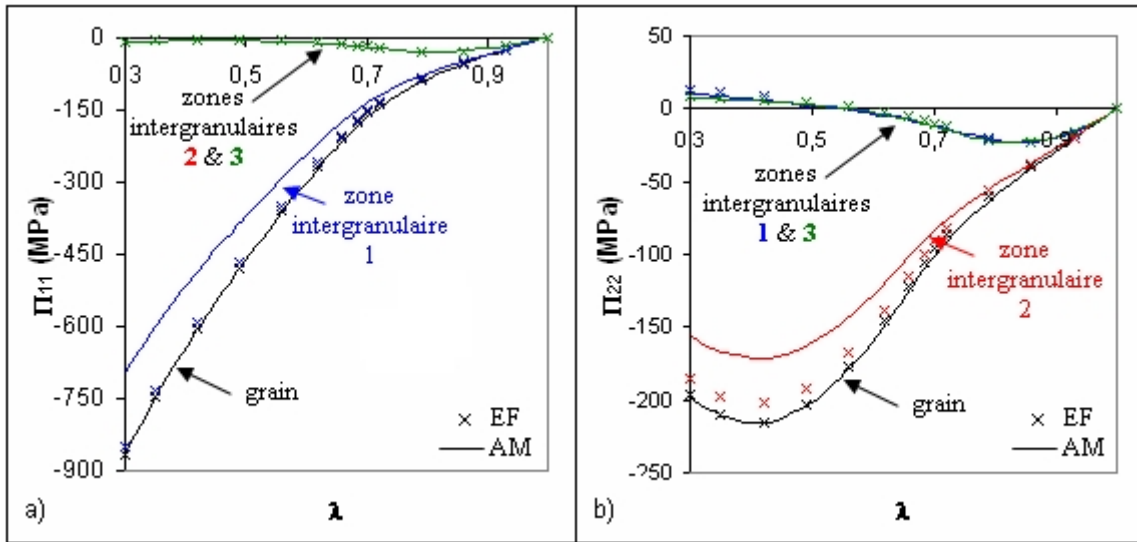


FIG. 3.9 – Contraintes π locales moyennes (AM et EF) lors de la simulation d'une compression œdométrique : a) π_{11} ; b) π_{22}

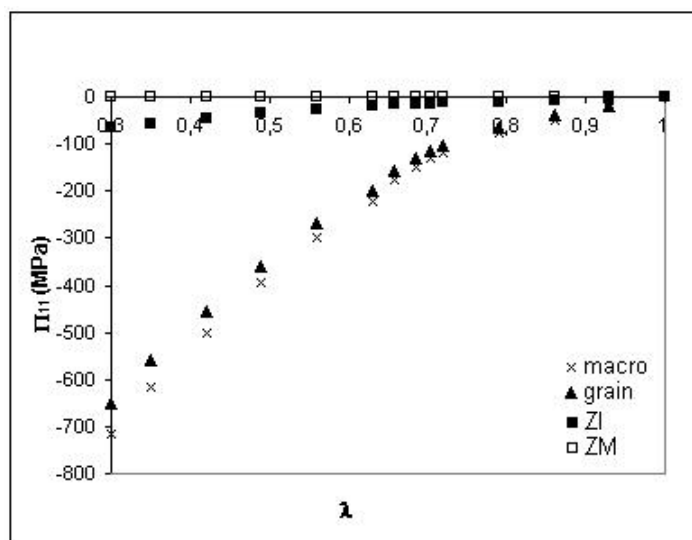


FIG. 3.10 – EF : contributions respectives du grain, des zones intergranulaires (ZI) et des zones médianes (ZM) dans la containte Π_{11} homogénéisée

Dans ce cas précis, l'AM fournit donc non seulement une bonne approximation de la réponse macroscopique du composite (par comparaison aux résultats EF) mais aussi de bonnes estimations locales de ce qu'il se passe dans le grain et dans les trois zones intergranulaires. Enfin, le fait que les effets dans les zones médianes ne soient pas correctement décrits dans l'AM ne semble pas -pour la microstructure et le chargement envisagés dans cette section- affecter la qualité des estimations locales et globales.

3.3.5 Simulation d'un glissement simple

Le chargement (3.4) est appliqué au matériau périodique considéré. Le facteur de charge β varie linéairement de 0 à 0.6.

3.3.5.1 Confrontation des résultats macroscopiques

Commençons par signaler que dans le modèle EF lorsque le gradient de transformation macroscopique est calculé par moyenne des gradients de transformation locaux, la composante $\langle f_{21} \rangle_{cellule}$ est de l'ordre de 10^{-4} alors que les autres composantes sensées être nulles sont en 10^{-12} . Ceci illustre et prolonge une remarque précédemment évoquée : l'évaluation d'une approche par comparaison à des calculs de référence (ici les EF) n'est pas un outil optimal, ni même suffisant dans la mesure où ces derniers peuvent être d'une validité très relative. Dans ce qui suit, nous comparons les résultats de l'AM aux résultats EF en gardant en mémoire cette remarque.

On a porté sur la figure 3.11 les évolutions des composantes 12 et 21 des tenseurs des contraintes macroscopiques de Piola-Kirchhoff 1 Π donnés par les deux approches (AM et EF) en fonction du facteur de charge β . Concernant Π_{12} on observe un relativement bon accord entre les résultats donnés par les deux approches tout au long du chargement (écart relatif maximal de 7.7% atteint ponctuellement pour $\beta = 0.32$). En revanche, la composante Π_{21} estimée par l'AM diverge rapidement : dès $\beta = 0.2$, l'écart relatif avec la solution EF est déjà de 19%. On souligne d'autre part l'allure peu satisfaisante de cette dernière (saturation).

On a également placé sur cette figure les déformées de la cellule de base du modèle EF pour différentes valeurs de β . Ceci illustre la sévérité du chargement vis-à-vis de la microstructure considérée : voir les zoom montrant l'écrasement de certaines mailles sur la figure 3.11. Au delà de $\beta = 0.6$, la validité du calcul EF peut ainsi être mise en doute (déformation conséquente de certaines mailles), ce qui suggère encore une fois que les résultats fournis par une méthode numérique doivent toujours être considérés avec précaution.

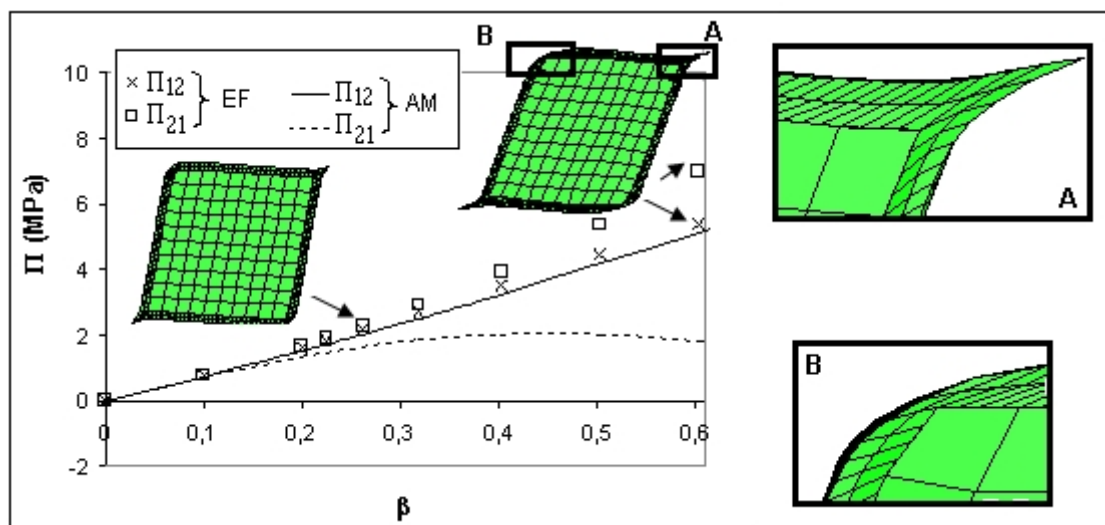


FIG. 3.11 – Comparaison des contraintes macroscopiques Π_{12} et Π_{21} estimées par les deux approches (EF et AM) et déformées de la cellule EF lors de la simulation d'un glissement simple

3.3.5.2 Confrontation des résultats locaux

Comme précédemment, on regarde en premier lieu si l'hypothèse d'homogénéité par morceaux du gradient de transformation local est acceptable. Nous commençons par observer les composantes non nulles du gradient de transformation local, à savoir f_{11} , f_{22} , f_{33}

et f_{12} . La composante f_{21} sera étudiée en détails un peu plus loin puisqu'elle présente des particularités (dont l'effet précédemment mentionné concernant $\langle f_{21} \rangle_{cellule}$, cf paragraphe précédent).

Concernant le premier jeu de composantes (f_{11}, f_{22}, f_{33} et f_{12}), on constate que l'hypothèse d'homogénéité par morceaux est qualitativement acceptable dans la matrice et ce, tout au long du chargement. En effet, dans cette dernière, l'hétérogénéité reste localisée près des zones médianes très déformées (voir illustration figure 3.12 pour f_{12} et $\beta = 0.32$). Concernant le grain, l'hétérogénéité semble être plus étendue (voir cartographie 3.13).

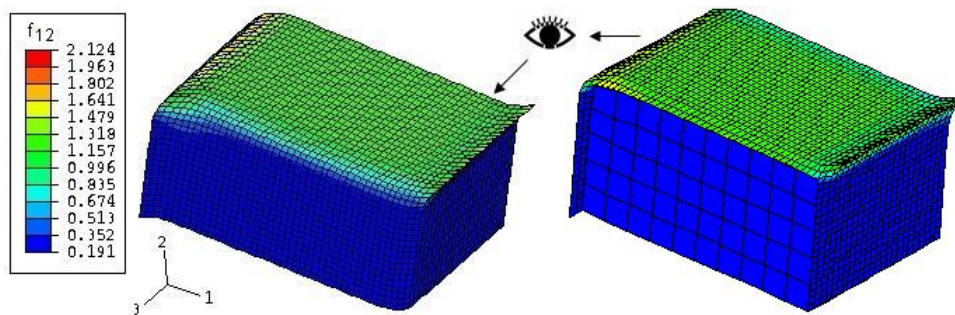


FIG. 3.12 – EF : composante f_{12} du gradient de transformation dans la matrice (vue d'un quart de la cellule de base) lors de la simulation d'un glissement simple ($\beta = 0.32$)

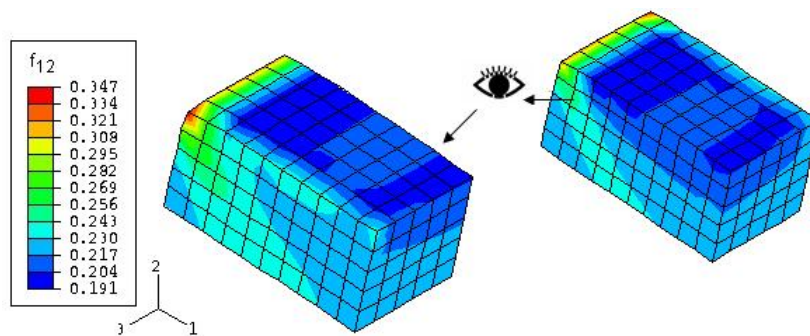


FIG. 3.13 – EF : composante f_{12} du gradient de transformation dans le grain (vue d'un quart supérieur du grain) lors de la simulation d'un glissement simple ($\beta = 0.32$)

D'un point de vue quantitatif, on constate aussi bien pour la matrice que pour le grain que l'intensité de ces hétérogénéités n'a pas d'influence significative pour ces composantes : en effet, les valeurs moyennes EF dans chaque zone (grain et zones intergranulaires) restent proches des valeurs EF ponctuelles relevées loin des zones médianes (cf illustration pour la

composante f_{12} sur la figure 3.14 ; écart relatif maximal de 14%, ponctuellement atteint sur f_{12} dans la ZI 2 en fin de chargement alors qu'ailleurs les écarts relatifs restent inférieurs à 7%).

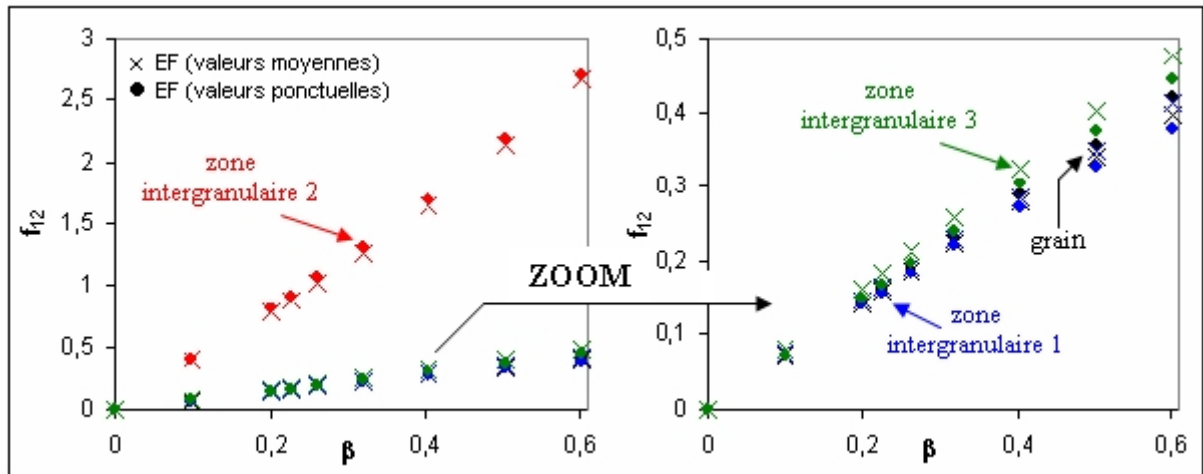


FIG. 3.14 – EF : f_{12} moyens et f_{12} ponctuels sur les différentes régions locales (grain et zones intergranulaires) lors de la simulation d'un glissement simple

Concernant la composante f_{21} , les cartographies représentant sa répartition dans la matrice (figure 3.15) et dans le grain (figure 3.16) montrent que les hétérogénéités présentent un profil analogue à celui observé sur la composante 12 (voir figures 3.12 et 3.13 précédentes). Dans la matrice, les hétérogénéités sont concentrées vers les ZM même si elles paraissent ici peu plus étendues qu'avant, alors qu'elles sont plus réparties sur l'ensemble du grain.

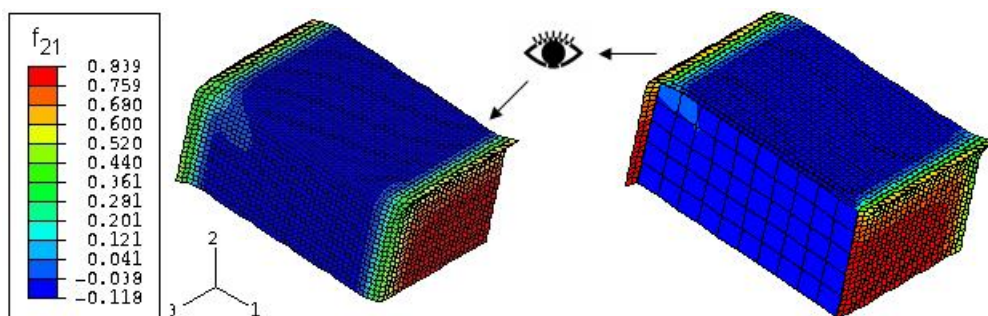


FIG. 3.15 – EF : composante f_{21} du gradient de transformation dans la matrice (vue d'un quart de la cellule de base) lors de la simulation d'un glissement simple ($\beta = 0.32$)

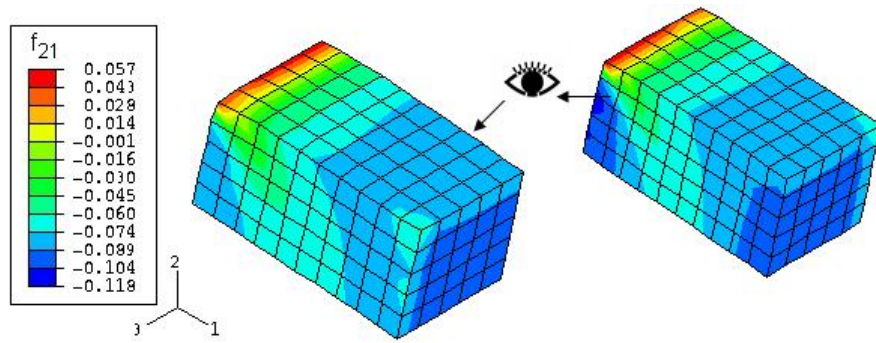


FIG. 3.16 – EF : composante f_{21} du gradient de transformation dans le grain (vue d'un quart supérieur du grain) lors de la simulation d'un glissement simple ($\beta = 0.32$)

En revanche, la figure 3.17 qui représente l'évolution des f_{21} moyens et ponctuels (loin des ZM) dans les différentes zones de la cellule de base EF, montre que cette fois ci l'hétérogénéité induite par ce qu'il se passe dans les ZM est d'intensité suffisante pour influencer significativement les valeurs locales moyennes : de forts écarts sont observés entre les valeurs ponctuelles et les valeurs locales moyennes associées (écarts relatifs allant jusqu'à 90%!). D'autre part, on constate que l'évolution de f_{21} en fonction de β présente parfois une allure douteuse : on peut observer un changement de signe de la dérivée de certaines courbes dans les différentes zones (cf la partie zoomée de la figure 3.17).

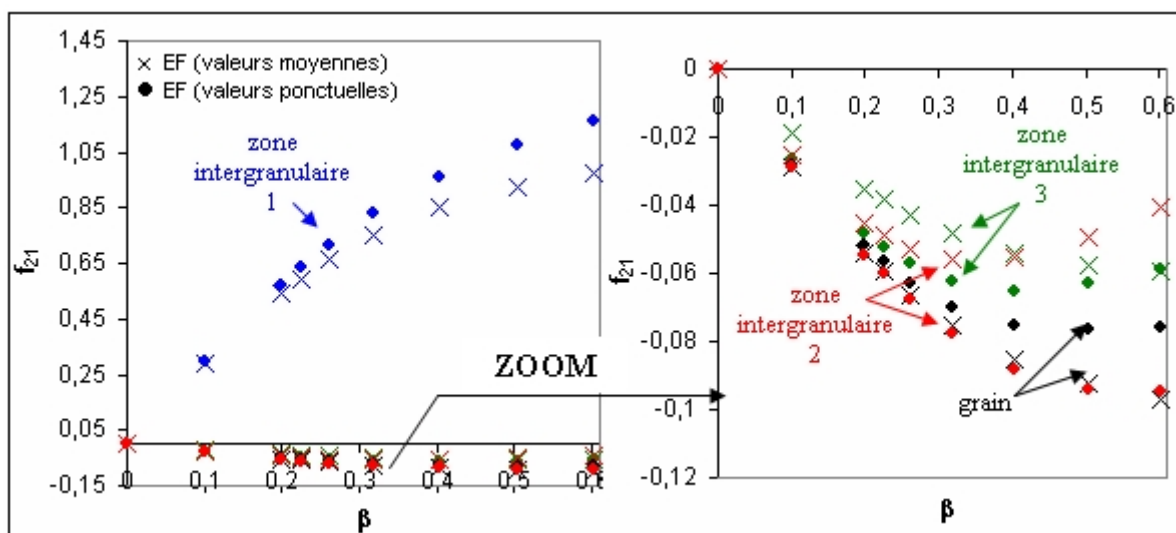


FIG. 3.17 – EF : f_{21} moyens et f_{21} ponctuels sur les différentes régions locales (grain et zones intergranulaires) lors de la simulation d'un glissement simple

Afin de voir si l'on peut attribuer l'erreur mise en relief au paragraphe 3.3.5.1 sur $\langle f_{21} \rangle_{cellule}$ à une zone en particulier, on a tracé sur un même graphique (3.18) les contributions respectives du grain, des zones intergranulaires et des zones médianes sur cette composante. On constate que les résultats dans le grain et dans la matrice sont du même ordre de grandeur sans être de même signe ce qui ne permet pas de dégager un véritable responsable dans la « mauvaise » approximation de F_{21} .

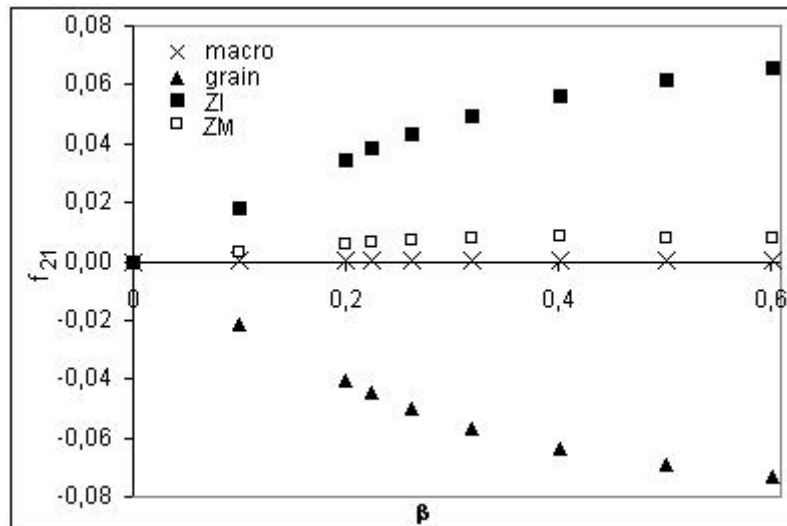


FIG. 3.18 – EF : contributions respectives du grain, des zones intergranulaires (ZI) et des zones médianes (ZM) dans F_{21} lors de la simulation d'un glissement simple

Gardant les remarques précédentes à l'esprit, on confronte maintenant les résultats de l'AM aux résultats EF.

Dans chaque zone et pour chaque composante on calcule :

- les écarts relatifs ER à chaque pas de temps entre les estimations AM et les résultats locaux moyens EF. Le maximum de ces ER est noté ER 1.
- les écarts relatifs à chaque pas de temps entre les estimations AM et les résultats ponctuels EF (loin des ZM). Le maximum de ces ER est noté ER 2.

Les tableaux 3.1 et 3.2 synthétisent ces résultats.

	ZI 1					ZI 2				
	f_{11}	f_{22}	f_{33}	f_{12}	f_{21}	f_{11}	f_{22}	f_{33}	f_{12}	f_{21}
ER 1 (%)	8.9	2.9	0.8	4.8	19.4	2.9	17.2	0.4	2.3	122.8
ER 2 (%)	7.2	0.9	0.7	5.2	2.7	1.1	2.1	0.2	4.2	16.9

TAB. 3.1 – Récapitulatif des écarts relatifs maximaux ER 1 (référence = valeur moyenne locale EF) et ER 2 (référence = valeur ponctuelle EF) entre résultats AM et EF sur les composantes non nulles de \mathbf{f} dans les zones intergranulaires 1 et 2

	ZI 3					grain				
	f_{11}	f_{22}	f_{33}	f_{12}	f_{21}	f_{11}	f_{22}	f_{33}	f_{12}	f_{21}
ER 1 (%)	2.4	0.8	6.7	14.4	91.5	1.3	0.8	0.7	1.2	19.4
ER 2 (%)	2.5	1.7	6.4	8.2	75.4	1.1	1.1	0.5	3.9	43.6

TAB. 3.2 – Récapitulatif des écarts relatifs maximaux ER 1 (référence = valeur moyenne locale EF) et ER 2 (référence = valeur ponctuelle EF) entre résultats AM et EF sur les composantes non nulles de \mathbf{f} , dans la zone intergranulaire 3 et dans le grain

Pour les composantes 11, 22, 33 et 12 de \mathbf{f} dans la matrice -pour lesquelles l'hétérogénéité dans chacune des ZI (localisées aux abords des ZM) n'a pas d'influence significative sur les valeurs moyennes- la convergence est particulièrement bonne entre les estimations de l'AM et les valeurs moyennes en question (ER 1 <9%). Pour la composante 22 dans la ZI 2, l'écart ER 1 atteint toutefois 17% en fin de chargement. L'estimation AM est alors plus proche de la valeur ponctuelle dans la zone homogène correspondante (ER 2 =2.1%). L'ensemble de ces composantes est par ailleurs très bien estimé pour le grain (ER 1 =1.3% et ER 2 =4%).

Pour la composante 21 de \mathbf{f} dans la matrice -où l'hétérogénéité, bien que faiblement étendue, est d'intensité suffisante pour fortement influencer les valeurs moyennes dans chacune des ZI- la confrontation est très mauvaise (ER 1 varie de 19.4% à 122.8%!). On peut noter que les estimations AM de f_{21} sont tout de même plus proches des résultats EF ponctuels (dans les zones homogènes) que des résultats EF moyens (exemple dans ZI 2 : ER 1 =122.8% alors que ER 2 =16.9%).

Pour le grain, les estimations sont mauvaises (ER 1 = 19.4% alors que ER 2=43.6%).

En résumé, les estimations des gradients de transformation locaux fournies par l'AM apparaissent acceptables vis-à-vis des résultats EF, sauf en ce qui concerne la composante 21.

Afin de mieux cibler l'origine de l'erreur observée sur la composante Π_{21} macroscopique estimée par l'AM, on a tracé sur la figure 3.19 les parts respectives dues au grain et à la matrice (ensemble des trois couches) dans les contraintes macroscopiques Π_{12} et Π_{21} prévues par l'AM. A la lumière de cette figure, on constate que la mauvaise tendance de la contrainte Π_{21} par rapport à la solution EF (voir figure 3.11) est imputable à ce que l'AM prévoit dans la matrice, sans doute en raison de la mauvaise description des effets induits par ce qu'il se passe dans les zones médianes très fortement déformées.

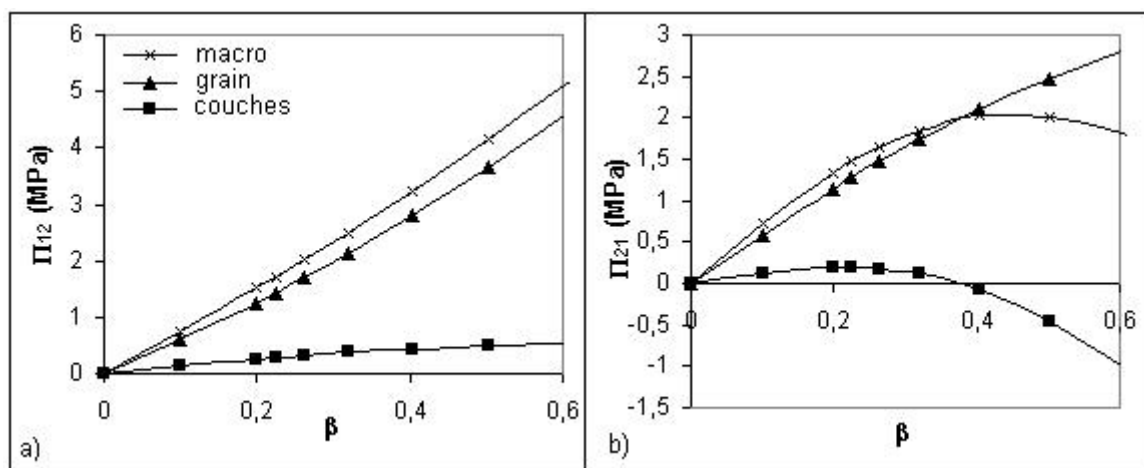


FIG. 3.19 – AM : contributions respectives du grain et de la matrice (trois couches) dans les contraintes macroscopiques estimées lors de la simulation d'un glissement simple a) Π_{12} ; b) Π_{21}

Sur la figure 3.20, on a alors confronté les contraintes estimées aux contraintes moyennes EF dans les zones intergranulaires. On peut constater que dans la ZI 1 même si les composantes du gradient de transformation estimées par l'AM sont proches des résultats moyens EF (voir tableau 3.1), les contraintes moyennes locales dans cette zone ne sont pas pour autant bien estimées. La non linéarité de la loi de comportement implique un cumul des erreurs et altère ainsi les résultats en termes de contraintes.

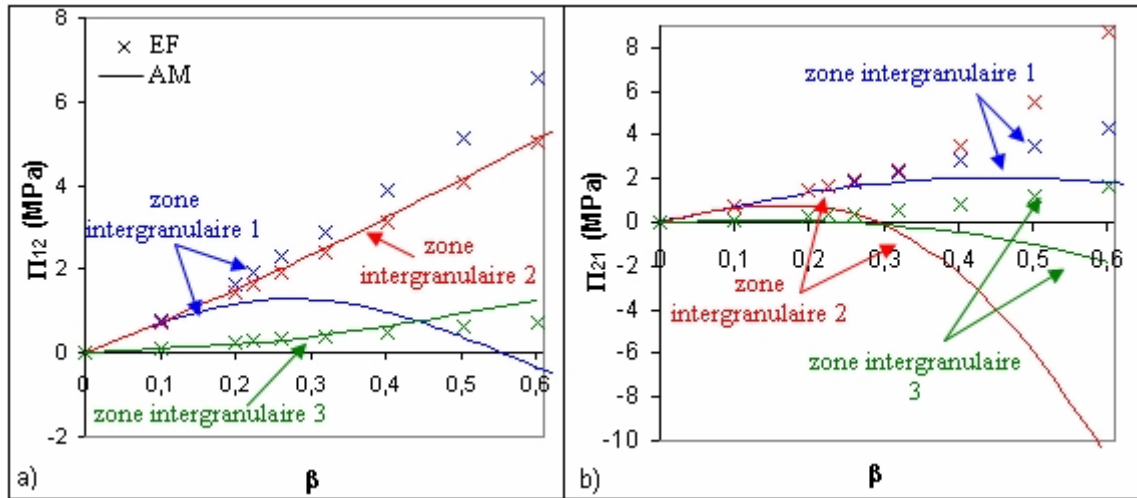


FIG. 3.20 – Contraintes moyennes dans les zones intergranulaires (EF et AM) lors de la simulation d'un glissement simple a) Π_{12} ; b) Π_{21}

Pour finir, il est important de noter que nous sommes ici également confrontés à une difficulté de taille : celle liée à la quasi-incompressibilité des constituants. En effet, d'un point de vue numérique, il est difficile de travailler avec des matériaux présentant cette caractéristique. Pour observer le comportement de l'AM vis-à-vis de la limite d'incompressibilité, nous avons fait varier le module de compressibilité de la matrice de manière à ce que le coefficient de Poisson ν décrive l'intervalle $[0.41; 0.4995]$ et nous avons regardé la sensibilité tant des résultats EF que des résultats de l'AM à ce paramètre. Comme illustré sur la figure 3.21 pour la composante f_{21}^0 du gradient de transformation du grain, les estimations de l'AM sont plus sensibles au coefficient de Poisson que les EF.

L'évaluation d'une approche destinée à des matériaux élastomères nécessiterait en toute rigueur une étude approfondie de ce problème (voir par exemple les travaux de Ponte-Castañeda et Tiberio [PCT00]). Cependant, on rappelle que la méthode que l'on souhaite évaluer a été développée pour étudier la vulnérabilité de composites énergétiques. D'un point de vue pratique, les essais que l'on souhaite simuler à terme génèrent dans le composite des niveaux de pression tels que la matrice présente un comportement compressible (voir paragraphe 5.3 du chapitre 5). Ainsi, conformément au compromis formulé à la fin du chapitre 1, le problème de prise en compte de l'incompressibilité n'est pas traité dans ce manuscrit ; il fera l'objet d'études ultérieures.

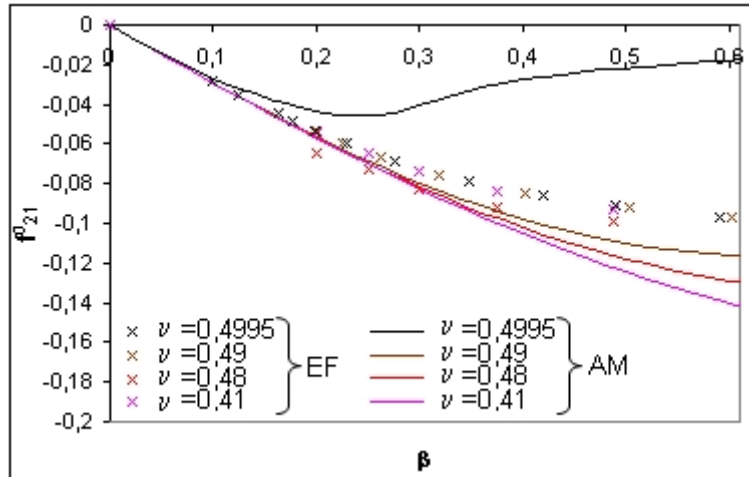


FIG. 3.21 – Composante 21 du gradient de transformation moyen dans le grain (EF et AM) pour des simulations de glissement simple à différentes valeurs du coefficient de Poisson ν dans les constituants

3.4 Evaluation en viscohyperélasticité

3.4.1 Objectif

L'objectif de cette partie est d'évaluer la pertinence quantitative des résultats fournis par l'approche morphologique dans un contexte viscohyperélastique. Dans le chapitre 2 précédent, nous avons montré que l'AM était capable de traiter les comportements de ce type en la mettant en œuvre sur un matériau généré numériquement (grains polyédriques hyperélastiques aléatoirement répartis dans une matrice viscohyperélastique). Nous avons vu que les résultats ainsi obtenus présentaient des tendances qualitativement conformes à ce que l'expérience prévoit (phénomène d'hystérésis, augmentation de la rigidité avec l'augmentation de la vitesse de sollicitation).

Comme mentionné dans le chapitre 1, l'homogénéisation des milieux hétérogènes à constituants viscoélastiques présente des difficultés particulières (voir paragraphe 1.5.4). Parmi celles-ci figure la description de l'effet mémoire longue, résultat macroscopique des interactions locales retardées entre les constituants. Nadot et al. [NMTDF03] ont montré que l'extension de l'approche de Christoffersen au cadre de la viscoélasticité HPP était capable de répondre à cet enjeu. Considérant un composite aléatoire à forte proportion de grains élastiques et à matrice viscoélastique décrite par un modèle de Zener, le problème de localisation-homogénéisation afférent a pu être résolu de manière analytique. La contrainte macroscopique Σ estimée par l'approche de type Christoffersen a pu être écrite sous la

forme suivante :

$$\Sigma(t) = \Sigma^1(t) + \Sigma^2(t) \quad (3.10)$$

Le premier terme $\Sigma^1(t)$ présente la même forme que la contrainte locale dans le liant tandis que le second terme $\Sigma^2(t)$, issu des interactions viscoélastiques locales, traduit l'effet mémoire longue (voir [NMTDF03] pour les détails).

Dans le cas viscohyperélastique, la résolution du problème de localisation-homogénéisation découlant de l'AM ne peut plus se faire de manière analytique si bien que l'effet mémoire longue ne peut plus être mis en exergue de manière explicite. Les fondements théoriques de l'AM étant les mêmes qu'en HPP, mais adaptés au cadre des transformations finies, il est clair que cette approche permet toujours de décrire un effet mémoire longue. La question est alors de savoir si ce dernier est correctement transcrit. Pour répondre à cette interrogation, nous proposons de comparer les résultats de l'AM aux résultats EF obtenus sur la microstructure périodique à grains cubiques présentée au paragraphe 3.2. Cette fois-ci le grain est supposé hyperélastique et la matrice viscohyperélastique. Les modélisations de ces comportements sont présentées dans le paragraphe suivant (3.4.2). Des compressions œdométriques à différentes vitesses de sollicitation sont ensuite simulées sur ce composite (section 3.4.3) et les réponses obtenues par les deux méthodes (AM et EF) sont confrontées au paragraphe 3.4.3.3.

3.4.2 Comportements des phases

Dans cette section, la matrice du matériau périodique cubique présenté plus haut est supposé viscohyperélastique et les grains hyperélastiques.

Dans le code de calcul Abaqus[®] une seule loi viscoélastique en grandes déformations est disponible. Cette dernière est une transcription au cadre des transformations finies du modèle de Maxwell généralisé et fait intervenir les modules de relaxation $G(t)$ (cisaillement) et $K(t)$ (compressibilité) définis par des lois de Prony :

$$\left\{ \begin{array}{l} G(t) = G^0 \left(1 - \sum_{i=1}^N g_i^P (1 - e^{-t/\nu_i}) \right) \\ K(t) = K^0 \left(1 - \sum_{i=1}^N k_i^P (1 - e^{-t/\nu_i}) \right) \end{array} \right. \quad (3.11)$$

G^0 et K^0 sont des modules élastiques instantanés reliés aux modules élastiques aux temps longs G^∞ et K^∞ (caoutchoutiques) par : $G^\infty = G^0 \left(1 - \sum_{i=1}^N g_i^P \right)$, $K^\infty = K^0 \left(1 - \sum_{i=1}^N k_i^P \right)$. g_i^P , k_i^P , ν_i et N sont les paramètres des séries de Prony. Par souci de simplicité, nous ne retiendrons dans la suite qu'un seul temps de relaxation ν (i.e. on prend $N = 1$).

Le tenseur des contraintes de Kirchhoff $\boldsymbol{\tau} = J\boldsymbol{\sigma}$ (J est le Jacobien de la transformation et $\boldsymbol{\sigma}$ le tenseur des contraintes de Cauchy) est décomposé de la manière suivante :

$$\boldsymbol{\tau}(t) = \boldsymbol{\tau}^D(t) + \boldsymbol{\tau}^H(t) \quad (3.12)$$

Les parts déviatorique $\boldsymbol{\tau}^D(t)$ et hydrostatique $\boldsymbol{\tau}^H(t)$ de la réponse sont données par (cas où l'on ne considère qu'un seul temps de relaxation) :

$$\begin{cases} \boldsymbol{\tau}^D(t) = \boldsymbol{\tau}_e^D(t) - SYM[\frac{g^P}{\nu} \int_0^t \mathbf{f}_t^{-1}(t-t') \cdot \boldsymbol{\tau}_e^D(t-t') \cdot \mathbf{f}_t(t-t') e^{-t'/\nu} dt'] \\ \boldsymbol{\tau}^H(t) = \boldsymbol{\tau}_e^H(t) - \frac{k^P}{\nu} \int_0^t \boldsymbol{\tau}_e^H(t-t') e^{-t'/\nu} dt' \end{cases} \quad (3.13)$$

Avec $\mathbf{f}_t(t-t') = \frac{\partial \mathbf{x}(t-t')}{\partial \mathbf{x}(t)}$ et SYM opérateur symétrie.

La part élastique de la réponse, représentée par $\boldsymbol{\tau}_e^D(t)$ et $\boldsymbol{\tau}_e^H(t)$, est gouvernée par une énergie libre de déformation de type Mooney-Rivlin compressible (voir équation (3.1) du paragraphe 3.3.1).

Enfin, le comportement du grain est supposé hyperélastique, défini par une énergie libre de déformation de type Néo-Hooke :

$$w^{grain} = \frac{G^g}{2} (\bar{I}_1 - 3) + \frac{K^g}{2} (J - 1)^2 \quad (3.14)$$

G^g et K^g sont les modules de cisaillement et de compressibilité initiaux du grain. \bar{I}_1 et J désignent comme auparavant le premier invariant modifié et le jacobien de la transformation (cf. paragraphe 3.3.1).

Dans ce qui suit, les paramètres ont les valeurs suivantes :

- Pour la matrice : $G^\infty = 2(C_{10} + C_{01})$ avec $C_{10} = C_{01} = 0.5\text{MPa}$ et $K^\infty = 100\text{MPa}$ pour la part réversible, et $\nu = 25\text{s}$, $k^P = 0.5$, $g^P = 0$ pour la part visqueuse (dans la suite, on considère un chargement n'impliquant pas beaucoup d'effets déviatoires si bien que g^P , caractérisant la part déviatorique de la réponse, n'intervient pas).
- Pour le grain : $G^g = 20\text{MPa}$ et $K^g = 1000\text{MPa}$.

Remarque : Pour le comportement de la matrice, on aurait pu programmer au travers d'une UMAT dans Abaqus® le modèle thermodynamique présenté au chapitre 2 (paragraphe 2.4.3.1). Cependant, effectuer une telle opération requiert beaucoup de savoir-faire et de temps. Compte-tenu de l'objectif que l'on s'est donné dans cette partie (à savoir : procéder à une première évaluation de l'AM dans un contexte viscohyperélastique) nous avons jugé plus pertinent de nous contenter du modèle déjà implanté dans Abaqus®. D'autre part, ce choix permet de montrer que l'AM peut être mise en œuvre aussi bien avec une formulation thermodynamique (cf. chapitre 2) qu'avec une approche fonctionnelle.

3.4.3 Simulations de compressions œdométriques

3.4.3.1 Chargement

Le composite viscohyperélastique considéré est soumis à deux compressions œdométriques définies par le gradient de transformation macroscopique suivant :

$$\mathbf{F}^{comp-visco}(\mathbf{t}) = \begin{pmatrix} \lambda(t) & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.15)$$

avec $\lambda(t) = 1 - v.t$ tant que $\lambda(t) \geq 0.8$ et $\lambda(t) = 0.8 + v.t$ ensuite (charge/décharge). La première simulation est réalisée à la vitesse de sollicitation $v_1 = 0.0025\text{s}^{-1}$ et la seconde à $v_2 = 0.005\text{s}^{-1}$.

La valeur minimale du facteur de charge $\lambda(t)$ (dilatation principale) est de 0.8, ce qui reste modéré. Cependant, localement la matrice accomode des déformations bien plus importantes (cf. plus loin).

Remarque : Un calcul EF a été lancé avec une valeur minimale du facteur de charge plus faible. Il n'a pas abouti et s'est arrêté juste après $\lambda = 0.8$. On a ensuite lancé le même calcul avec l'AM. Ce dernier a tourné mais il a fourni des résultats douteux : on a pu observer un croisement des courbes de charge et de décharge à l'endroit où le calcul EF a échoué. Il est possible qu'il s'agisse d'un problème de stabilité (voir paragraphe 3.3.1).

3.4.3.2 Résolution dans l'AM

Dans la documentation d'Abaqus® [ABA], l'algorithme d'intégration des contraintes de Kirchhoff définies par la loi précédente est présenté. Ce dernier permet d'exprimer à chaque instant t_n le tenseur des contraintes de Kirchhoff $\boldsymbol{\tau}(t_n)$ en fonction de $\boldsymbol{\tau}(t_{n-1})$ déterminé au pas de temps précédent.

On rappelle que le système de localisation-homogénéisation (2.4) (voir chapitre 2, paragraphe 2.2.3) relatif à l'approche morphologique implique le tenseur des contraintes nominales $\bar{\mathbf{s}}$. On utilise donc la relation suivante, reliant $\bar{\mathbf{s}}$ au tenseur des contraintes de Kirchhoff $\boldsymbol{\tau}$:

$$\bar{\mathbf{s}}(t) = \mathbf{f}^{-1}(t) \cdot \boldsymbol{\tau}(t) \quad (3.16)$$

où $\mathbf{f}(t)$ est le gradient de transformation à l'instant t .

Le système ainsi écrit est ensuite résolu conformément au principe exposé au paragraphe 2.2.4 du chapitre 2, en utilisant encore une fois le langage interprété Mathematica®.

3.4.3.3 Confrontation des résultats EF et AM

Sur la figure 3.22, on a porté les réponses macroscopiques prévues par les deux approches (AM et EF) lorsque le composite viscohyperélastique est soumis à des trajets de

compression œdométrique.

Les estimations données par l'AM sont très proches de celles obtenues par EF (écart relatif moyen inférieur à 4%).

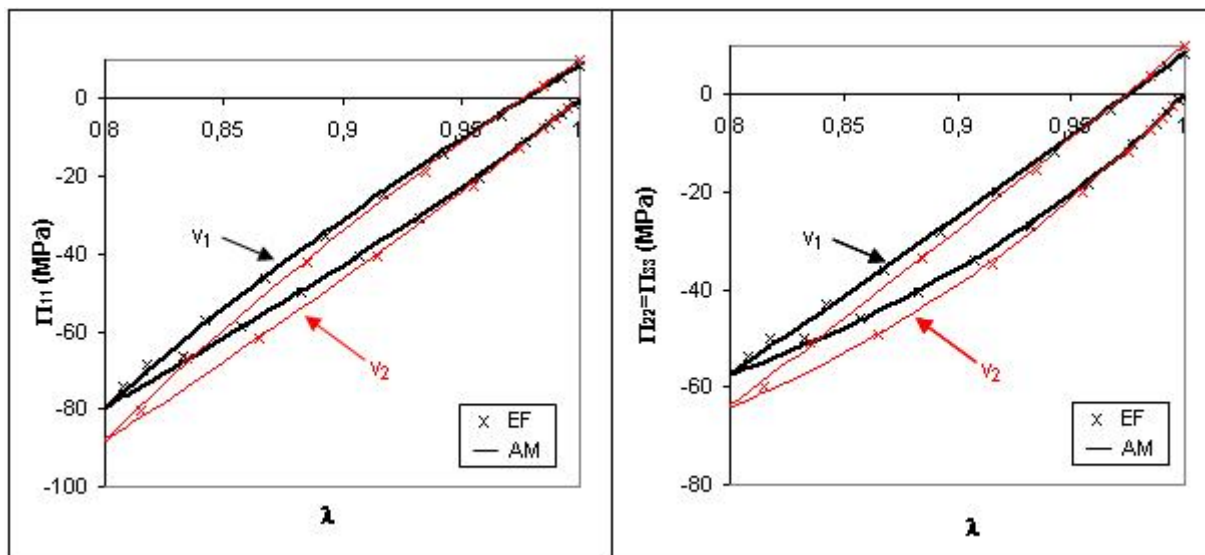


FIG. 3.22 – Contraintes Π_{11} et $\Pi_{22} = \Pi_{33}$ macroscopiques estimées par l'AM et les EF lors de la simulation de compressions œdométriques (deux vitesses de sollicitation $v_1 < v_2$) sur composite périodique viscohyperélastique

D'un point de vue local, on a regardé si l'hypothèse d'homogénéité par morceaux du gradient de transformation était toujours vérifiée dans ce contexte viscohyperélastique. D'un point de vue qualitatif, on observe que les hétérogénéités sont toujours concentrées autour des zones médianes, comme c'était le cas pour le matériau hyperélastique. En guise d'illustration, on a porté sur les figures 3.23 et 3.24 les cartographies EF des composantes f_{11} et f_{22} pour deux facteurs de charge ($\lambda = 0.8175$ et $\lambda = 0.815$ respectivement) lors des simulations EF des compressions œdométriques aux deux vitesses de sollicitation (v_1 et v_2 respectivement). D'autre part, on constate une fois encore que l'effet de ces hétérogénéités sur les valeurs moyennes dans les différentes zones n'est pas significatif : les valeurs moyennes EF restent très proches des valeurs EF relevées loin des zones médianes i.e. dans les zones homogènes (voir illustration sur la figure 3.25). Dans le grain, de même que dans le cas hyperélastique, l'hypothèse d'homogénéité reste vérifiée tout au long du chargement.

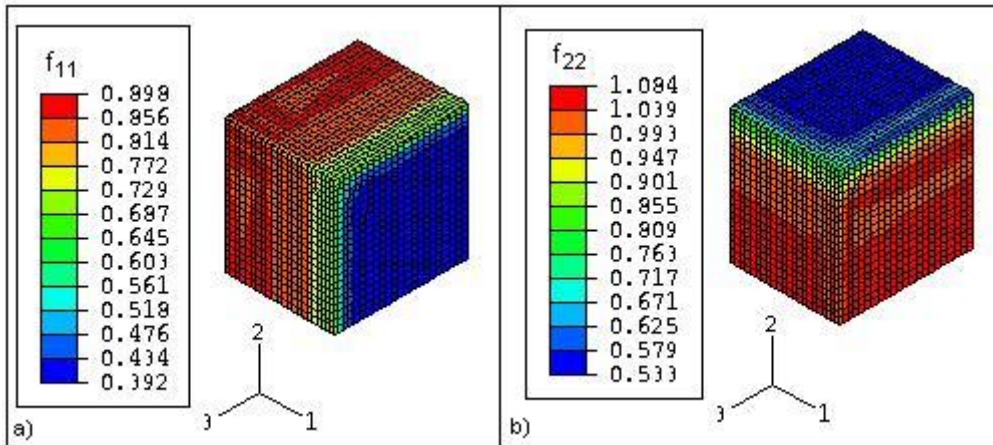


FIG. 3.23 – EF : composantes f_{11} et f_{22} du gradient de transformation local sur le huitième de la cellule de base (vue 3D) dans la simulation d'une compression œdométrique à la vitesse $v_1 = 0.0025s^{-1}$ ($\lambda = 0.8175$) : a) f_{11} ; b) f_{22}

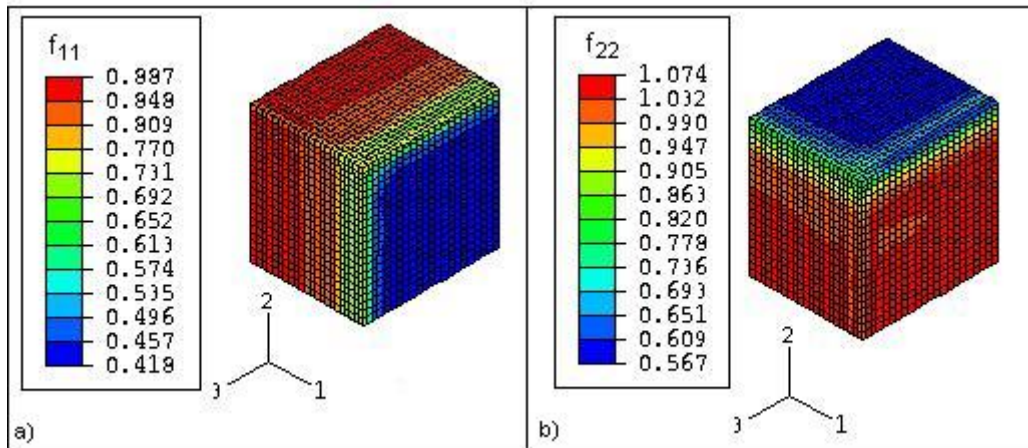


FIG. 3.24 – EF : composantes f_{11} et f_{22} du gradient de transformation local sur le huitième de la cellule de base (vue 3D) dans la simulation d'une compression œdométrique à la vitesse $v_2 = 0.005s^{-1}$ ($\lambda = 0.815$) : a) f_{11} ; b) f_{22}

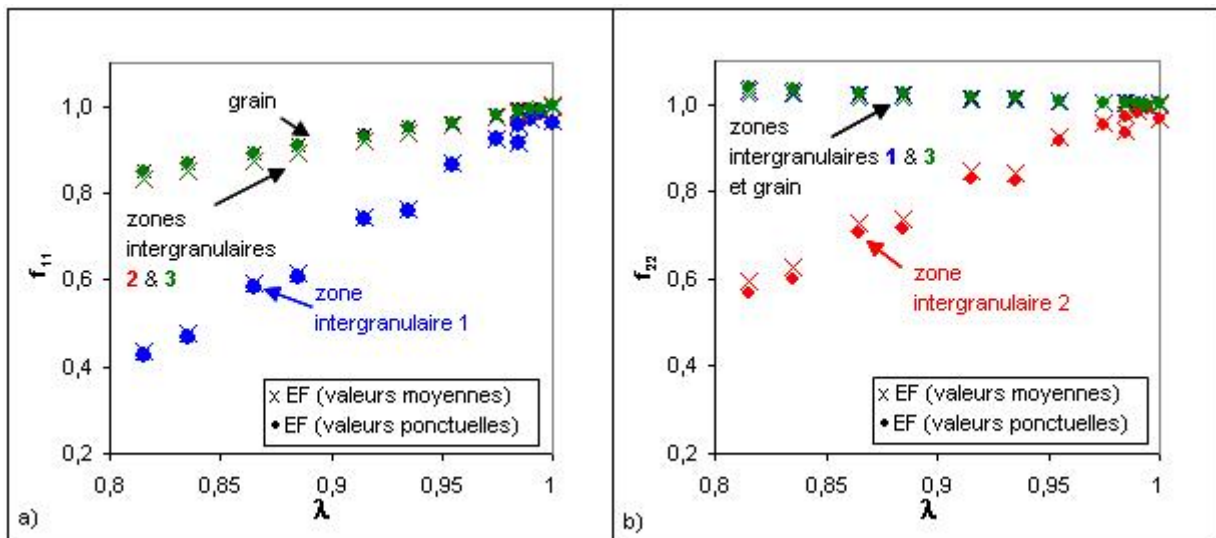


FIG. 3.25 – EF : f_{11} et f_{22} moyens et f_{11} et f_{22} ponctuels sur les différentes régions locales (grain et zones intergranulaires) dans la simulation d'une compression œdométrique à $v_2 = 0.005s^{-1}$: a) f_{11} ; b) f_{22}

Sur la figure 3.26 on a placé les dilatations principales locales moyennes dans les directions 1 et 2 estimées par les deux approches (EF et AM) au cours de la simulation d'une compression œdométrique à $v_2 = 0.005s^{-1}$. Cette dernière illustre la qualité quantitative de estimations locales données par l'AM : les écarts relatifs par rapport aux résultats EF sont inférieurs à 5%.

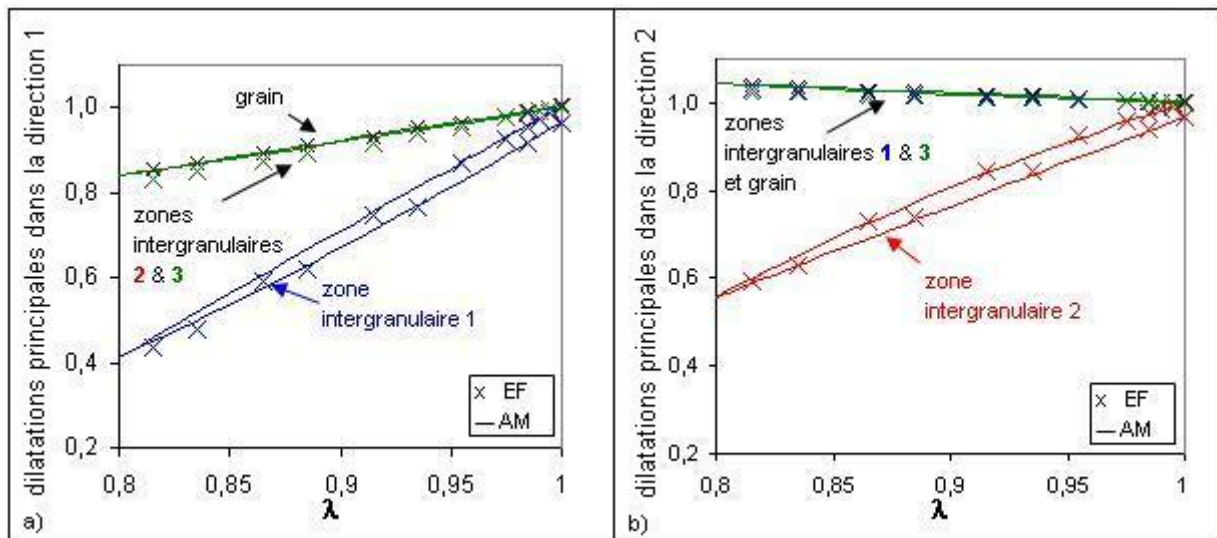


FIG. 3.26 – Dilatations principales locales moyennes (AM et EF) lors de la simulation de la compression œdométrique à $v_2 = 0.005s^{-1}$: a) dans la direction 1 ; b) dans la direction 2

Pour terminer, on peut également noter une bonne adéquation entre résultats AM et EF en ce qui concerne les contraintes moyennes locales (cf. illustration sur la courbe 3.27). Les écarts relatifs sont de l'ordre de 5%.

Les observations faites pour la vitesse $v_1 = 0.0025s^{-1}$ sont identiques à celles décrites pour la vitesse $v_2 = 0.005s^{-1}$.

En conclusion, l'affectation d'un comportement viscohyperélastique à la matrice ne semble pas altérer la qualité des prévisions globales et locales fournies par l'AM dans le cas d'une compression œdométrique sur la microstructure considérée. On retiendra que l'AM demeure plus rapide que les EF dans ce contexte et tient correctement compte de l'effet mémoire longue.

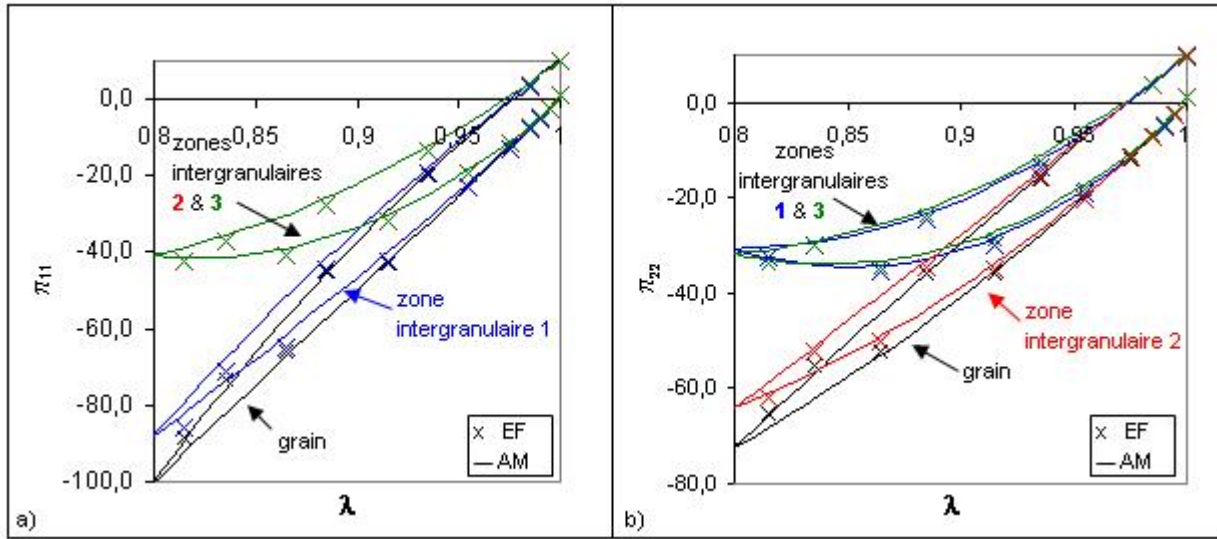


FIG. 3.27 – Contraintes π locales moyennes (AM et EF) lors de la simulation d’une compression œdométrique à $v_2 = 0.005s^{-1}$: a) π_{11} ; b) π_{22}

3.5 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons souhaité faire une première évaluation des performances de l’AM dans le cas d’une microstructure simple. Pour ce faire, nous avons considéré un composite périodique contenant 75% de grains cubiques régulièrement répartis dans une matrice. Pour différents comportements des phases (hyperélasticité, viscohyperélasticité) et différents trajets de chargement (compression œdométrique, glissement simple) nous avons calculé par l’AM et par EF les réponses macroscopiques et champs locaux régnant dans le composite. La confrontation des résultats -tant globaux que locaux- donnés par les deux méthodes (AM et EF) nous a permis de cerner quelques performances et limites de l’AM (que nous synthétisons ci-après) dans le contexte particulier considéré.

Pour un comportement hyperélastique des phases nous avons d’abord réalisé une compression œdométrique sur le composite. Pour ce chargement, nous avons pu constater que les estimations de l’AM sont très proches des résultats EF, aussi bien à l’échelle globale que locale. Dans ce cas-ci, l’hypothèse d’homogénéité par morceaux du gradient de transformation local formulée dans l’AM est acceptable et la non description des effets dans les zones médianes n’affecte pas la qualité des estimations aux deux échelles.

Le composite hyperélastique a ensuite été soumis à un glissement simple. La composante Π_{12} du tenseur des contraintes macroscopiques de Piola-Kirchhoff 1 est correctement estimée par l’AM (par confrontation à l’estimation EF) tandis que Π_{21} est très mal approchée.

L'observation des résultats à l'échelle locale a révélé que l'AM fournissait de bonnes estimations des différentes composantes du gradient de transformation local excepté pour la composante 21. L'hypothèse d'homogénéité par morceaux du gradient de transformation local, toujours acceptable pour la matrice, est toutefois un peu moins bien vérifiée dans le grain que dans le cas de la compression œdométrique. On retiendra notamment que pour la composante 21, la zone homogène dans le grain est très restreinte et que les zones médianes jouent dans ce cas-ci un rôle qui n'est plus négligeable : très déformées, elles ont une forte influence sur les moyennes locales EF concernant f_{21} . Enfin, outre la mauvaise approximation de f_{21} par l'AM, la quasi-incompressibilité des phases et la sévérité du chargement vis-à-vis de la microstructure considérée ont probablement leur part dans la dégradation des résultats de l'AM.

Ensuite, la matrice s'est vue affecter un comportement viscohyperélastique à formulation intégrale. La simulation de compressions œdométriques pour deux vitesses de sollicitation sur ce nouveau composite a montré que la prise en compte de la viscohyperélasticité n'altérerait en rien les résultats fournis par l'AM. La corrélation entre estimations de l'AM et résultats EF à l'échelle globale prouve que l'effet mémoire longue (résultant des interactions locales entre les constituants) est correctement décrit par l'AM.

Les différentes simulations effectuées et présentées dans ce chapitre ont également permis de souligner certains avantages de l'AM par rapport aux EF dans le contexte particulier considéré. On rappelle en effet que pour une simulation donnée, les temps de calcul par l'AM sont bien plus faibles que par les EF (cf. début du paragraphe 3.3.4) et ce, bien que la programmation de l'AM n'ait pas été optimisée (cf. la remarque du paragraphe 2.4.5 concernant l'utilisation du langage interprété Mathematica®). D'autre part, la périodicité du milieu est naturellement prise en compte dans l'AM et l'application d'un chargement se fait de manière très simple (directement via le gradient de transformation macroscopique) ce qui n'est pas le cas de la modélisation EF où l'application de conditions aux limites particulières est nécessaire et de mise en œuvre relativement complexe.

Les résultats plus modérés de l'AM en glissement simple qu'en compression œdométrique dans le contexte périodique considéré ne permettent pas pour autant d'invalider l'approche en question. En effet, on rappelle que cette dernière a été développée pour des milieux aléatoires. Dans ces derniers, l'application d'un chargement quelconque engendrera nécessairement du glissement dans certaines zones du composite. Cependant, pour les chargements compressifs prévus par les applications, on peut espérer que la diversité des orientations des zones intergranulaires limite les déformations des zones médianes et par conséquent leur effet dans les zones intergranulaires.

Par ailleurs, les travaux présentés dans cette partie n'ont pas permis de tester l'hypothèse

de gradient de transformation identique pour tous les grains. En effet, la microstructure périodique retenue dans cette étude ne contenant qu'un seul type de grain cette hypothèse n'a pas pu être mise à défaut. Dans le chapitre qui suit, nous allons donc poursuivre l'évaluation des performances de l'AM dans un contexte se rapprochant de l'aléatoire afin de tester cette dernière hypothèse. Nous procéderons de la même manière que dans ce chapitre c'est-à-dire par confrontation des résultats de l'AM aux résultats EF sur un composite contenant cette fois des grains de taille, de forme et d'orientation différentes.

Chapitre 4

Transition vers une microstructure plus diversifiée

Sommaire

4.1	Introduction	109
4.2	Matériau de travail	110
4.2.1	Géométrie retenue	110
4.2.2	Description du matériau dans les deux approches (AM et EF)	113
4.2.3	Comportements des constituants	114
4.3	Simulations numériques	115
4.3.1	Principe d'analyse des résultats	115
4.3.2	Simulation d'une compression œdométrique à faible contraste des phases	116
4.3.2.1	Analyse des résultats macroscopiques	116
4.3.2.2	Analyse des résultats locaux dans les grains	118
4.3.2.3	Analyse des résultats locaux dans la matrice	121
4.3.3	Simulation d'un glissement simple à faible contraste des phases	123
4.3.3.1	Analyse des résultats macroscopiques	123
4.3.3.2	Analyse des résultats locaux dans les grains	124
4.3.4	Simulations à fort contraste de phases	129
4.3.4.1	Simulation d'une compression œdométrique	129
4.3.4.2	Simulation d'un glissement simple	131
4.4	Conclusion	133

4.1 Introduction

Dans le chapitre précédent, le travail réalisé sur le matériau périodique à grains cubiques a permis d'évaluer une partie de la schématisation cinématique proposée par l'AM dans un cadre géométrique simple. En revanche, compte tenu de la nature très particulière du matériau retenu, une hypothèse cinématique n'a pas pu être mise à défaut : celle qui suppose que le gradient de transformation est identique pour tous les grains. D'autre part, l'application visée concerne des matériaux à microstructure aléatoire. Il est donc maintenant nécessaire de se rapprocher de ce contexte et d'évaluer les performances de l'AM pour un composite de géométrie plus complexe répondant aux contraintes de la schématisation géométrique afin de tester, comme au chapitre 3, les seuls effets de la description cinématique.

L'idéal serait bien entendu de pouvoir réaliser des calculs EF viscohyperélastiques sur le VER d'un matériau contenant des grains polyédriques de tailles, de formes et d'orientations différentes, répartis de manière aléatoire tels que ceux générés numériquement par croissance de sphères au paragraphe 2.4.2 du chapitre 2. Outre le fait que la détermination rigoureuse du VER d'un milieu physiquement et géométriquement non linéaire est une tâche longue et difficile si l'on en croit déjà les travaux de [FCJ⁺02, KFG⁺03], les capacités informatiques requises pour une simulation sont très importantes (voir les temps de calcul pour un volume à 75 grains et à matrice viscohyperélastique présentés au chapitre 2, paragraphe 2.4.5). Un moyen de simplifier le problème, tout en se rapprochant du contexte aléatoire, est de considérer un matériau périodique dont la cellule de base comprend cette fois quelques dizaines de grains de tailles, de formes et d'orientations différentes. Ceci permet de rendre les calculs EF abordables tout en tirant partie de l'expérience déjà acquise sur les problèmes périodiques EF (application du chargement).

La section suivante (4.2) s'attache à présenter la cellule de base du composite retenu pour cette étude ainsi que les raisons qui ont motivé ce choix. Elle détaille également la définition de la géométrie du matériau dans les deux approches (AM et EF) et les difficultés que l'on a pu rencontrer notamment au cours de la réalisation du modèle EF.

Dans la seconde partie (4.3), nous présentons les deux jeux de modules retenus pour décrire le comportement hyperélastique des phases matrice et grain (faible contraste puis fort contraste afin de se rapprocher également d'un point de vue comportemental des matériaux visés à terme). Différentes simulations numériques (compression oedométrique et glissement simple) sont alors effectuées sur le composite hyperélastique dans les deux situations de contraste. Les résultats obtenus par les deux approches AM et EF au cours de ces simulations sont confrontés. Une attention particulière est portée à la vérification de l'hypothèse de gradient de transformation homogène et identique pour tous les grains formulée dans

l'AM.

4.2 Matériau de travail

4.2.1 Géométrie retenue

On commence par établir le cahier des charges auquel la structure de travail doit répondre.

La cellule de base du matériau périodique sur lequel nous allons opérer doit :

- Contenir une forte proportion volumique de grains polyédriques de caractéristiques différentes (forme, volume, orientation) afin que l'hypothèse « gradient de transformation identique pour tous les grains » puisse être évaluée.
- Respecter les contraintes de la schématisation géométrique et la condition de compatibilité indispensable pour garantir la représentativité des estimations AM (voir paragraphes 2.2.3 et 2.3.4). Etant donné que la construction de la cellule sera faite de manière manuelle, il est nécessaire de proposer une solution simplifiant au maximum le calcul de cette compatibilité. Nous y reviendrons plus loin.
- Contenir un nombre limité de grains pour que les temps de calcul (notamment EF) soient convenables.
- Être pensée de manière à ce que le maillage nécessaire à la modélisation EF puisse être réalisé le plus simplement possible, conformément aux exigences spécifiques traduisant la nature particulière du chargement (« en moyenne ») et la périodicité du milieu (voir paragraphe 3.3.2 ou l'équation (4.1) ci-après). Les travaux récents de Tyrus et al. [TGD07] insistent sur les difficultés propres à ce type de problème, notamment en ce qui concerne la périodicité du maillage qui requiert selon leurs mots « des efforts significatifs ». Ils proposent un moyen qui permet de s'affranchir de la périodicité du maillage et de la lourdeur numérique des calculs qui accompagne l'application des conditions aux limites. Cependant, l'extension de cette technique au cas tridimensionnel n'est pas encore disponible.

Le matériau périodique que nous avons construit pour cette étude est défini par la cellule de base représentée sur la figure 4.1. La cellule contient 21 grains occupant 75% du volume total et 72 zones intergranulaires. Les grains sont répartis sur 3 niveaux, contenant chacun 7 grains.

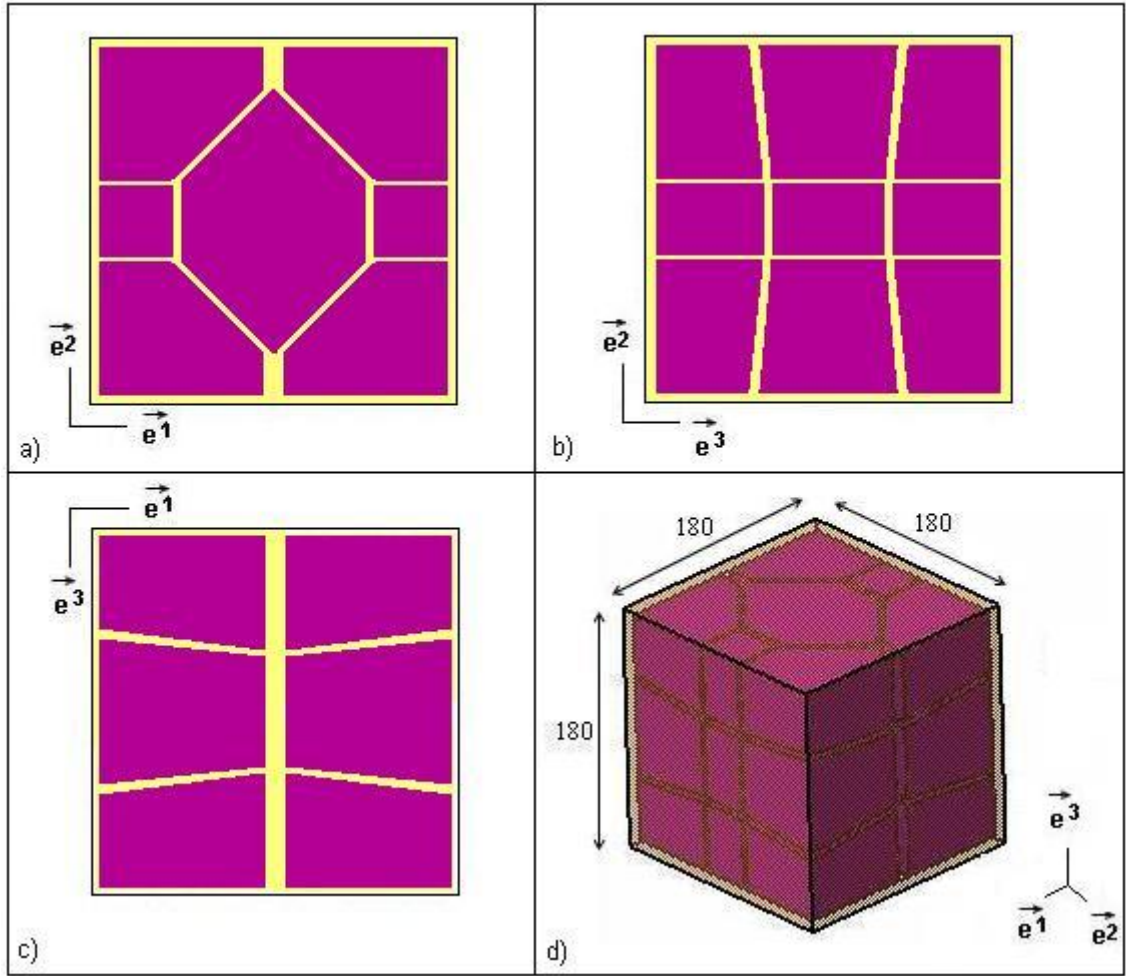


FIG. 4.1 – Cellule de base du composite périodique « complexe » : a) empreinte des grains dans le plan (\vec{e}_1, \vec{e}_2) ; b) empreinte des grains dans le plan (\vec{e}_2, \vec{e}_3) ; c) empreinte des grains dans le plan (\vec{e}_1, \vec{e}_3) ; d) vue 3D (dimensions en mm)

On a donc une cellule de base de côté 180mm, possédant trois plans de symétrie (d'équations respectives $x_1 = 90, x_2 = 90$ et $x_3 = 90$). De cette manière les maillages des faces en regard dans le modèle EF pourront être identiques, ce qui permettra d'appliquer simplement les conditions traduisant le chargement en moyenne et la périodicité du milieu. On rappelle en effet que pour deux points A et B (de coordonnées respectives \mathbf{x}^A et \mathbf{x}^B) de la cellule de base tels que $\mathbf{x}^B = \mathbf{x}^A + \mathbf{x}^P$ (\mathbf{x}^P vecteur de périodicité du milieu) on doit imposer la relation :

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}^A) - \mathbf{u}(\mathbf{x}^B) = \mathbf{H} \cdot (\mathbf{x}^A - \mathbf{x}^B) \quad (4.1)$$

où \mathbf{H} est le gradient de déplacement macroscopique et $\mathbf{u}(\mathbf{x}^A), \mathbf{u}(\mathbf{x}^B)$ les déplacements des points A et B.

D'autre part, les symétries de la cellule de base simplifieront le calcul de la condition de compatibilité. En effet, les paramètres morphologiques des 72 couches pourront être extrapolés à partir des paramètres des 20 couches contenues dans un huitième de la cellule uniquement. Si la cellule ne possédait pas ces symétries, il faudrait calculer un à un les paramètres des 72 couches.

Dans ce qui suit, les grains du niveau 1 (les 7 grains les plus bas sur l'axe \vec{e}_3) sont numérotés de 1 à 7 selon le schéma 4.2. Sur les deux autres niveaux, les grains sont numérotés selon le même principe de 11 à 17 et de 21 à 27 respectivement. Compte tenu des symétries, les grains 1, 4, 6, 7, 21, 24, 26, 27 ont des géométries identiques. Ils forment l'une des 6 classes de grains contenues dans la cellule. Les représentants de ces six classes sont respectivement les grains : 1, 2, 3, 11, 12 et 13.

On définit également les zones intergranulaires : « ZI_1-2 » sépare les grains 1 et 2, « ZI_2-3 » les grains 2 et 3 (en rouge sur la figure 4.2), etc... Parfois, on peut avoir une ambiguïté. Entre les grains 1 et 4 par exemple, on peut définir deux « ZI_1-4 » : la première, « interne » en bleu sur la figure 4.2 et la seconde, « externe » en jaune sur la figure 4.2. Cette dernière est alors appelée « ZI_1-4bis ». Chaque zone intergranulaire « externe » i.e. située sur les bords de la cellule ayant son pendant en zone « interne » se voit qualifiée de zone « bis » pour lever toute ambiguïté.

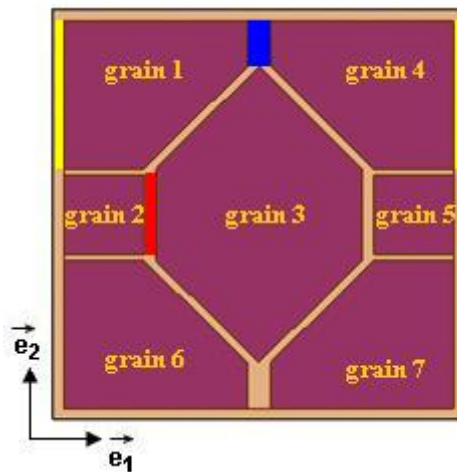


FIG. 4.2 – Numérotation des grains et des zones intergranulaires sur le niveau 1 de la cellule de base du composite périodique complexe (représentation 2D)

4.2.2 Description du matériau dans les deux approches (AM et EF)

Avec le logiciel CATIA[®] (V5R16) on a réalisé les grains, les zones intergranulaires et les zones médianes (i.e. le reste de la matrice) contenues dans un huitième de la cellule de base. Les paramètres morphologiques ont été identifiés pour chacune des 20 couches du huitième puis extrapolés aux autres couches de la cellule. Le tenseur $\mathbf{n} = \frac{1}{V_0} \sum_{\alpha} \mathbf{d}^{\alpha} \otimes \mathbf{n}^{\alpha} A^{\alpha}$ obtenu pour cette géométrie est le suivant :

$$\mathbf{n} = \begin{pmatrix} 0.975 & 0 & 0 \\ 0 & 0.916 & 0 \\ 0 & 0 & 1.01 \end{pmatrix} \quad (4.2)$$

La condition de compatibilité est ici mieux vérifiée que pour le volume polyédrique utilisé au chapitre 2 (voir paragraphe 2.4.2). On peut donc utiliser l'AM sur le volume V_0 associé à cette cellule : l'approximation de \mathbf{F} par $\langle \mathbf{f} \rangle_{V_0}$ sera acceptable (voir les faibles écarts relatifs constatés pour une compatibilité moins bonne au paragraphe 2.4.5 du chapitre 2).

Pour la modélisation EF, on a importé la géométrie précédente sous Abaqus CAE[®]. Chaque entité (grain, ZI et ZM) a été maillée avec des hexaèdres en prenant soin d'assurer la continuité du maillage d'une zone de matrice à une autre (voir figure 4.3). Les grains ont ensuite été collés à la matrice.

La cellule complète a été reconstituée par symétries successives. En procédant de la sorte, les noeuds présents sur deux faces en regard de la cellule auraient dû se correspondre. Cependant, on a pu constater des écarts plus ou moins importants sur certaines coordonnées c'est-à-dire qu'un point B, symétrique de A($x_1^A, x_2^A, 0$) par rapport au plan $x_3 = 90$, ne se retrouvait pas exactement en ($x_1^A, x_2^A, 180$) ! Il a donc fallu corriger à la main ces erreurs pour que les conditions aux limites puissent être correctement appliquées.

D'autre part, en procédant de cette manière, c'est Abaqus CAE[®] qui a numéroté les noeuds au fur et à mesure qu'il les a créés. Ainsi, il a fallu porter une attention particulière lors de la définition des « sets de noeuds » pour l'application des conditions aux limites (voir annexe C pour de plus amples détails). Dans ces « sets » les noeuds doivent être rentrés dans un ordre précis pour que les équations (4.1), traduisant à la fois le chargement en moyenne et la périodicité de la microstructure, soient effectivement appliquées à deux noeuds en regard l'un de l'autre.

Les difficultés rencontrées au cours de la réalisation du modèle EF illustrent une nouvelle fois la simplicité de mise en œuvre de l'AM pour ce qui est de l'application d'un chargement. D'autre part, à travers la lourdeur des calculs impliqués, elles montrent les limites de l'outil numérique dans la démarche d'évaluation d'un modèle micromécanique.

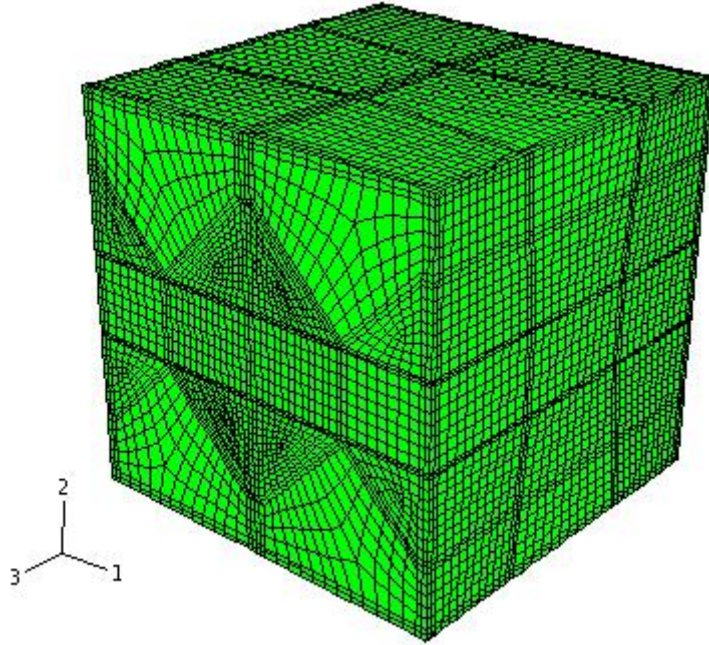


FIG. 4.3 – Maillage EF de la cellule complexe

Remarque : Par manque de temps, la sensibilité au maillage de la réponse EF n'a pas été étudiée dans ce chapitre.

4.2.3 Comportements des constituants

Dans ce chapitre, les grains et la matrice sont supposés hyperélastiques. Le potentiel thermodynamique associé à chacune de ces phases est comme précédemment de type Mooney-Rivlin compressible (voir équation (3.1)). Les simulations que nous allons présenter ont été effectuées avec les deux jeux de paramètres répertoriés dans le tableau 4.1.

	matrice			grain		
	C_{10}^m (MPa)	C_{01}^m (MPa)	K^m (MPa)	C_{10}^g (MPa)	C_{01}^g (MPa)	K^g (MPa)
jeu n°1	0.5	0.5	100	5	5	1000
jeu n°2	0.0166	0.000277	1.67	168.8	0	500

TAB. 4.1 – Récapitulatif des deux jeux de paramètres matériaux utilisés lors des simulations du chapitre 4 : jeu n°1 (faible contraste) et jeu n°2 (fort contraste)

Le premier jeu de paramètres reprend les modules considérés au chapitre précédent ; le contraste est de 10 entre les deux phases.

Avec le second jeu de paramètres, on a souhaité se rapprocher du contexte d'application. Les modules C_{10}^m et C_{01}^m ont donc été identifiés à partir des résultats d'essais de traction-compression uniaxiale et de traction équibiaxiale, respectivement réalisés en 1997 au Centre Technique d'Arcueil et au LRCCP à la demande du CEG, sur le liant (polybutadiène) du « matériaux gris » (B2238). K^m aurait pu être identifié à partir d'un essai de compression œdométrique mais il a été modifié de manière à conférer à la matrice un comportement plus compressible (coefficient de Poisson de 0.49) afin que les calculs numériques (EF mais surtout AM) tournent plus facilement. Concernant les grains (hyperélastiques de type Néo-Hooke dans le deuxième cas), on a retenu les modules correspondant à un contraste de 8000 environ sur le module d'Young. Ce contraste est le plus élevé qui ait pu être observé expérimentalement sur la classe de matériaux considérée.

4.3 Simulations numériques

4.3.1 Principe d'analyse des résultats

De même qu'au chapitre précédent, pour confronter les résultats EF aux résultats de l'AM il est nécessaire d'effectuer des moyennes globales et locales. A la différence de ce qui a été fait précédemment, les mailles dans une phase du modèle EF ne sont plus identiques. Pour calculer des moyennes, il faut sortir les résultats et les volumes initiaux de chaque maille du modèle EF. Les opérations de moyenne sont alors effectuées à partir de programmes Mathematica[®] sur toute la structure (résultats EF macro) et dans chaque grain et zone intergranulaire (résultats locaux).

Afin de regarder si l'hypothèse de gradient de transformation homogène par morceaux est vérifiée dans la modélisation EF, on calcule dans chaque zone locale du modèle EF (grains et zones intergranulaires) un « pourcentage d'homogénéité ». Ce dernier désigne le nombre d'éléments de la zone considérée dans lesquels $f_{iJ}^{elt} = f_{iJ}^{EF-moy} \pm 10\%$ (f^{elt} représente le gradient de transformation moyen dans un élément et f^{EF-moy} le gradient de transformation moyen dans la zone locale considérée). Plus ce pourcentage sera grand, plus la quantité évaluée pourra être considérée comme homogène dans la zone étudiée.

Enfin, concernant l'analyse des résultats dans les grains, on rappelle que l'AM suppose que ces derniers sont le siège d'un gradient de transformation homogène et unique. On a donc choisi de comparer f^0 issu de l'AM à $f^0_{-moy-EF}$, moyenne sur l'ensemble des grains du modèle EF des gradients de transformation moyens dans chaque grain. La dispersion des résultats EF moyens dans chaque grain par rapport au résultat EF moyen sur l'ensemble des grains sera également observée.

Ce principe est résumé sur la figure 4.4.

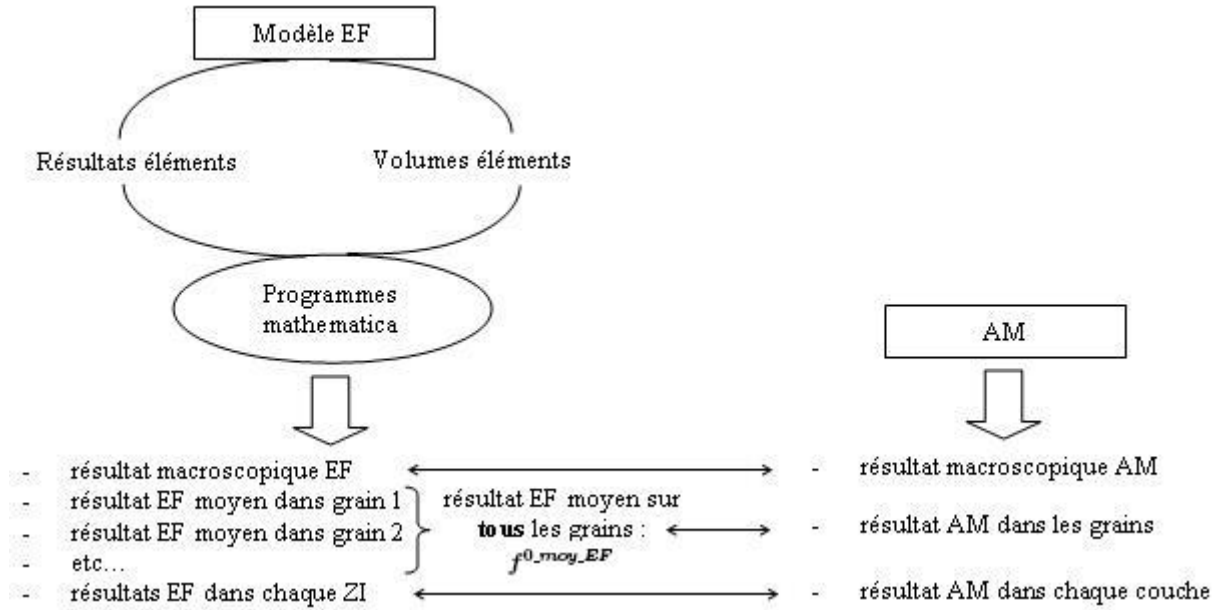


FIG. 4.4 – Principe d’analyse pour la confrontation des résultats EF et AM sur le composite périodique complexe

4.3.2 Simulation d’une compression œdométrique à faible contraste des phases

Le composite périodique complexe à constituants hyperélastiques définis par le jeu de paramètres n°1 est soumis à une compression œdométrique pilotée par le gradient de transformation macroscopique suivant (λ variant de 1 à 0.97) :

$$\mathbf{F}^{comp} = \begin{pmatrix} \lambda & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (4.3)$$

4.3.2.1 Analyse des résultats macroscopiques

De même que précédemment (voir paragraphe 3.3.5.1), on s’assure que le chargement est correctement appliqué dans le modèle EF. On calcule donc $\mathbf{F}^{EF} = \langle \mathbf{f} \rangle_{cellule}$ sur la cellule de base EF. On observe que F_{12}^{EF} et F_{21}^{EF} sont de l’ordre de 10^{-4} alors que les autres composantes sensées être nulles sont en 10^{-8} . Les composantes diagonales de \mathbf{F}^{comp} sont quant à elles bien traduites par \mathbf{F}^{EF} (écart relatif inférieur à 0.1%). Malgré la différence d’ordre de grandeur constatée sur les composantes hors diagonales de \mathbf{F}^{EF} , ce dernier présente la forme attendue (10^{-4} reste négligeable devant l’unité).

La validité du calcul EF peut être mise en doute par les déformations que l'on observe au niveau des zones médianes *non parallèles* aux axes du repère $(\vec{e}^1, \vec{e}^2, \vec{e}^3)$ au fur et à mesure que le chargement progresse (voir figure 4.5). C'est probablement à cause de ce problème (forme pathologique de certaines mailles) que le calcul EF s'arrête si tôt (voir la valeur minimale de λ ci-dessus). De même que dans le chapitre 3, nous menons donc dans ce qui suit l'analyse des résultats en gardant à l'esprit ces remarques qui contribuent à montrer les difficultés et les limites de l'évaluation d'une approche micromécanique par comparaison à un calcul EF de référence.

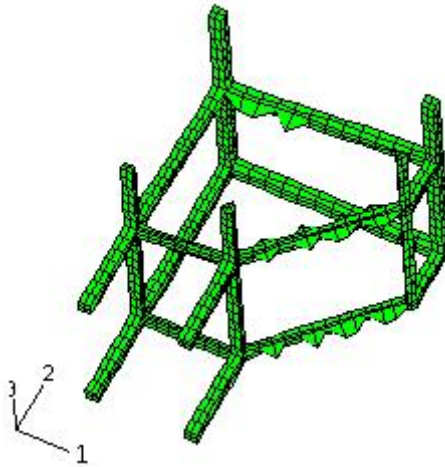


FIG. 4.5 – EF : déformée des zones médianes d'un huitième de la cellule périodique complexe au cours de la simulation d'une compression œdométrique à faible contraste de phases

Les composantes diagonales des tenseurs des contraintes de Piola-Kirchhoff 1 macroscopiques $\mathbf{\Pi}$ estimés par les deux approches sont portées sur la figure 4.6. Les écarts relatifs entre la solution AM et la solution EF sont de l'ordre de 10%.

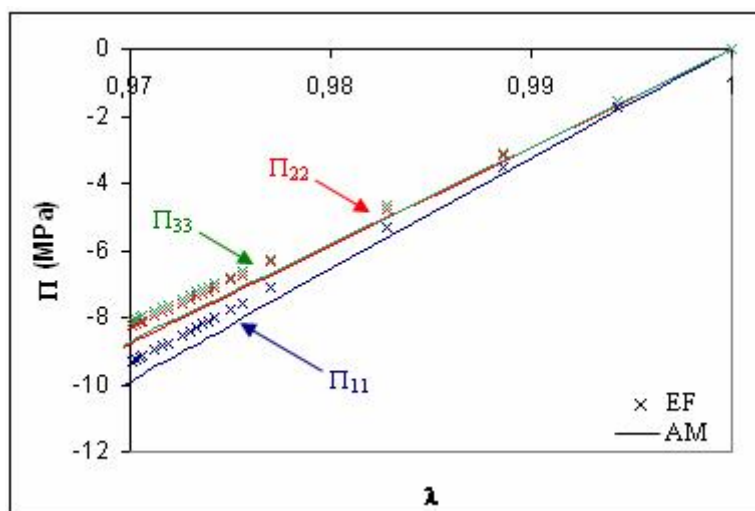


FIG. 4.6 – Comparaison des composantes diagonales des tenseurs des contraintes de Piola-Kirchhoff 1 macroscopiques Π estimés par les deux approches (AM et EF) lors de la simulation d’une compression œdométrique à faible contraste de phases sur la cellule complexe

4.3.2.2 Analyse des résultats locaux dans les grains

Sur la figure 4.7 on a reporté l’allure des grains d’un huitième de la cellule de base au début et à la fin du chargement (rappel : la compression se fait suivant l’axe 1). On observe que le parallélisme des facettes de grains en regard est conservé : les grains tournent très peu les uns par rapport aux autres. Avec un contraste plus fort, on observerait peut-être un peu plus de rotation (c’est ce que nous regarderons au paragraphe 4.3.4), mais ce sont le très fort taux de charges et la symétrie de la cellule vis-à-vis du chargement envisagé qui sont probablement les plus responsables de cet effet.

La forme des tenseurs gradient de transformation moyens dans les grains obtenus par les deux approches confirme le fait que les grains ne tournent pas : les composantes hors diagonale de ces tenseurs sont négligeables.

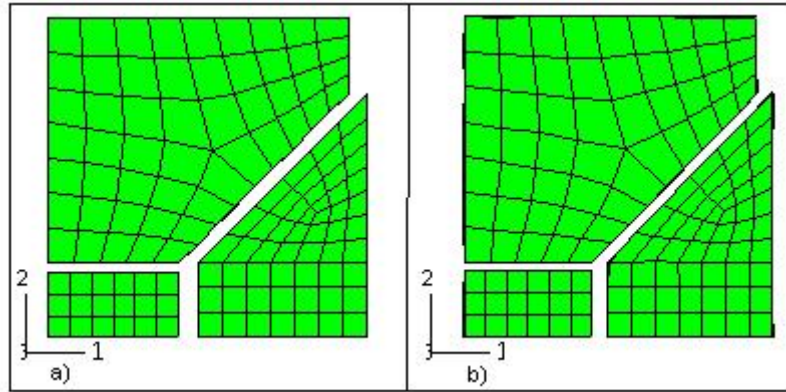


FIG. 4.7 – Représentation des grains d’un huitième de la cellule de base (vue 2D) au cours de la simulation d’une compression œdométrique à faible contraste de phases a) au début du chargement ; b) à la fin du chargement

Dans chacun des grains du huitième de la cellule de base, le pourcentage d’homogénéité (cf. paragraphe 4.3.1 précédent) sur les composantes non nulles (i.e. diagonales) du gradient de transformation local est de 100%.

D’autre part, sur les figures 4.8 à 4.10 on a tracé en fonction du facteur de charge λ les composantes diagonales :

- des gradients de transformation moyens prévus par EF dans les représentants des différentes classes de grains de la cellule de base
- du gradient de transformation moyen sur tous les grains obtenu par EF (référence « moy EF » sur les figures)
- du gradient de transformation des grains estimé par l’AM

La faible dispersion des résultats EF moyens dans les différents grains autour de la valeur moyenne EF « moy EF » couplée au constat précédent sur l’homogénéité dans chaque grain permet de conclure sur la validité de l’hypothèse d’homogénéité dans la *phase* grain.

Enfin, d’un point de vue quantitatif, même si les tendances « moy EF » et AM ne sont pas toujours les mêmes, les écarts relatifs entre ces deux estimations restent très faibles (<1%). Dans ce cas précis, l’hypothèse de gradient de transformation identique pour tous les grains semble donc acceptable.

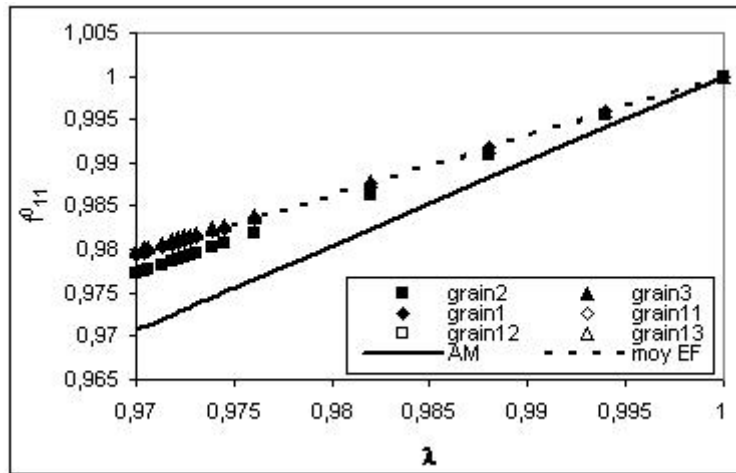


FIG. 4.8 – f_{11}^0 en fonction de λ prévu par les EF (moyenne dans chaque grain du huitième de la cellule complexe et moyenne sur tous les grains) et par l'AM au cours de la simulation d'une compression œdométrique à faible contraste de phases

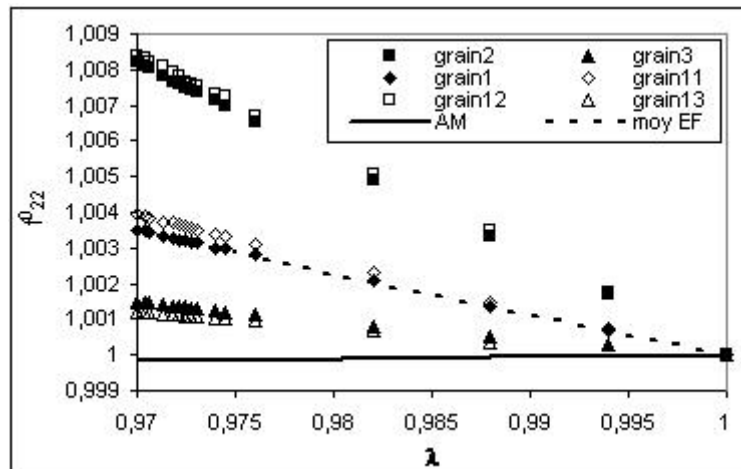


FIG. 4.9 – f_{22}^0 en fonction de λ prévu par les EF (moyenne dans chaque grain du huitième de la cellule complexe et moyenne sur tous les grains) et par l'AM au cours de la simulation d'une compression œdométrique à faible contraste de phases

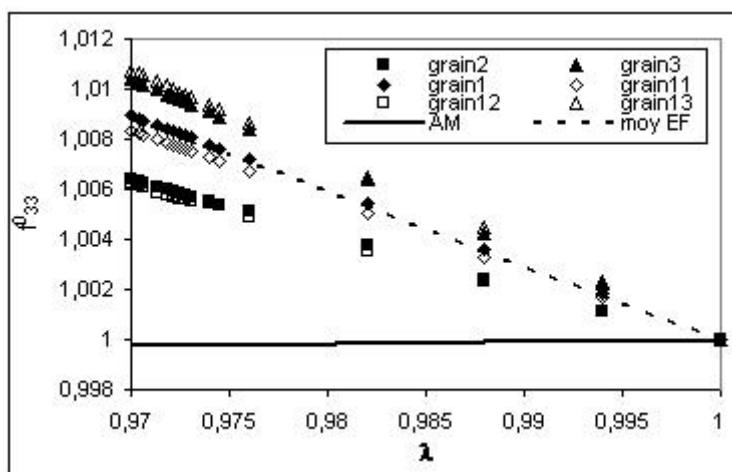


FIG. 4.10 – f_{33}^0 en fonction de λ prévu par les EF (moyenne dans chaque grain du huitième de la cellule complexe et moyenne sur tous les grains) et par l’AM au cours de la simulation d’une compression œdométrique à faible contraste de phases

4.3.2.3 Analyse des résultats locaux dans la matrice

Les résultats sont très difficiles à analyser dans la phase matrice. En effet, compte tenu de la diversité des orientations des zones intergranulaires dans le modèle, le chargement étudié génère à de nombreux endroits des états de déformation très complexes : toutes les composantes du gradient de transformation local \mathbf{f} sont non nulles. Cependant, les composantes hors diagonales sont très souvent faibles, mais l’on n’est pas en mesure de savoir catégoriquement si elles sont négligeables ou pas (compte tenu du fait que F_{12}^{EF} est de l’ordre de 10^{-4} au lieu d’être nul, faut-il -à l’échelle locale- négliger toutes les grandeurs inférieures à 10^{-4} ?)...

D’autre part, les composantes du gradient de transformation n’ont généralement pas de signification physique directe (à moins que les composantes hors diagonales soient nulles auquel cas les composantes diagonales représentent les dilatations principales). On a pensé procéder à la décomposition polaire (voir A) $\mathbf{f} = \mathbf{r} \cdot \mathbf{u}$ dans les zones intergranulaires de manière à séparer les parts « déformation pure » (contenue dans \mathbf{u}) et « rotation pure » (contenue dans \mathbf{r}) mais cela augmente encore considérablement le nombre d’informations à analyser : 3 dilatations principales, 3 directions principales (i.e. 3×3 composantes) plus les composantes du tenseur \mathbf{r} .

Pour finir, les problèmes observés sur les zones médianes (voir figure 4.5) ne semblent pas avoir de répercussion à l’échelle macroscopique mais il est fort probable que leur effet soit important à l’échelle locale.

On peut cependant faire les remarques suivantes :

- Les composantes diagonales du gradient de transformation moyen peuvent être considérées comme homogènes dans les différentes zones intergranulaires : les pourcentages d’homogénéité (voir paragraphe 4.3.1) sont de l’ordre de 100% dans chaque ZI. De plus, les valeurs prévues par l’AM sont proches des valeurs moyennes EF (voir illustration sur la figure 4.11 pour les zones intergranulaires internes entourant le grain 1)
- Concernant les composantes hors diagonale du gradient de transformation moyen dans les ZI (de valeurs très faibles, cf précédemment), elles ne sont pas homogènes dans la modélisation EF. D’autre part, sauf cas exceptionnel, les estimations AM sont très éloignées des résultats moyens EF. Tantôt l’ordre de grandeur n’est pas le même dans les deux approches, tantôt le signe est différent...

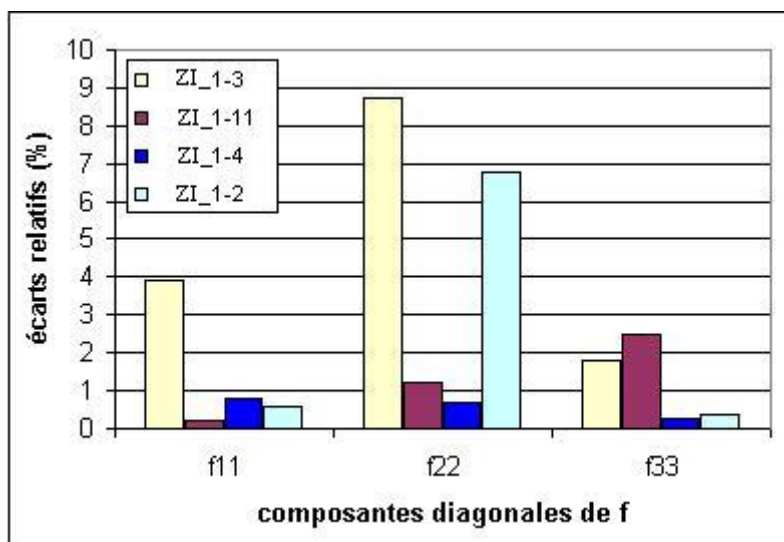


FIG. 4.11 – Ecart relatifs entre les composantes diagonales de \mathbf{f} prévues par l’AM et les valeurs EF moyennes dans différentes zones intergranulaires au cours de la simulation d’une compression œdométrique à faible contraste de phases

En résumé, l’AM fournit de bonnes estimations des contraintes homogénéisées par comparaison aux résultats EF pour la compression œdométrique simulée dans cette section. A l’échelle locale, l’hypothèse « \mathbf{f}^0 homogène et identique pour tous les grains » semble vérifiée de même que l’hypothèse d’homogénéité par morceaux du gradient de transformation dans la matrice pour ce qui est des composantes significatives. Les valeurs estimées sont quantitativement correctes. Il faut cependant noter que les symétries de la cellule de base et le fort taux de charges empêchent ces derniers de tourner au cours du chargement envisagé. Il est donc nécessaire de simuler un chargement susceptible de favoriser la rotation

des grains ; c'est ce que nous faisons dans la section suivante en présentant les résultats obtenus par simulation d'un glissement simple.

4.3.3 Simulation d'un glissement simple à faible contraste des phases

Le composite périodique complexe à constituants hyperélastiques définis par le jeu de paramètres n°1 est maintenant soumis à un glissement simple piloté par le gradient de transformation macroscopique suivant (β variant de 0 à 1) :

$$\mathbf{F}^{gliss} = \begin{pmatrix} 1 & \beta & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (4.4)$$

4.3.3.1 Analyse des résultats macroscopiques

Dans la modélisation EF, on observe comme précédemment un artefact sur la composante F_{21}^{EF} . En effet, cette dernière est de l'ordre de 10^{-4} (ce qui reste négligeable vis-à-vis de l'ordre de grandeur des composantes diagonales de ce même tenseur) alors que les autres composantes hors diagonales de \mathbf{F}^{EF} (exceptée F_{12}^{EF} , naturellement) sont de l'ordre de 10^{-7} . Les composantes 12, 11, 22 et 33 de \mathbf{F}^{gliss} sont quant à elles très bien approximées par \mathbf{F}^{EF} (écarts relatifs inférieurs à 1%).

Pour la première fois, cet effet se retrouve également dans les résultats de l'AM : pour elle aussi la composante 21 de $\mathbf{F}^{AM} = \langle \mathbf{f} \rangle_{V_0}$ (rappel : V_0 est le volume constitué des grains et des couches définissant dans l'AM le matériau considéré) est en 10^{-4} alors que les autres composantes hors diagonale (sauf composante 12) sont en 10^{-18} . Les autres composantes (12, 11, 22 et 33) sont correctement transcrites par l'AM (écarts relatifs inférieurs à 1% par rapport aux composantes de \mathbf{F}^{gliss}).

En ce qui concerne les contraintes macroscopiques Π_{12} et Π_{21} , on constate à la lumière de la figure 4.12 que les deux approches leur prévoient des tendances similaires. On souligne notamment que l'on n'observe plus le phénomène de « saturation » que l'on a rencontré au cours de la simulation d'un glissement simple sur le matériau périodique à grain cubique considéré au chapitre 3 (voir pour comparaison l'allure de Π_{21} estimée par l'AM en fonction de β sur la figure 3.11). Ceci confirme que ce type de chargement était très sévère pour la microstructure à grains cubiques précédemment envisagée.

D'un point de vue quantitatif, les écarts relatifs entre les estimations des deux approches sont cependant importants (de 20 à 60%). Pour tenter de déterminer l'origine de ce phénomène, nous nous penchons dans le paragraphe suivant sur l'analyse des champs locaux. Compte tenu des remarques précédemment mentionnées au paragraphe 4.3.2.3 ainsi que du rôle prépondérant des grains dans les contraintes macroscopiques (voir illustration au

paragraphe suivant) nous nous limitons dans ce qui suit à l'analyse des résultats dans la phase grain uniquement.

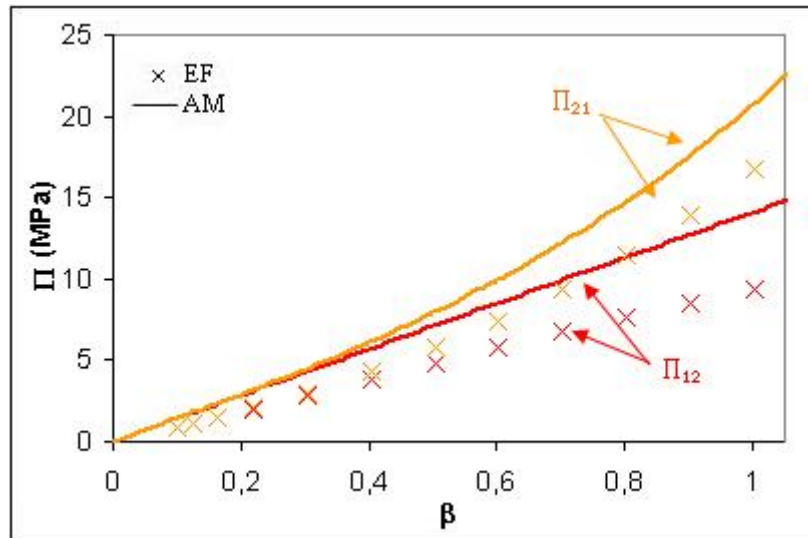


FIG. 4.12 – Comparaison des contraintes macroscopiques Π_{12} et Π_{21} estimées par les deux approches (EF et AM) lors de la simulation d'un glissement simple sur le composite périodique complexe à faible contraste de phases

4.3.3.2 Analyse des résultats locaux dans les grains

Sur la figure 4.13 on a reporté l'allure des grains de la cellule de base au début et à la fin du chargement (vues 2D). A la fin du chargement, les grains sont très déformés. Les zones intergranulaires les plus fines conservent une épaisseur constante tandis que les interfaces les plus larges ont perdu leur planéité et leur parallélisme (voir le cas de ZI_11-14). Ici encore, il serait intéressant d'effectuer une simulation avec un contraste entre les phases plus important de manière à limiter la déformation pure des grains et à favoriser leurs rotations. Ce sera fait plus loin (section 4.3.4.2).

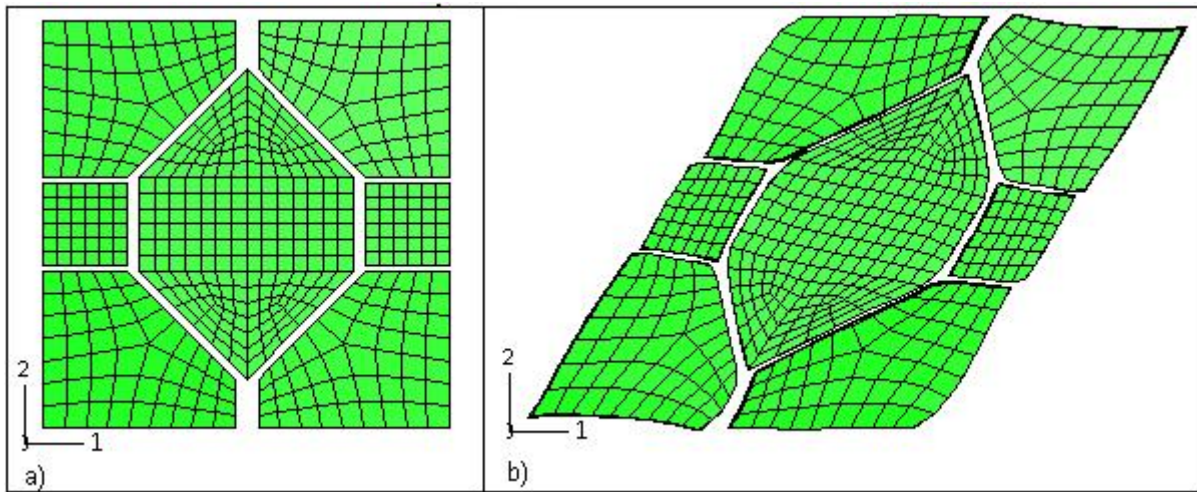


FIG. 4.13 – Représentation des grains de la cellule de base (vue 2D) au cours de la simulation d'un glissement simple à faible contraste de phases a) au début du chargement ; b) à la fin du chargement

Les deux approches prévoient la même tendance concernant les grains : en comparant $f^0_{\text{moy-}EF}$ au gradient de transformation des grains prévu par l'AM, les composantes 13, 23, 31 et 32 sont négligeables dans les deux approches. Dans ce qui suit, nous détaillons les résultats obtenus sur les composantes non nulles.

Concernant les composantes diagonales de f^0 , commençons par signaler que l'hypothèse d'homogénéité est bien satisfaite dans chaque grain du modèle EF (pourcentages d'homogénéité variant de 100% à 75% au cours du chargement). De plus, on observe une faible dispersion des résultats moyens dans chaque grain par rapport au résultat « moy EF ». La confrontation de ce dernier (« moy EF ») aux estimations AM est satisfaisante (écarts relatifs inférieurs à 8%, voir figure 4.14).

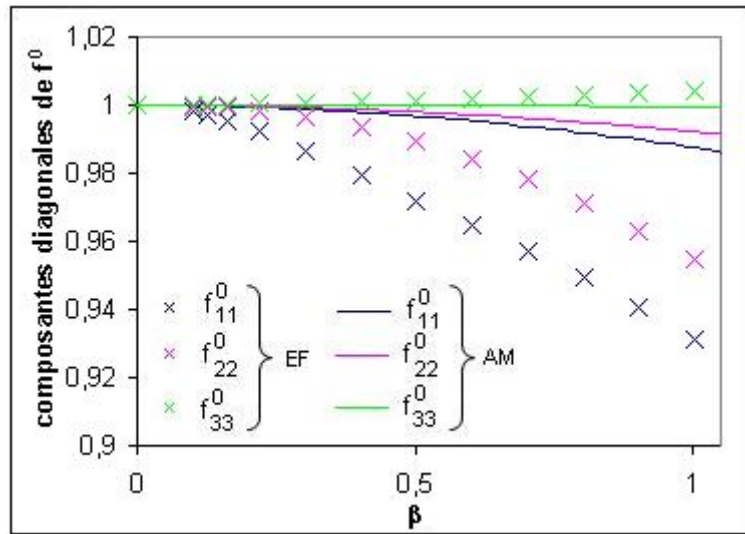


FIG. 4.14 – f_{11}^0 , f_{22}^0 et f_{33}^0 en fonction de β prévu par les deux approches (moyenne EF sur l'ensemble des grains et AM) au cours de la simulation d'un glissement simple à faible contraste de phases

Concernant la composante 12, les pourcentages d'homogénéité sont un peu moins bons. Par exemple, pour le grain 2 (cas le pire) lorsque $\beta = 0.4$ le pourcentage d'homogénéité est encore de 88% ; il n'est plus que de 50% à la fin du chargement. C'est dans les grains les plus petits (type 2 et 12) que l'homogénéité est la moins satisfaite. Des perturbations sont observées au niveau des arêtes et atteignent rapidement le centre. La dispersion des résultats EF moyens dans chaque grain autour de $f_{12}^{0, moy-EF}$ reste faible (voir figure 4.15) mais l'accord de ce dernier avec le résultat de l'AM n'est pas satisfaisant (écart relatif de 40% à la fin du chargement).

La dernière composante non nulle, f_{21}^0 , n'est quant à elle pas du tout homogène. On observe une dispersion importante entre les résultats moyens dans chaque grain et le résultat « moy EF » (voir figure 4.16). Naturellement, la confrontation de ce dernier au résultat AM n'est pas satisfaisante (écart relatif de 90% au maximum).

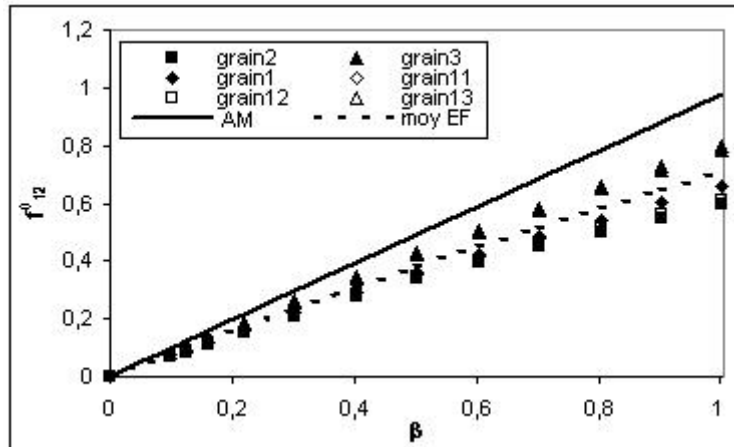


FIG. 4.15 – f_{12}^0 en fonction de β prévu par les EF (moyenne dans chaque grain du huitième de la cellule complexe et moyenne sur tous les grains) et par l'AM au cours de la simulation d'un glissement simple à faible contraste de phases

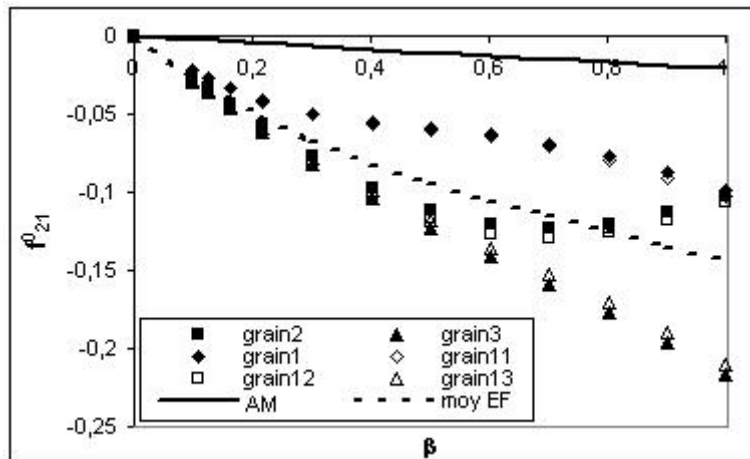


FIG. 4.16 – f_{21}^0 en fonction de β prévu par les EF (moyenne dans chaque grain du huitième de la cellule complexe et moyenne sur tous les grains) et par l'AM au cours de la simulation d'un glissement simple à faible contraste de phases

Sur la figure 4.17, on compare les contraintes moyennes EF Π_{12} et Π_{21} dans les grains aux valeurs estimées par l'AM. On observe que les écarts constatés sur les composantes du gradient de transformation dans les grains sont accentués par la non linéarité de la loi de comportement et contribuent ainsi à de forts écarts entre les contraintes EF et AM dans les grains. D'autre part, dans les deux approches, ce sont les grains qui pèsent majoritairement dans les contraintes macroscopiques estimées (voir illustration sur la figure 4.18). Ce sont

donc les écarts observés au niveau local sur le gradient de transformation dans les grains qui expliquent les écarts quantitatifs sur les contraintes macroscopiques (voir figure 4.12).

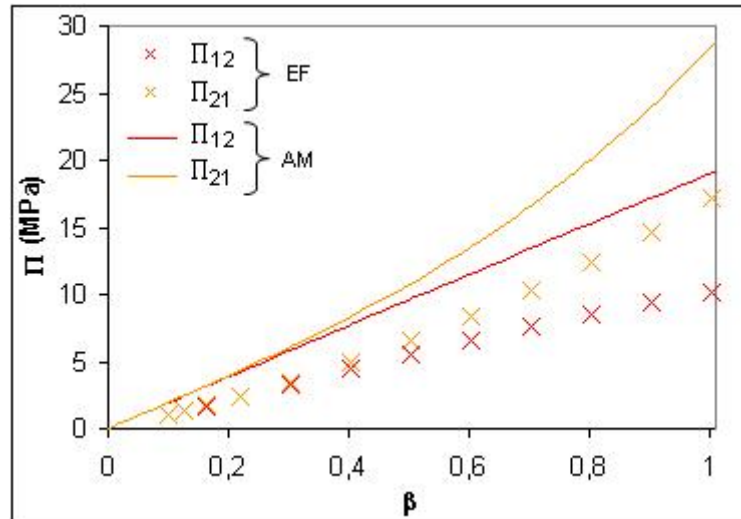


FIG. 4.17 – Π_{21} et Π_{12} dans les grains en fonction de β prévu par les deux approches (moyenne EF sur tous les grains et AM) au cours de la simulation d'un glissement simple à faible contraste de phases sur la cellule complexe

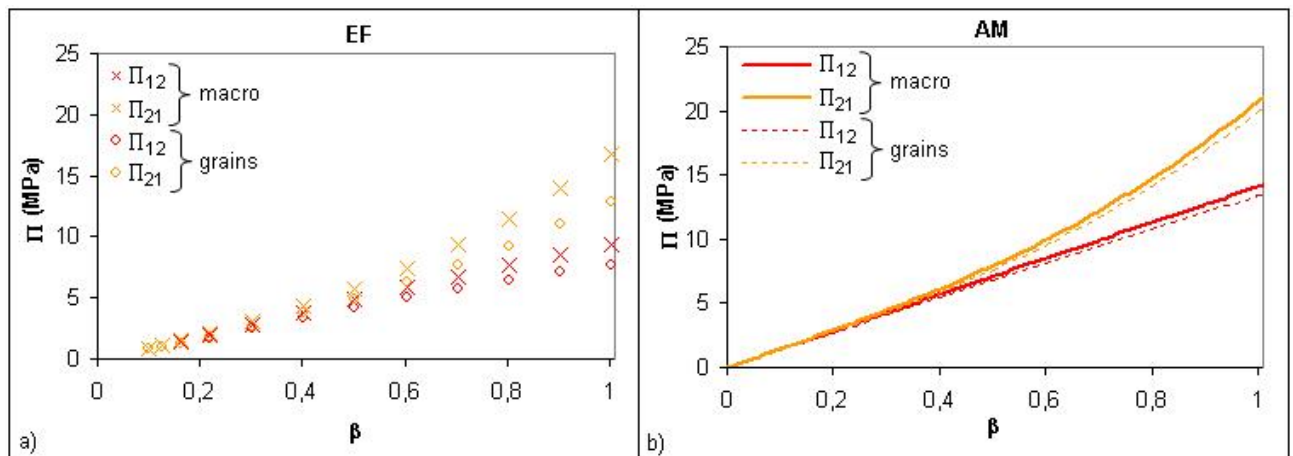


FIG. 4.18 – Contributions des grains dans les contraintes macroscopiques estimées Π_{12} et Π_{21} lors de la simulation d'un glissement simple à faible contraste de phases sur la cellule complexe : a) EF ; b) AM

4.3.4 Simulations à fort contraste de phases

Au cours des deux sections précédentes, nous avons vu que le jeu de paramètres retenu décrivait une situation de faible contraste entre les phases et pouvait impliquer de fortes déformations dans les grains (voir figure 4.13). Or, dans les matériaux visés à terme (cf. chapitre 1) les grains sont quasi-rigides et le contraste entre les phases très important. Il convient donc de réaliser d'autres simulations avec les modules plus représentatifs du jeu n°2 (voir paragraphe 4.2.3) afin d'avancer dans l'aspect « applicatif » du compromis que l'on s'est fixé dans la thèse (voir paragraphe 1.6.2).

L'objectif de cette section est donc d'évaluer la validité de l'hypothèse de gradient de transformation homogène et identique pour tous les grains dans le cas d'un fort contraste entre les phases.

4.3.4.1 Simulation d'une compression œdométrique

Le composite périodique à microstructure complexe et à constituants hyperélastiques définis par jeu de paramètres n°2 est donc soumis à une compression œdométrique (gradient de transformation macroscopique (4.3) avec λ variant de 1 à 0.93).

Avec ce nouveau jeu de paramètres, les mêmes observations sur $\mathbf{F}^{EF} = \langle \mathbf{f} \rangle_{cellule}$ peuvent être faites que dans le cas du faible contraste entre les phases i.e. les composantes F_{12}^{EF} et F_{21}^{EF} sont négligeables par rapport aux composantes diagonales de \mathbf{F}^{EF} sans pour autant être du même ordre de grandeur que les autres composantes négligeables de \mathbf{F}^{EF} (voir paragraphe 4.3.2.1).

La figure 4.19 présente l'allure des grains d'un huitième de la cellule de base au début et à la fin du chargement. Conformément à ce que l'on attendait, la matrice accomode plus de déformation que dans le cas du faible contraste entre les phases (cf. figure 4.7 plus haut). En particulier, on peut noter une légère rotation des grains 1 et 11 qui se traduit par la perte de parallélisme des facettes en regard générant une inhomogénéité de déformation dans ZI_11-12 et ZI_11-13 notamment (voir figure 4.19).

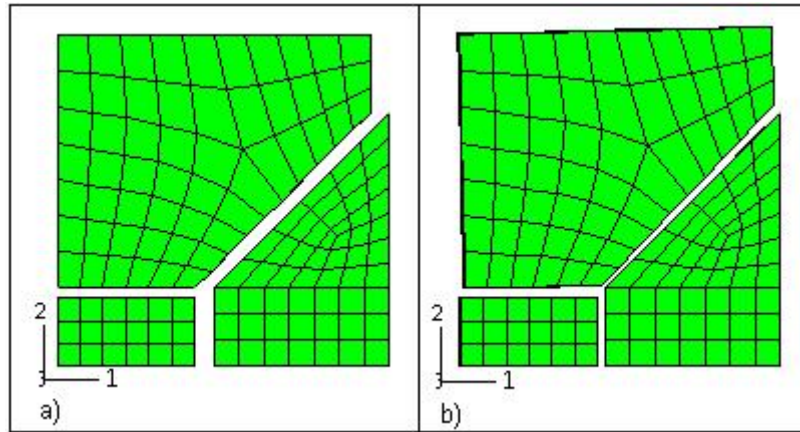


FIG. 4.19 – Représentation des grains d’un huitième de la cellule de base (vue 2D) au cours de la simulation d’une compression œdométrique à fort contraste de phases a) au début du chargement ; b) à la fin du chargement

D’un point de vue quantitatif, on a porté dans le tableau 4.2 les pourcentages d’homogénéité des composantes non nulles du gradient de transformation moyen dans les différents grains du modèle EF (\otimes représente une composante négligée).

Tout d’abord, l’hypothèse d’homogénéité du gradient de transformation dans les grains est satisfaite. En effet, toutes les composantes non négligeables du gradient de transformation dans chaque grain ont des pourcentages d’homogénéité très satisfaisants. Ensuite, on retrouve bien ce que l’on constate sur la figure 4.19 à savoir que le grain 1 est celui qui possède le plus de degrés de liberté (ce qui se voit à travers le nombre de composantes non nulles du gradient de transformation moyen). C’est naturellement lui qui est le plus enclin à la rotation (« grandes » épaisseurs des zones intergranulaires externes qui l’entourent, position non centrale dans la cellule). Notons toutefois que la dispersion des résultats moyens dans les grains est faible par rapport au résultat moyen EF sur l’ensemble des grains.

	f_{11}^0	f_{12}^0	f_{13}^0	f_{21}^0	f_{22}^0	f_{23}^0	f_{31}^0	f_{32}^0	f_{33}^0
grain 1	100%	100%	100%	100%	100%	100%	100%	100%	100%
grain 2	100%	∅	100%	∅	100%	∅	100%	∅	100%
grain 3	100%	∅	∅	∅	100%	∅	∅	∅	100%
grain 11	100%	100%	∅	100%	100%	∅	∅	∅	100%
grain 12	100%	∅	∅	∅	100%	∅	∅	∅	100%
grain 13	100%	∅	∅	∅	100%	∅	∅	∅	100%

TAB. 4.2 – Pourcentages d’homogénéité des composantes non nulles du gradient de transformation moyen dans les différents grains du huitième de la cellule de base du composite périodique complexe à propriétés fortement contrastées soumis à une compression œdométrique

L’AM prévoit dans les grains un gradient de transformation \mathbf{f}^0 de forme diagonale très proche de $\mathbf{f}^0_{\text{moy-}EF}$ (écarts relatifs maximaux inférieurs à 1%) mais également très proche de l’identité! En effet, les trois plans de symétrie orthogonaux aux axes du chargement et le très fort taux de charges de la cellule de base considérée limitent considérablement les rotations des grains.

Remarque : Malgré le bon accord observé entre $\mathbf{f}^0_{\text{moy-}EF}$ et \mathbf{f}^0_{AM} , les contraintes moyennes dans les grains données par les deux approches sont très différentes et impliquent de forts écarts entre les estimations macroscopiques (de 1 à 90%).

Dans le paragraphe suivant, le même composite est soumis à un glissement simple afin de favoriser les rotations.

4.3.4.2 Simulation d’un glissement simple

Dans cette section, le composite périodique à microstructure complexe et à constituants hyperélastiques définis par jeu de paramètres n°2 est soumis à un glissement simple (gradient de transformation macroscopique (4.4) avec β variant de 0 à 0.1).

Avec ce nouveau jeu de paramètres, les mêmes observations sur $\mathbf{F}^{EF} = \langle \mathbf{f} \rangle_{\text{cellule}}$ et sur $\mathbf{F}^{AM} = \langle \mathbf{f} \rangle_{V_0}$ peuvent être faites que dans le cas du faible contraste entre les phases (i.e. les composantes F_{21}^{EF} et F_{21}^{AM} sont très faibles sans pour autant être du même ordre de grandeur que les autres composantes négligeables de ces deux tenseurs; voir paragraphe 4.3.3.1).

La figure 4.20 présente l’allure des grains d’un quart de la cellule de base au début et à la fin du chargement. Conformément à ce que l’on attendait, les grains sont beaucoup moins

déformés que sur la figure 4.13. Ils suivent une rotation d'ensemble qui est peut-être encore une fois majoritairement imputable à la spécificité de la cellule de base retenue pour l'étude. En conséquence, les zones intergranulaires de matrice conservent une épaisseur constante. Les composantes non négligeables de f^0 dans chacun des grains sont homogènes et leur dispersion par rapport à la valeur moyenne EF f^0_{moy-EF} très faible. D'un point de vue quantitatif, les composantes diagonales de f^0 estimées par l'AM sont très proches de celles de f^0_{moy-EF} (écarts relatifs inférieurs à 0.2%) mais les composantes 12 et 21 sont moins satisfaisantes (écarts relatifs de 20 à 40%). D'autre part, on signale que le calcul par l'AM rencontre un problème vers $\beta = 0.09$ (voir figure 4.21).

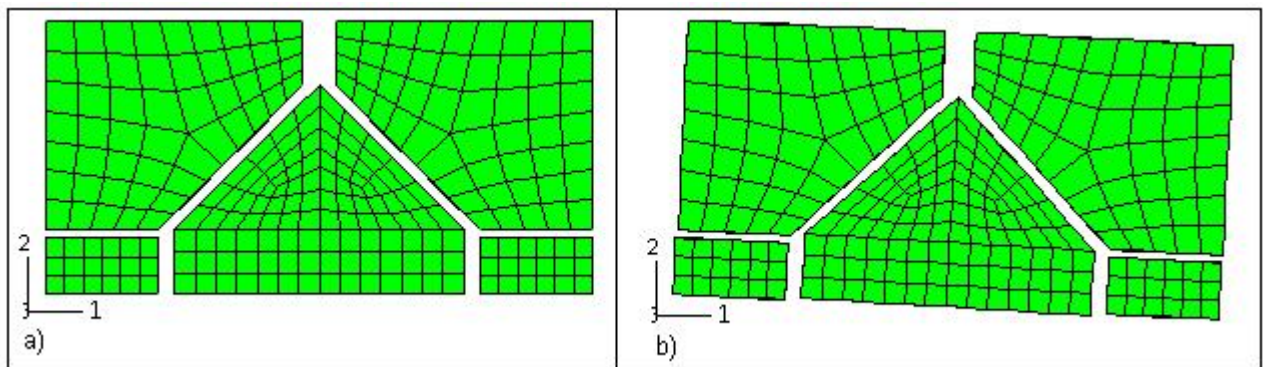


FIG. 4.20 – Représentation des grains d'un quart de la cellule de base (vue 2D) au cours de la simulation d'un glissement simple à fort contraste de phases a) au début du chargement ; b) à la fin du chargement

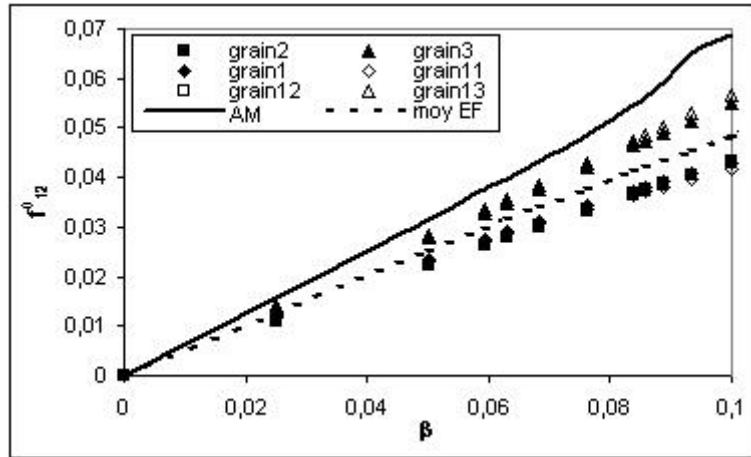


FIG. 4.21 – f_{12}^0 en fonction de β prévu par les EF (moyenne dans chaque grain du huitième de la cellule complexe et moyenne sur tous les grains) et par l’AM au cours de la simulation d’un glissement simple à fort contraste de phases

Remarque : Les contraintes macroscopiques ne sont pas satisfaisantes.

4.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons souhaité nous rapprocher de la morphologie (diversité des grains) des composites visés à terme pour pouvoir tester l’hypothèse de gradient de transformation homogène et identique pour tous les grains formulée dans l’AM, hypothèse qui n’avait pas pu être mise à défaut lors l’étude du chapitre 3. Des contraintes liées notamment à la difficulté de la réalisation du modèle EF et aux temps de calculs mis en œuvre pour une microstructure tridimensionnelle en transformations finies nous ont conduits à opter pour une microstructure périodique dont la cellule de base possède 3 plans de symétrie et 6 classes de grains différentes par leur forme, leur volume, leurs orientations.

Pour un comportement hyperélastique des phases plusieurs séries de simulations ont été effectuées : la première avec un faible contraste puis la seconde avec un fort contraste entre les phases.

Pour la première série de simulations, la compression œdométrique simulée a montré que l’AM fournissait des résultats macroscopiques satisfaisants vis-à-vis des résultats EF obtenus. Dans ce contexte particulier, l’hypothèse de gradient de transformation homogène et identique dans les grains semble vérifiée. L’analyse des résultats dans la matrice n’a pas pu être poussée très loin compte-tenu des difficultés rencontrées (pas de séparation nette entre grandeurs faibles et négligeables, complexité des états de déformation locaux). On retien-

dra cependant que les composantes diagonales du gradient de transformation local dans les différentes zones intergranulaires sont quasiment homogènes et correctement approchées par l'AM. Les composantes hors diagonales sont moins satisfaisantes, tant du point de vue de l'homogénéité que de leurs valeurs, mais il est très difficile de savoir catégoriquement si elles doivent être négligées ou pas. Les résultats macroscopiques obtenus au cours de la simulation d'un glissement simple dans le plan (\vec{e}^1, \vec{e}^2) sont moins satisfaisants que pour la compression œdométrique : si les courbes $\Pi(\beta)$ présentent des tendances similaires dans les deux approches, les valeurs quantitatives ne sont pour autant pas les mêmes. L'analyse des gradients de transformation locaux dans les grains fournis par les deux approches a révélé que les écarts sur les contraintes macroscopiques étaient dus aux écarts observés sur les composantes 12 et surtout 21 du gradient de transformation dans les grains. La non linéarité de la loi de comportement retenue semble également accentuer ces effets.

Des simulations de compression œdométrique et de glissement simple ont ensuite été effectuées avec un contraste important entre les deux phases. L'hypothèse portant sur f^0 semble être plus acceptable qu'à faible contraste notamment dans le cas du glissement simple au cours duquel les grains se déforiment moins et semblent suivre une rotation d'ensemble. Cependant, les symétries de la cellule considérée et le très fort taux de charges pèsent probablement beaucoup sur ce résultat et la qualité des estimations macroscopiques n'est pas pour autant améliorée. D'autre part, le fait que les grains soient polyédriques influe également dans ce sens : en effet, chaque grain du composite de la figure 4.22 a) possède probablement beaucoup plus de degrés de liberté de rotation propre que son homologue polyédrique dans le composite de la figure 4.22 b).

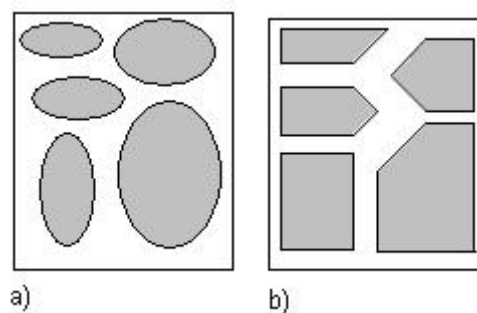


FIG. 4.22 – a) Composite à grains émoussés ; b) Composite schématisé associé à grains polyédriques

On a également pu mettre en évidence des artefacts liés à des problèmes numériques dans les deux approches. Si ces derniers ne semblent pas perturber significativement les résultats macroscopiques ils peuvent néanmoins avoir leur importance à l'échelle locale. Par

ailleurs, on rappelle que par manque de temps, nous n'avons pas réalisé d'étude concernant la sensibilité des résultats EF à la finesse du maillage. Aussi, bien que le maillage utilisé ait été choisi relativement fin (environ 44 000 éléments), les résultats obtenus ici ne sont que des indicateurs. Enfin, on a travaillé avec des grains polyédriques afin de s'affranchir des effets de la schématisation géométrique de l'AM. En réalité, les acuités introduites lors de la schématisation géométrique d'un matériau réel font office de concentrateurs de champs qui ne sont pas pris en compte dans l'AM (homogénéité par morceaux du gradient de transformation local et perturbations dans les zones médianes non décrites). Ainsi, les résultats fournis par l'AM peuvent tout aussi bien être plus proches de la solution EF sur matériau réel à grains émoussés que de la solution calculée sur matériau polyédrique associé !

Le chapitre suivant aborde la deuxième étape d'évaluation de l'AM, à savoir la comparaison à l'expérience pour un composite énergétique réel.

Chapitre 5

Vers une application de l'approche
morphologique à la butalite 400

Sommaire

5.1	Introduction	139
5.2	Démarche adoptée	140
5.3	Essais de compression triaxiale sur la butalite 400	141
5.3.1	Dispositif expérimental et déroulement d'un essai	142
5.3.2	Résultats	144
5.4	Caractérisation morphologique - Définition du Volume Ele- mentaire Statistiquement Représentatif de la morphologie . .	145
5.5	Schématisation géométrique du matériau réel	147
5.5.1	Démarche adoptée et perspectives	147
5.5.2	Détails concernant la vérification de la représentativité des vo- lumes schématisés	148
5.6	Description et identification du comportement des phases . .	151
5.6.1	Introduction	151
5.6.2	Essais de traction quasi-statiques	153
5.6.3	Perspectives	155
5.7	Recherche du VER mécanique relatif à l'AM	156
5.7.1	Introduction	156
5.7.2	Recherche du VER des volumes polyédrisés par croissance de sphères - cas de l'élasticité linéaire	157
5.8	Premières confrontations expérience/calculs numériques . . .	159
5.8.1	Comparaison expérience/AM	159
5.8.2	Programme de confrontations multiples (expérience / AM / cal- culs EF)	161
5.8.3	Résultat des premières confrontations expérience / AM / EF . .	162
5.9	Conclusion	164

5.1 Introduction

Dans les deux chapitres précédents, nous avons évalué les performances de l'AM par comparaison à des calculs de référence (EF). La complexité des microstructures « modèle » périodiques utilisées au cours de cette première évaluation a été limitée par les difficultés numériques sous-jacentes à la modélisation EF. Les calculs effectués ont néanmoins permis de dégager des résultats intéressants permettant une avancée dans l'évaluation de la technique, et notamment de la description cinématique qui en constitue le socle. Dans ce chapitre, nous abordons la deuxième phase -indispensable- intervenant dans le travail de validation d'une démarche micromécanique, à savoir la confrontation entre les résultats expérimentaux sur un composite spécifique et les estimations de l'AM.

Il est important de souligner à ce stade que parmi les différents travaux effectués au cours de cette thèse, peu ont été consacrés à l'étape de schématisation géométrique. En effet, il nous a paru plus prudent d'évaluer en premier lieu les effets de la schématisation cinématique de l'AM (voir l'introduction du chapitre 3). Cependant, l'application de l'AM à un composite à grains polyédriques aléatoirement répartis dans une matrice viscohyperélastique, présentée à la fin du chapitre 2 (voir paragraphe 2.4), nous a conduit à proposer une méthode numérique (croissance de sphères) de génération de volumes satisfaisant les critères géométriques de la schématisation proposée par Christoffersen. Aussi, nous avons choisi pour une première confrontation un composite énergétique dont la dispersion granulométrique est suffisamment faible (comparativement à celle des matériaux présentés au chapitre 1) pour pouvoir mettre à profit ce principe de polyédrisation, le seul dont nous disposons à l'heure actuelle. Il s'agit de la butalite 400, matériau d'étude fabriqué par l'ONERA et fourni au CEG. Il est constitué de 62% de grains de perchlorate d'ammonium (PA) baignant dans une matrice élastomère (polybutadiène).

Dans la section suivante (5.2), nous présentons la démarche générale qu'il faut suivre pour mener à bien la confrontation des estimations de l'AM à des résultats expérimentaux. Les parties suivantes (5.3 à 5.7) s'attachent quant à elles à détailler les étapes relatives à chacun des volets intervenant dans la démarche adoptée. Enfin, la section 5.8 présente les premiers résultats de confrontation expérience/calcul AM pour un chargement de compression hydrostatique. Elle détaille par ailleurs les travaux entrepris pour découpler l'origine des écarts observés (plusieurs niveaux de confrontation entre l'expérience, les résultats AM, mais aussi des calculs EF sur composite réel et schématisé).

5.2 Démarche adoptée

La marche à suivre pour mener à bien la confrontation de l'AM à des résultats expérimentaux est résumée sur la figure 5.1.

La première branche (à gauche) nécessite de définir et de réaliser un certain nombre d'essais expérimentaux sur le composite retenu. Ces essais doivent être représentatifs des chargements envisagés pour l'application et doivent pouvoir être modélisés par l'AM en vue de la confrontation attendue (en particulier il faut connaître les gradients de transformation qui leur sont associés).

La seconde branche concerne l'application de l'AM au composite précédemment testé (ici la butalite 400) et implique différentes étapes :

- Caractérisation morphologique du matériau considéré et définition du Volume Élémentaire Statistiquement Représentatif (VESR).
- Schématisation géométrique et identification des paramètres morphologiques introduits dans l'AM.
- Description et identification du comportement des phases.
- Détermination du Volume Élémentaire Représentatif « mécanique » relatif à l'AM (VER).

Compte tenu du nombre d'aspects à traiter et des difficultés propres à chacun, il n'a pas été possible dans le cadre de la thèse de boucler ce programme. Dans ce qui suit, nous détaillons un à un les travaux entrepris dans chacune des deux branches que nous venons de présenter et nous précisons à chaque fois les travaux restant à effectuer.

Bien entendu, la démarche précédente, détaillée dans ce qui suit sur la butalite 400 revêt un caractère général transposable à d'autres composites.

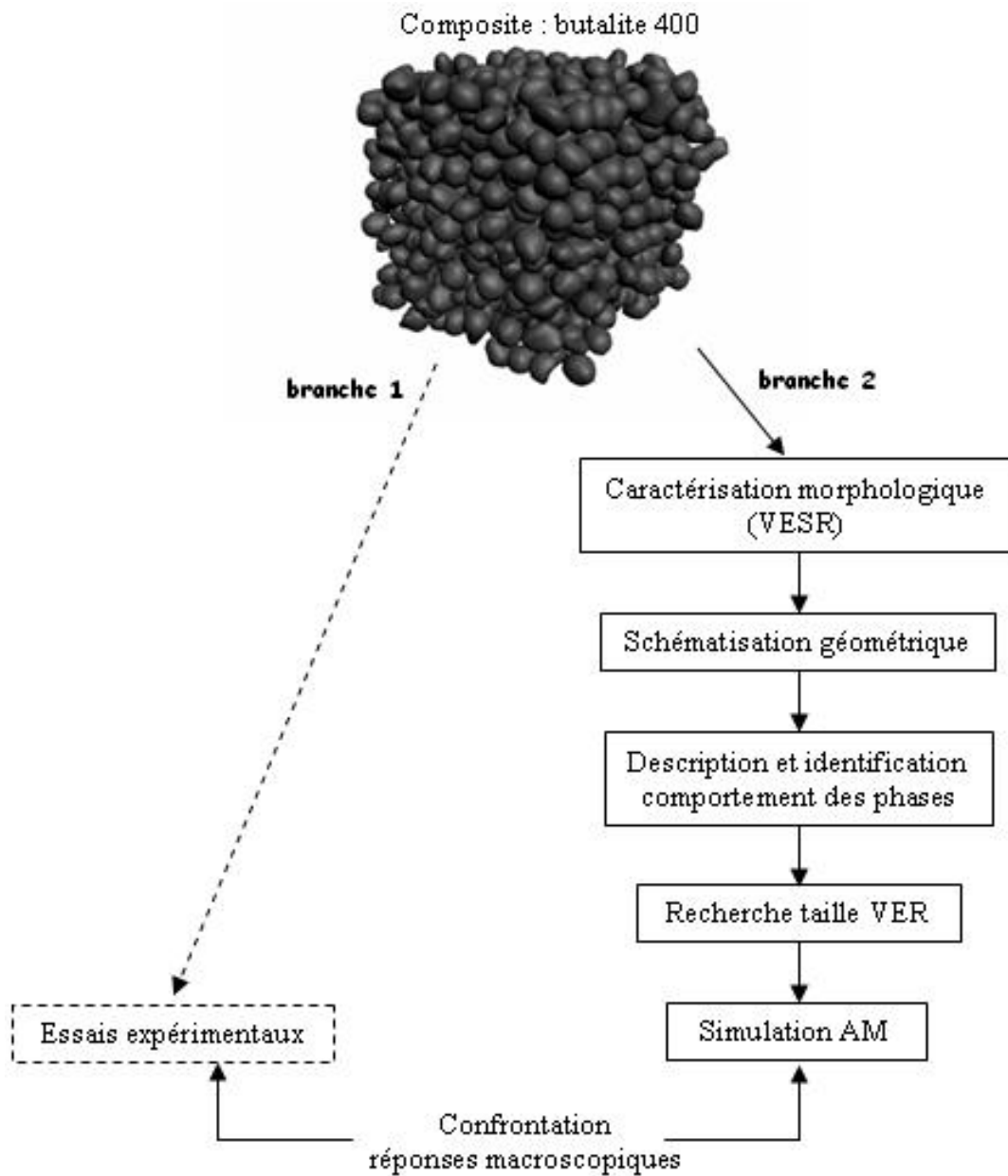


FIG. 5.1 – Marche à suivre pour faire une confrontation AM/résultats expérimentaux

5.3 Essais de compression triaxiale sur la butalite 400

L'étude initiée par le CEG a pour objet de prévoir la vulnérabilité des composites énergétiques suite à des événements accidentels pouvant survenir lors de la manutention notamment. L'un des scénari possible concerne la chute d'objet (par exemple un marteau) sur un propulseur contenant du propergol. Un tel choc induit une onde de compression qui se propage dans le matériau et génère, loin du point d'impact, un état de chargement triaxial

compressif (i.e. une compression uniaxiale superposée à de fortes pressions hydrostatiques) dont il faut pouvoir quantifier les conséquences sur l'intégrité du matériau. C'est pourquoi nous focalisons notre attention en priorité sur des essais de compression triaxiale.

5.3.1 Dispositif expérimental et déroulement d'un essai

Des essais de compression « triaxiale » (en réalité axisymétrique) sur la butalite 400 ont été effectués au CEG par Michel Labrunie (responsable du laboratoire des explosifs), dans un local particulier répondant aux normes de sécurité propres aux matériaux dangereux tels que les explosifs.

La presse utilisée est reportée sur la figure 5.2. Elle autorise l'application de pressions allant jusqu'à 2GPa (20 000 bars). L'échantillon, de forme cylindrique, est placé dans une nacelle (voir schéma sur la figure 5.3) et l'ensemble est lui-même plongé dans un pot de compression rempli de liquide moins compressible que l'échantillon (ici, il s'agit de DOZ : azélate de di-octyl).

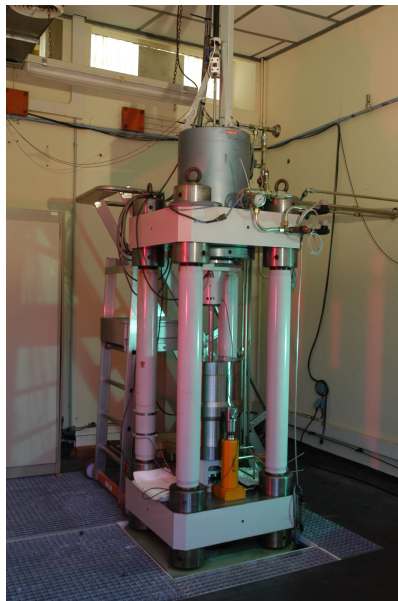


FIG. 5.2 – Presse triaxiale du CEG

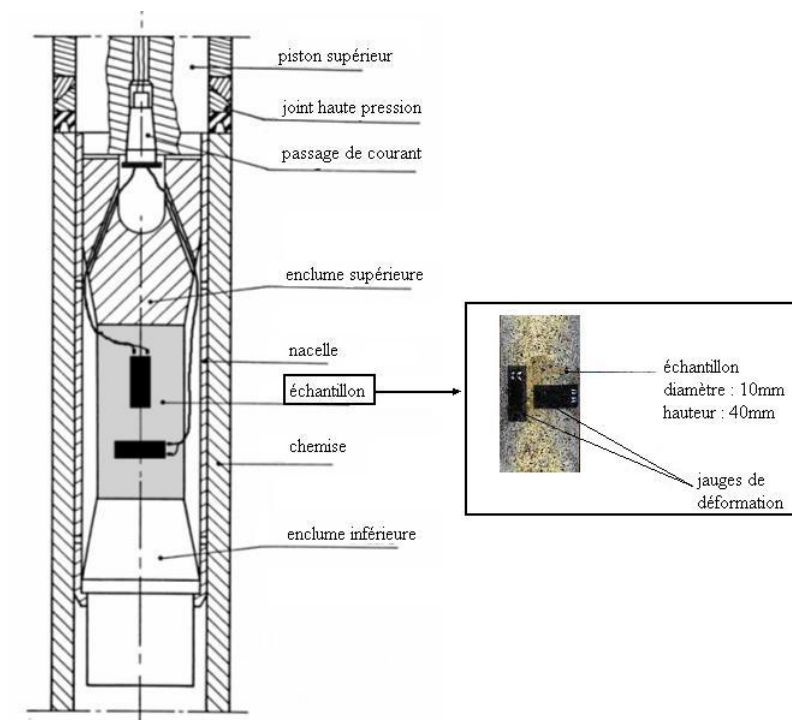


FIG. 5.3 – Porte-échantillon et échantillon utilisés pour les essais de compression triaxiale

Un essai compression triaxiale consiste à imposer à un échantillon une pression hydrostatique additionnée d'une compression axiale. En pratique, on opère en trois phases :

- Mise en pression ($t \leq t_1$) : le vérin inférieur de la machine d'essai est déplacé de manière à réduire le volume interne du pot de compression. Si ce piston arrive en bout de course avant que la pression désirée ne soit atteinte, le vérin supérieur prend le relais. La pression interne est mesurée par un capteur de pression situé en bas du dispositif. A ce stade, l'échantillon est dans un état de compression hydrostatique.
- Régulation ($t \in [t_1; t_2]$) : la nacelle contenant l'échantillon est descendue jusqu'à ce qu'elle touche le socle du pot de compression. En même temps, la pression dans l'enceinte doit rester constante. Les deux vérins (supérieur et inférieur) descendent donc simultanément.
- Compression axiale additionnelle ($t \geq t_2$) : une fois que le porte-échantillon est en contact avec l'enclume inférieure, le déplacement de la traverse haute est imposé si bien que l'échantillon subit une compression additionnelle (dans la direction verticale).

Un tel essai est représenté par le gradient de transformation macroscopique suivant (pour

une compression additionnelle dans la direction 1) :

$$\mathbf{F}^{comp-triax} = \begin{pmatrix} \alpha+\gamma & 0 & 0 \\ 0 & \alpha & 0 \\ 0 & 0 & \alpha \end{pmatrix} \quad (5.1)$$

Avec $\gamma = 0$ tant que $t < t_2$.

Pour tous les essais présentés dans ce qui suit, la mise en pression a été effectuée à une vitesse de $400 \text{ bars} \cdot \text{min}^{-1}$ et la compression additionnelle à $13 \mu\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$.

5.3.2 Résultats

Des jauges extensométriques ont préalablement été collées sur l'échantillon (voir figure 5.3). Elles permettent de relever tout au long de l'essai les déformations longitudinale et transverse subies par l'échantillon.

Au cours de la phase de compression hydrostatique, la courbe pression/déformation volumique $P = f(\frac{\Delta V}{V_0})$ permet de récupérer le module de compressibilité K du composite : $K = -\frac{\partial f}{\partial(\frac{\Delta V}{V_0})}$. P est la pression exercée sur l'échantillon (mesurée par un capteur, cf. plus haut). La déformation volumique $\frac{\Delta V}{V_0}$ est déduite des mesures de déformations longitudinale et transverse relevées par les jauges, sous l'hypothèse d'isotropie.

La courbe finalement obtenue est portée sur la figure 5.4.

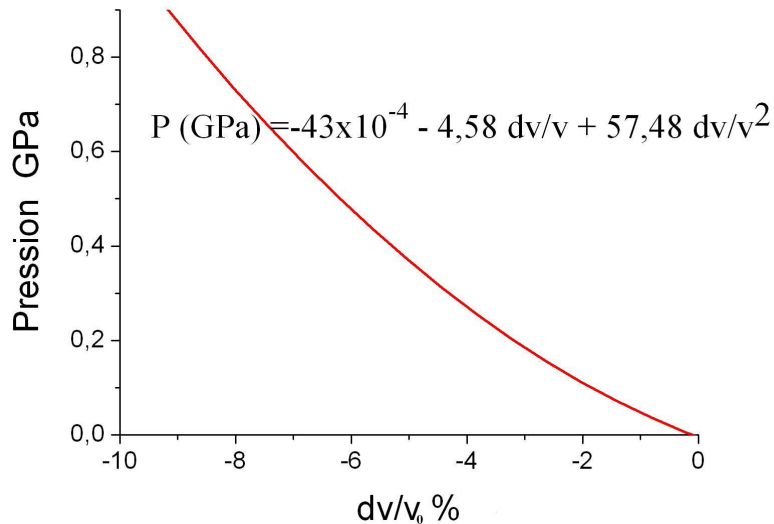


FIG. 5.4 – Courbe pression/variation relative de volume de la butalite 400

Sur la figure suivante 5.5 on a porté les courbes donnant les évolutions de $\frac{\Delta V}{V_0}$ en fonction du temps relevées au cours d'essais de compression triaxiale à différents niveaux

de pression de confinement (allant de 100 à 600 MPa). Sur chacune de ces courbes, le plateau correspond à la phase de régulation. A la fin des courbes on peut constater des évolutions chaotiques dont il ne faut pas tenir compte. Ces dernières sont dues au fait que l'échantillon est subitement libéré à la fin de l'étape de compression.

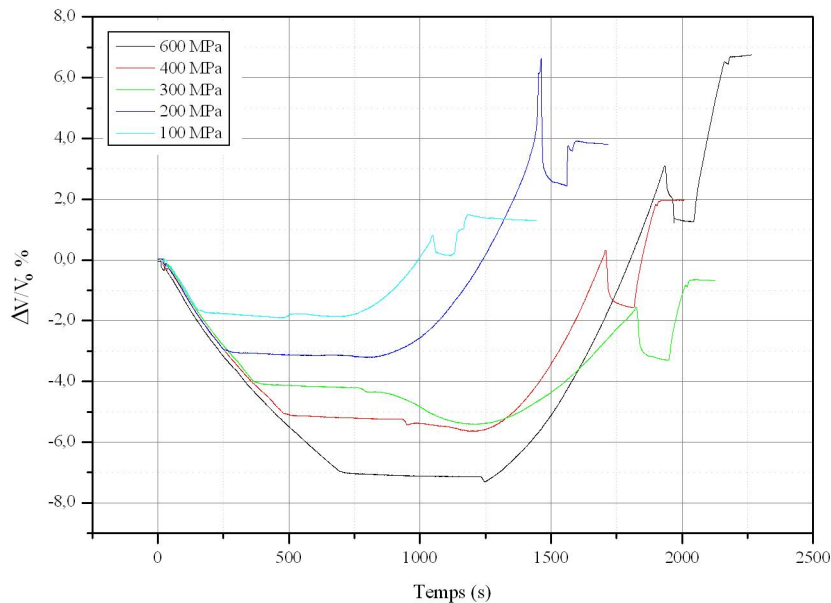


FIG. 5.5 – Courbes $\frac{\Delta V}{V_0}$ /temps obtenues au cours de compressions triaxiales à différentes pressions de confinement sur des échantillons de butalite 400

Les paragraphes suivants (5.4 à 5.7) détaillent les différentes étapes à franchir pour pouvoir simuler, par l'AM, les essais de compression triaxiale que nous venons de présenter. La première étape (voir la branche 2 du schéma 5.1) concerne la caractérisation morphologique du matériau retenu.

5.4 Caractérisation morphologique - Définition du Volume Elementaire Statistiquement Représentatif de la morphologie

Pour pouvoir aborder l'étape de schématisation géométrique relative à l'AM il est préalablement nécessaire de caractériser la morphologie du composite étudié et d'en définir un VESR. En effet, comme nous l'avons rappelé au paragraphe 1.3.2, le VER mécanique (à partir duquel les propriétés macroscopiques peuvent être estimées) est de taille au moins égale à celle du VESR.

A cet effet, des images bidimensionnelles de la butalite 400 ont tout d'abord été réalisées au CEG par microtomographie aux rayons X. Le microtomographe utilisé, de marque Skyscan, possède une tension maximale de 100kV et les caractéristiques résumées dans le tableau 5.1 suivant.

Dimension maximale d'un échantillon	20mm×40mm (diamètre×hauteur)
Résolution spatiale optimale	5 μ m
Détection de détail	<1.8 μ m
Temps d'intégration d'une image	100ms à 10s

TAB. 5.1 – Caractéristiques du microtomographe du CEG

Plusieurs échantillons de butalite 400 (10mm×40mm) ont été tomographiés avec une résolution de 8 μ m. La reconstitution tridimensionnelle du matériau à partir des images bidimensionnelles (782 par échantillon) a nécessité la mise en place d'outils adaptés, en collaboration avec D. Jeulin du Centre de Morphologie Mathématique de l'école des Mines de Paris [JCF⁺07]. Ce fut un travail long, complexe et coûteux en terme de capacité informatique, mais les outils développés pourront être utilisés pour d'autres composites. A titre illustratif, la figure 5.6 présente une image tridimensionnelle contenant environ 1200 grains de la butalite 400 après reconstruction.

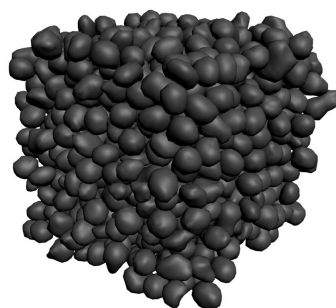


FIG. 5.6 – Image microtomographique de la butalite 400 (contenant environ 1200 grains)

Une analyse morphologique 3D complète est en cours de réalisation sur des images de taille croissante afin de déterminer la taille et les caractéristiques du VESR. Un maximum d'information doit être tiré de cette étude : tailles et formes des grains, positions de leurs centroïdes, orientations locales privilégiées... A titre d'exemple des résultats déjà répertoriés, le spectre granulométrique et le diagramme d'anisotropie de la butalite 400 sont

présentés sur la figure 5.7. On peut constater (figure 5.7 a)) la faible dispersion de la taille des grains autour d'une valeur moyenne de $400\mu m$ (d'où l'appellation « butalite 400 ») ainsi que le caractère initialement isotrope de ce matériau traduit par une covariance identique dans les trois directions (voir 5.7 b); cf. [JCF⁺07] pour les détails).

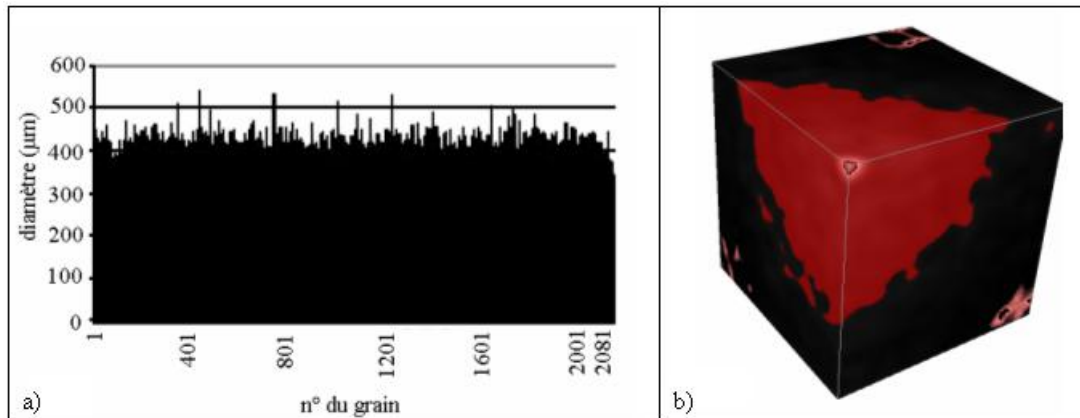


FIG. 5.7 – a) Spectre granulométrique et b) Covariance spatiale de la butalite 400

5.5 Schématisation géométrique du matériau réel

5.5.1 Démarche adoptée et perspectives

Comme annoncé en introduction (voir paragraphe 5.1), compte-tenu de la faible dispersion granulométrique des charges contenues dans la butalite 400, nous choisissons d'utiliser dans un premier temps le principe de polyédrisation présenté au chapitre 2. Ce dernier permet de générer des volumes contenant des grains polyédriques de tailles à peu près égales satisfaisant les critères de la schématisation géométrique proposée par Christoffersen.

Partant d'un volume V_1 de la butalite 400, il suffit de placer les sphères initiales aux centroïdes des grains de V_1 et de revenir, après polyédrisation de l'espace par croissance des sphères, à la concentration souhaitée (voir paragraphe 2.4.2 pour mémoire). A titre d'illustration, on a reporté sur la figure 5.8 un volume cubique de butalite 400 contenant 682 grains et le volume polyédrisé associé obtenu selon le principe précédent.

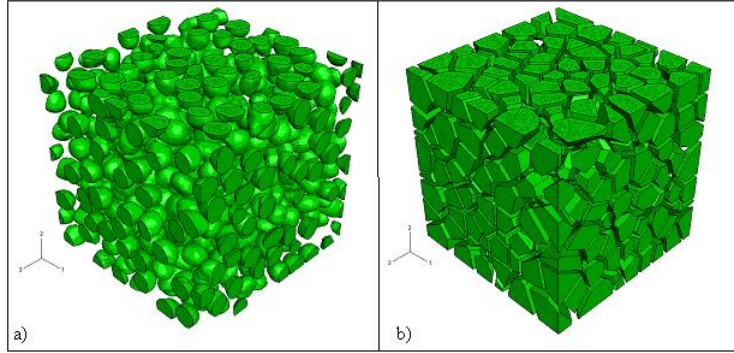


FIG. 5.8 – a) Volume de butalite 400 contenant 682 grains et b) volume polyédrisé associé par la méthode de croissance de sphères (voir chapitre 2, paragraphe 2.4.2)

Il s’agit bien entendu d’une schématisation très approximative de la morphologie réelle puisqu’en procédant de la sorte, les seuls liens entre le volume schématisé et le volume de butalite sont la concentration volumique de charges et la répartition spatiale des centroïdes des grains. Aussi, que ce soit pour la butalite 400 ou pour tout autre composite, il sera nécessaire de développer une technique de polyédrisation optimisée afin de conférer le maximum de représentativité aux paramètres morphologiques de l’AM tout en assurant la condition de compatibilité qui en constitue un critère d’applicabilité (voir paragraphes 2.2.3 et 2.3.4). L’annexe D donne quelques pistes concernant l’optimisation de la schématisation géométrique.

Pour finir, soulignons que le procédé de polyédrisation en question devra également être automatisé. En effet, on prévoit de l’appliquer à des volumes de composite de taille croissante (à partir de celle du VESR) de manière à déterminer le VER mécanique relatif à l’AM. Nous en reparlerons plus loin (paragraphe 5.7).

Dans le paragraphe qui suit, nous sensibilisons le lecteur aux travaux de vérification qui devront suivre une fois que les deux étapes précédemment mentionnées seront franchies (définition du VESR et optimisation de la schématisation géométrique). Ces travaux doivent permettre de s’assurer que les volumes schématisés par la technique retenue représentent correctement le matériau réel.

5.5.2 Détails concernant la vérification de la représentativité des volumes schématisés

Comme évoqué au paragraphe précédent, le volume schématisé à retenir pour appliquer l’AM doit être le plus représentatif possible du matériau réel que l’on souhaite modéliser i.e. il doit en traduire correctement les principales caractéristiques (voir [FCJ⁺02]), en par-

ticulier en terme de concentration et de symétries.

Concernant le premier aspect cité (concentration), de nombreux auteurs (voir par exemple [FCJ⁺02, KFG⁺03, MS03b]) ont proposé différentes techniques de génération de microstructures aléatoires et ont été confrontés au problème suivant : d'un volume à un autre, les concentrations volumiques fluctuaient suffisamment pour être responsables de fluctuations sur les propriétés macroscopiques. Ces auteurs ont donc dû multiplier le nombre de réalisations pour une concentration donnée afin de travailler avec des moyennes significatives permettant de s'affranchir de ce problème. A l'inverse, les volumes générés selon le principe retenu au paragraphe 5.5.1 auront forcément la concentration souhaitée puisque la dernière étape (homothétie globale) est effectuée jusqu'à ce que la concentration voulue soit atteinte. Avec une telle méthode il n'y a donc pas de fluctuation de concentration d'un volume à un autre.

Cependant, on a signalé plus haut la nécessité de proposer une nouvelle technique de schématisation permettant d'intégrer des informations supplémentaires et d'être plus proche de la microstructure réelle. Selon le procédé de schématisation proposé, il sera donc peut-être nécessaire de faire une étude de concentration comme dans les travaux de [FCJ⁺02, KFG⁺03, MS03b].

Concernant le second aspect cité (symétrie), la butalite 400 est un matériau isotrope (voir paragraphe 5.4). A l'issue de l'étape de schématisation, il faudra donc s'assurer que les volumes générés sont également isotropes. On pourra suivre la démarche suivante que nous avons mise en œuvre pour vérifier l'isotropie des volumes à grains polyédriques générés au paragraphe 2.4.2.

On rappelle que la notation réduite orthonormée d'un tenseur des modules élastiques d'un matériau isotrope est de la forme suivante (voir [SB01]) :

$$\mathbf{C}^{iso} = \begin{pmatrix} \lambda + 2\mu & \lambda & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda + 2\mu & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda & \lambda + 2\mu & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2\mu & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2\mu & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2\mu \end{pmatrix} \quad (5.2)$$

Avec λ et μ les coefficients d'élasticité de Lamé. Il faut donc vérifier que les formes réduites des tenseurs des modules effectifs des différents volumes générés par la méthode employée présentent bien cette forme.

Pour ce faire, les volumes V générés numériquement selon le principe exposé au paragraphe 2.4.2 du chapitre 2 ont été soumis aux six chargements élémentaires définis par : $\bar{\epsilon}_{ij}^{kh} = \frac{1}{2}(\delta_{ik}\delta_{jh} + \delta_{ih}\delta_{jk})$ (δ symbole de Kronecker ; k et h variant de 1 à 3 ; $\bar{\epsilon}^{kh} = \bar{\epsilon}^{hk}$). A partir des

contraintes homogénéisés associées $\bar{\sigma}^{kh} = \langle \sigma^{kh} \rangle_V$ il est alors possible de reconstituer le tenseur des modules homogénéisés réduit C^{hom} . En effet, en notation réduite orthonormée on a :

$$\bar{\sigma}^{kh} = C^{hom} \cdot \bar{\epsilon}^{kh} \quad (5.3)$$

avec

$$\bar{\sigma}^{kh} = \begin{pmatrix} \bar{\sigma}_{11}^{kh} \\ \bar{\sigma}_{22}^{kh} \\ \bar{\sigma}_{33}^{kh} \\ \sqrt{2} \bar{\sigma}_{23}^{kh} \\ \sqrt{2} \bar{\sigma}_{31}^{kh} \\ \sqrt{2} \bar{\sigma}_{12}^{kh} \end{pmatrix} ; \quad \bar{\epsilon}^{kh} = \begin{pmatrix} \bar{\epsilon}_{11}^{kh} \\ \bar{\epsilon}_{22}^{kh} \\ \bar{\epsilon}_{33}^{kh} \\ \sqrt{2} \bar{\epsilon}_{23}^{kh} \\ \sqrt{2} \bar{\epsilon}_{31}^{kh} \\ \sqrt{2} \bar{\epsilon}_{12}^{kh} \end{pmatrix}$$

$$C^{hom} = \begin{pmatrix} C_{1111}^{hom} & C_{1122}^{hom} & C_{1133}^{hom} & \sqrt{2}C_{1123}^{hom} & \sqrt{2}C_{1131}^{hom} & \sqrt{2}C_{1112}^{hom} \\ C_{2211}^{hom} & C_{2222}^{hom} & C_{2233}^{hom} & \sqrt{2}C_{2223}^{hom} & \sqrt{2}C_{2231}^{hom} & \sqrt{2}C_{2212}^{hom} \\ C_{3311}^{hom} & C_{3322}^{hom} & C_{3333}^{hom} & \sqrt{2}C_{3323}^{hom} & \sqrt{2}C_{3331}^{hom} & \sqrt{2}C_{3312}^{hom} \\ \sqrt{2}C_{2311}^{hom} & \sqrt{2}C_{2322}^{hom} & \sqrt{2}C_{2333}^{hom} & 2C_{2323}^{hom} & 2C_{2331}^{hom} & 2C_{2312}^{hom} \\ \sqrt{2}C_{3111}^{hom} & \sqrt{2}C_{3122}^{hom} & \sqrt{2}C_{3133}^{hom} & 2C_{3123}^{hom} & 2C_{3131}^{hom} & 2C_{3112}^{hom} \\ \sqrt{2}C_{1211}^{hom} & \sqrt{2}C_{1222}^{hom} & \sqrt{2}C_{1233}^{hom} & 2C_{1223}^{hom} & 2C_{1231}^{hom} & 2C_{1212}^{hom} \end{pmatrix}$$

Par conséquent, lorsque le composite est soumis au chargement élémentaire $\bar{\epsilon}^{11}$ le calcul de $\bar{\sigma}^{11}$ permet de reconstituer la première colonne de C^{hom} (car seul $\bar{\epsilon}_{11}^{11}$ est non nul et vaut 1). De même, l'application du chargement élémentaire $\bar{\epsilon}^{22}$ permet de constituer la deuxième colonne de C^{hom} via $\bar{\sigma}^{22}$, etc...

Nous observons que la forme de C^{hom} ainsi obtenue sur les différents volumes présentés au chapitre 2 est d'autant plus proche de la forme (5.2) que le volume considéré est grand. Par exemple, pour un volume contenant 400 grains élastiques (module d'Young $E^g = 420\text{GPa}$ et coefficient de Poisson $\nu^g = 0.2$) baignant dans une matrice également élastique (module

d'Young $E^m = 70\text{GPa}$ et coefficient de Poisson $\nu^m = 0.3$) nous avons obtenu :

$$C^{hom_400grains} = \begin{pmatrix} 273\ 508 & 72\ 124 & 71\ 879 & 0 & 0 & 0 \\ 72\ 125 & 273\ 389 & 72\ 620 & 0 & 0 & 0 \\ 71\ 879 & 72\ 620 & 273\ 327 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 192\ 420 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 190\ 478 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 191\ 092 \end{pmatrix} \quad (5.4)$$

Remarque : En réalité les composantes représentées par des 0 dans (5.4) ne sont pas exactement nulles : elles sont de l'ordre de 10 ou 100 au maximum, ce qui est négligeable vis-à-vis de l'ordre de grandeur des autres composantes.

Ces travaux prouvent que les volumes générés numériquement au paragraphe 2.4.2 sont bien isotropes. Ainsi, partant de la distribution aléatoire réelle des centroïdes au sein de la butalite 400, la méthode de croissances de sphères fournira sans doute des volumes isotropes. Cela reste toutefois à confirmer.

La démarche présentée ici est directement applicable à une série de volumes générés d'une autre façon. Signalons enfin qu'une étude morphologique analogue à celle réalisée sur matériau réel (paragraphe 5.4) constituerait une autre façon de nous renseigner sur la représentativité du volume schématisé retenu pour finalement appliquer l'AM.

5.6 Description et identification du comportement des phases

5.6.1 Introduction

La troisième étape à effectuer pour pouvoir estimer le comportement macroscopique de la butalite 400 avec l'AM consiste à modéliser le comportement mécanique des constituants (voir figure 5.1). Les modèles de comportement doivent répondre à un compromis de taille. D'une part, il est nécessaire d'utiliser des modélisations efficaces dans la gamme de sollicitation prévue (qui peut elle-même être difficilement identifiable, voir plus loin) afin de minimiser les écarts entre courbes expérimentales et réponses calculées. D'autre part, les paramètres introduits dans les modélisations doivent être à la fois le plus directement identifiables et le moins nombreux possible.

Les deux volets de ce compromis présentent des difficultés particulières. En ce qui concerne le premier, nous avons mentionné qu'il serait bienvenu de se faire au préalable une idée précise des sollicitations locales et de cibler les gammes de vitesses et les domaines de déformation sur lesquels caractériser le comportement (en particulier celui de la matrice, bien

plus souple que les grains). Or, les techniques de mesure actuelles ne permettent pas encore d'avoir accès aux champs locaux *in situ*. Dans un composite à microstructure aléatoire, on peut évidemment s'attendre à ce que les états de chargement locaux soient très complexes i.e. qu'ils induisent aussi bien des élongations que du cisaillement au sein de la matière. Il faut donc multiplier les essais pour caractériser au mieux les différents états de déformation. En pratique, cela doit être fait en réalisant différents types d'essais impliquant des états de déformation simples i.e. homogènes et/ou accessibles analytiquement [BOU06] : traction (uniaxiale, biaxiale, equibiaxiale), glissement simple ou pur, double cisaillement, essais hydrostatiques.

Concernant le second volet du compromis, l'identification des paramètres intervenant dans le modèle retenu est également une étape délicate. Au cours de cette dernière, nous sommes amenés à chercher le jeu de paramètres permettant de représenter au mieux les courbes obtenues expérimentalement, mais en général la solution n'est pas unique. Il est maintenant reconnu que, pour être représentative, une loi hyperélastique (même la plus simple) doit être identifiée sur une large gamme d'essais qui ne doit pas se limiter aux seuls essais permettant en théorie l'identification [HD97]. D'autre part, nous avons mentionné au paragraphe 3.3.1 du chapitre 3 les problèmes de stabilité matérielle dont il faut s'inquiéter. Il est donc nécessaire -dans la mesure du possible- de vérifier l'adéquation d'un jeu de paramètres non seulement vis-à-vis des résultats expérimentaux mais aussi vis-à-vis de la stabilité matérielle. Certains auteurs ont proposé des méthodes permettant de mener simultanément l'identification des paramètres et la stabilité matérielle pour plusieurs lois de comportement hyperélastiques (cf. par exemple la thèse de Lejeunes [LEJ06]).

Dans ce qui suit nous présentons le dispositif expérimental et les résultats des essais de traction réalisés avec Sylvie Castagnet (chargée de recherches au LMPM) sur le liant de la butalite 400 (polybutadiène). Comme nous l'avons mentionné précédemment, un seul essai n'est pas suffisant pour caractériser ni même identifier la part hyperélastique du comportement du liant (voir une illustration dans la thèse de Martinez [MAR05] p. 93 et suivantes). Nous présentons donc en perspective les autres essais prévus sur le polybutadiène de la butalite de manière -entre autres- à finir de caractériser la part réversible du comportement.

Remarque : Nous avons mentionné au chapitre 4 que différents essais avaient été réalisés en 1997 sur le polybutadiène intervenant dans la composition du « matériau gris » (voir paragraphe 4.2.3). On a pu observer dans la littérature une forte dispersion des propriétés mécaniques d'un liant élastomère tel que le polybutadiène. Ceci est lié à la formulation du liant qui contient plus ou moins d'additif. Il nous a donc paru plus rigoureux de lancer une campagne de caractérisation du polybutadiène utilisé dans la confection de la butalite 400.

5.6.2 Essais de traction quasi-statiques

Des essais de traction sur éprouvettes de polybutadiène de type haltère (longueur utile $l_0 = 60\text{mm}$, voir figure 5.9) ont été réalisés au LMPM sur une machine électromécanique de marque INSTRON dont la cellule de force a une capacité de 500N. L'échantillon, pincé entre deux mors, a été allongé par le déplacement de la traverse inférieure solidaire du mors bas. Pour relever les déformations axiale et transverse mésoscopiques dans la zone utile de l'éprouvette au cours de l'essai, nous avons utilisé le capteur optique vidéotraction[®]. Ce dernier repère à chaque instant les mouvements de quatre taches peintes sur l'éprouvette (voir figure 5.9). Un tel dispositif est avantageux pour des matériaux mous (tels que les élastomères) dans lesquels la déformation n'est pas seulement accomodée par la partie utile de l'éprouvette mais est bien répartie sur son ensemble (i.e. la déformation des têtes de l'éprouvette n'est pas négligeable comme nous le montrerons plus loin). A l'issue d'un essai, nous avons donc grâce au dispositif vidéotraction[®] accès aux contraintes et déformations « mésoscopiques », dans la zone utile de l'éprouvette.

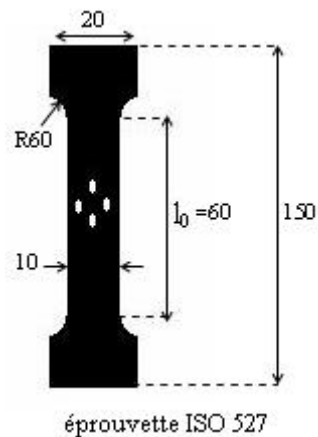


FIG. 5.9 – Eprouvette de traction

L'objectif de ces essais était de récupérer une courbe contrainte/déformation nominales représentative de l'hyperélasticité en traction du polybutadiène utilisé comme liant dans la butalite 400.

Sur la courbe 5.10 nous avons reporté les résultats d'un essai de charge-décharge réalisé à une vitesse de traverse de 3.6 mm/min (courbe verte). La quasi-superposition des courbes de charge et de décharge montre qu'à une telle vitesse de sollicitation il n'y a pas d'effet visqueux i.e. que l'éprouvette est sollicitée dans le domaine hyperélastique. Sur cette même figure, nous avons également placé les résultats d'un essai de traction conduit à la même vitesse (soit $0.1\%s^{-1}$ en terme de vitesse de déformation), jusqu'à rupture, sur un nouvel échantillon (courbe bleue). On observe une excellente reproductibilité de l'essai précédent.

On peut remarquer qu'en traction les déformations restent modérées (cf. figure 5.10 : l'éprouvette casse à 75% de déformation nominale). Elles restent, pour cet essai, dans le domaine de validité reconnu de la loi de Mooney-Rivlin (jusqu'à 150% environ). En revanche, les chargements de compression triaxiale envisagés sur le composite engendreront nécessairement de fortes pressions au sein de la matrice. Aussi, nous ne pourrions pas nous contenter de la loi pression/volume linéaire utilisée pour les simulations effectuées aux chapitres 3 et 4.

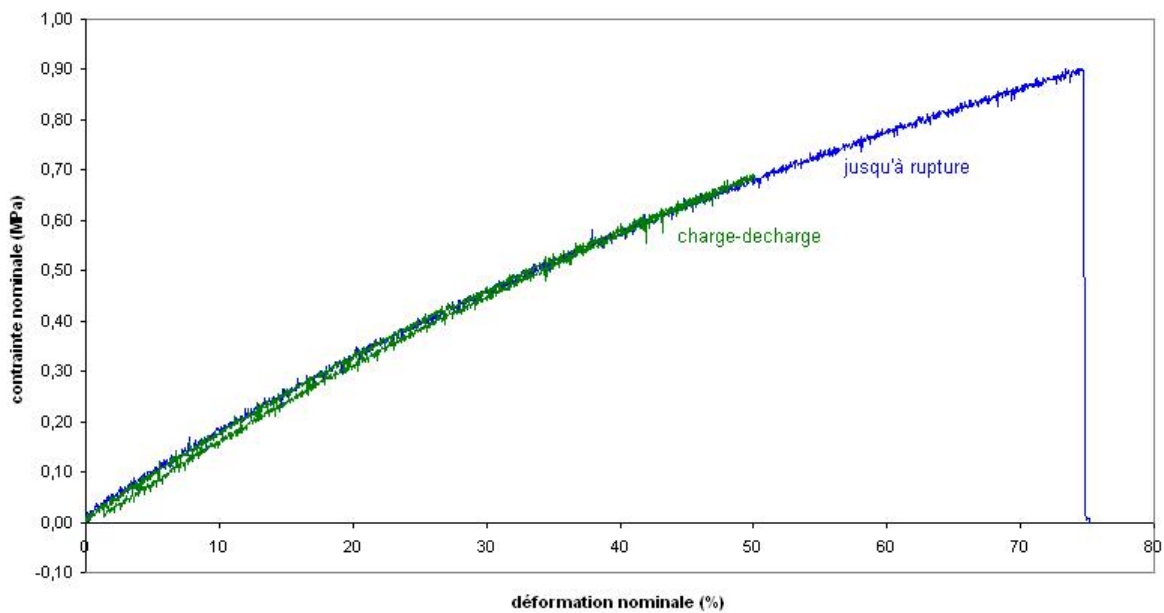


FIG. 5.10 – Courbes contrainte nominale/déformation nominale obtenues à partir d'essais de traction quasi-statiques sur éprouvettes de polybutadiène

Pour finir, nous souhaitons nous arrêter sur une difficulté rencontrée lors de la réalisation d'essais mécaniques sur un matériau mou. Sur la figure 5.11, nous avons superposé les déformations nominales axiales macroscopique et mésoscopique relevées au cours d'un essai. Par « macroscopique », nous entendons la déformation nominale calculée directement à partir du déplacement de la traverse alors que la déformation « mésoscopique » est calculée par le dispositif vidéotraction[®] i.e. à partir du déplacement des tâches peintes sur la zone utile de l'éprouvette.

Les différences observées entre ces deux courbes montrent que contrairement à ce qu'il se passe pour un matériau dur, les déformations dans les têtes de l'éprouvette ne sont ici pas négligeables. En affectant à la zone utile la déformation macroscopique nous ne traduirions pas correctement ce que voit effectivement la zone utile. Cette remarque illustre l'une des difficultés liées à la réalisation et à l'interprétation des essais mécaniques sur des matériaux

tels que les élastomères (voir aussi [FUN07]).

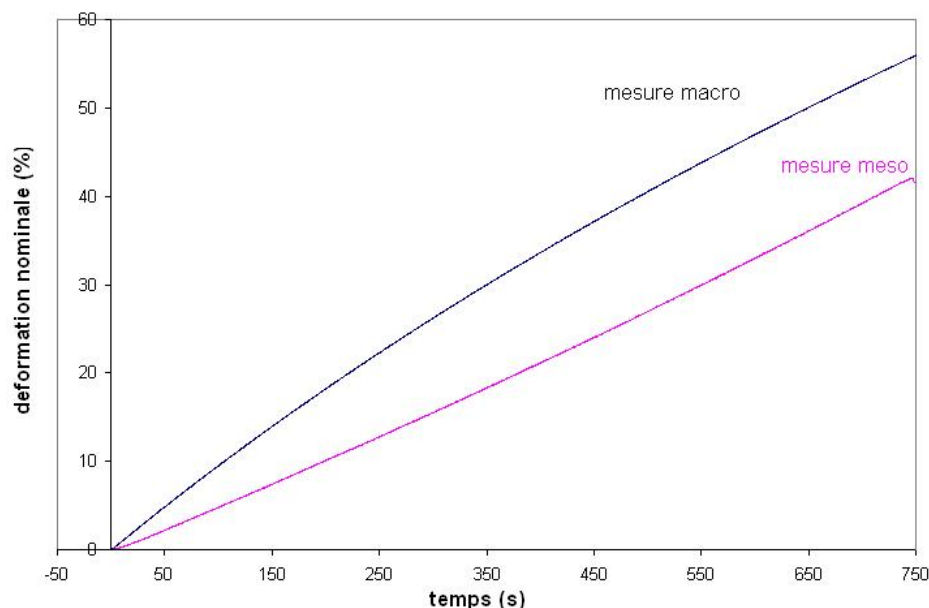


FIG. 5.11 – Superposition des déformations nominales macroscopique et mésoscopique mesurées au cours du temps lors d'un essai de traction

5.6.3 Perspectives

En guise de perspectives concernant cette partie du travail, il est nécessaire de compléter les essais sur le polybutadiène pour continuer de caractériser la part hyperélastique de son comportement (glissement...). Cela permettra de choisir une loi hyperélastique adaptée et de constituer la banque de données nécessaire à son identification. Soulignons que l'enrichissement de la loi hyperélastique, notamment sa part volumique, ne posera pas de problème particulier dans la mesure où nous avons pu montrer que l'AM est apte à traiter des comportements complexes (voir l'application à la viscohyperélasticité faite au chapitre 2).

D'autre part, il sera nécessaire également d'effectuer des essais pour caractériser la viscoélasticité de ce matériau. Les difficultés soulignées dans le paragraphe précédent sont à prévoir également pour cette partie du travail. En effet, en grandes déformations, il sera difficile de soumettre la matière à une large gamme de vitesses de sollicitation compte tenu des problèmes illustrés sur la figure 5.11 : la vitesse de déformation mésoscopique est plus faible que la vitesse de déformation macroscopique. Par ailleurs, l'identification d'une loi viscoélastique en grandes déformations est un problème actuel, auxquelles les techniques habituellement utilisées en petites déformations (exemple : DMA) ont du mal à répondre. Il sera également bienvenu d'effectuer des essais pour caractériser le comportement des

grains présents dans la butalite 400 puisque les données répertoriées dans la littérature sont très différentes (voir [TDLM99, FUN07]).

5.7 Recherche du VER mécanique relatif à l'AM

5.7.1 Introduction

Reprenons le schéma 5.1 résumant le principe de la confrontation. Après avoir schématisé le matériau, il est nécessaire de déterminer la taille du VER mécanique associé à l'approche. Comme nous l'avons mentionné à plusieurs reprises, il n'existe pas à l'heure actuelle de critère universel permettant de la connaître a priori [FCJ⁺02, KFG⁺03]. Elle dépend de la méthode d'estimation, de la nature des constituants (comportement et contraste des propriétés) et de la propriété à estimer. L'étape de recherche du VER relatif à une approche donnée présente pour ces raisons une difficulté majeure.

Concernant l'AM, le volume schématisé à partir duquel pourront être estimées les propriétés macroscopiques doit satisfaire les critères suivants :

- Etre de taille au moins égale à celle du VESR morphologique du composite considéré.
- Etre représentatif de la morphologie réelle.
- Satisfaire la condition de compatibilité (voir paragraphes 2.2.3 et 2.3.4). Rappelons que la condition de compatibilité dépend des paramètres morphologiques identifiés après polyédrisation. Ainsi, les problèmes d'optimisation de la schématisation géométrique et de recherche du VER sont couplés.
- Garantir la stabilité des propriétés à estimer (exemple : la réponse macroscopique à un essai de compression triaxiale).

Pour déterminer la taille du VER mécanique relatif à l'AM, il sera nécessaire de tester des volumes schématisés de taille croissante, à partir de celle du VESR, jusqu'à satisfaire les critères précédents.

A titre d'illustration, nous procédons dans ce qui suit à une étude préliminaire visant à estimer la taille du VER relatif à l'AM pour les composites générés par croissance de sphères au chapitre 2 dans le cas simplifié de phases élastiques linéaires isotropes. La méthode employée est celle proposée par Kanit et al. [KFG⁺03]. Elle pourra directement être utilisée pour estimer la taille du VER associé aux volumes générés par croissance de sphères depuis la répartition spatiale réelle des grains de la butalite 400. Plus généralement, elle pourra être appliquée dans le cas d'une schématisation géométrique optimisée, en vue de tester la stabilité des propriétés à estimer.

5.7.2 Recherche du VER des volumes polyédrisés par croissance de sphères - cas de l'élasticité linéaire

Nous reprenons les séries de volumes de différentes tailles (75 grains, 150 grains, etc...) présentées au paragraphe 2.4.2. Cette fois, nous supposons que les grains et la matrice sont élastiques linéaires, définis par les modules E^m , ν^m , E^g et ν^g donnés au paragraphe 5.5.2. Rappelons que la condition de compatibilité est satisfaisante pour les volumes à 75 grains (voir les faibles écarts observés entre \mathbf{F} et $\langle \mathbf{f} \rangle_{V_0}$ détaillés au paragraphe 2.4.5) et qu'elle l'est d'autant plus que la taille des volumes augmente (paragraphe 2.4.2).

Pour chaque volume, nous avons calculé les modules homogénéisés d'Young (E^{macro}) et de cisaillement (μ^{macro}) à partir des tenseurs de modules homogénéisés que nous avons formés au paragraphe 5.5.2. Ces deux paramètres sont suffisants pour décrire le comportement homogénéisé des volumes puisque ces derniers sont isotropes comme nous l'avons montré au paragraphe 5.5.2.

Sur la figure 5.12, nous avons porté les résultats obtenus. Les bornes de Voigt (déformations uniformes dans le composite) et de Reuss (contraintes uniformes dans le composite) prévoient respectivement des modules compris entre 187 GPa et 333 GPa pour le module d'Young et entre 74 GPa et 138 GPa pour le module de cisaillement. Ces dernières, encadrant largement les résultats obtenus par l'AM, n'ont pas été portées sur les courbes de manière à ne pas les écraser. Nous observons que les modules tendent vers une valeur finale au fur et à mesure que le nombre de grains considéré augmente. D'autre part, la dispersion semble s'amenuiser avec l'augmentation des volumes, mais cela reste à confirmer avec d'autres simulations (nous n'avons pas considéré le même nombre de réalisations dans les différentes tailles de volume testées).

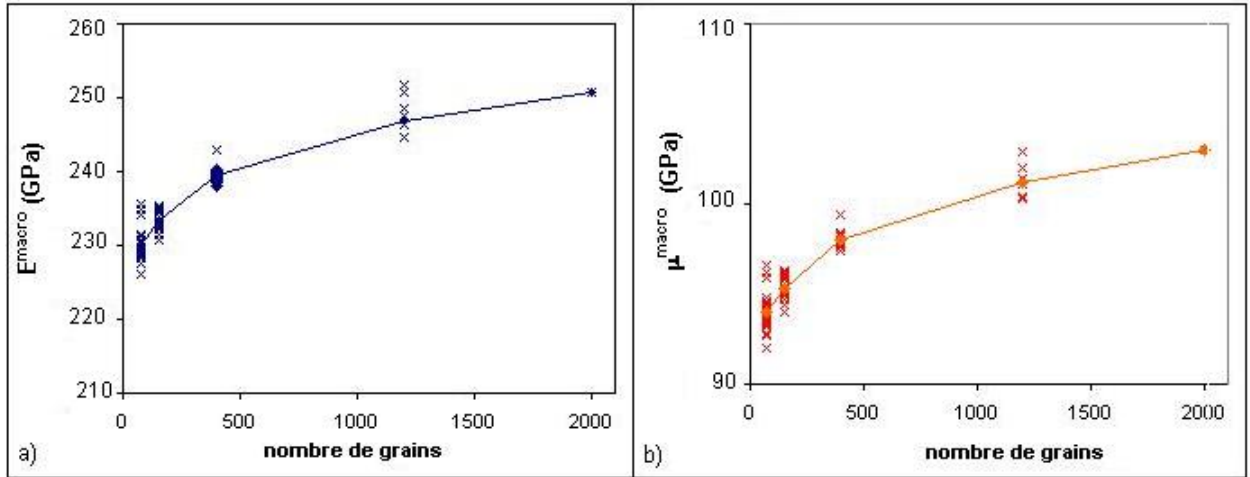


FIG. 5.12 – Modules macroscopiques estimés par l’AM sur volumes polyédriques de différentes tailles (i.e. à différents nombres de grains) générés numériquement a) modules d’Young; b) modules de cisaillement

Sur la figure 5.13, nous avons mis les écarts relatifs suivants :

$$ER = \frac{M_{moy}^{macro} - M_{2000_grains}^{macro}}{M_{2000_grains}^{macro}} \quad (5.5)$$

M_{moy}^{macro} représente le module (E^{macro} ou μ^{macro}) moyen obtenu sur différents volumes d’une taille donnée (75 grains, 150 grains, 400 grains ou 1200 grains) et $M_{2000_grains}^{macro}$ le module obtenu sur un volume à 2000 grains (une seule réalisation).

Les écarts relatifs sont d’autant plus faibles que le volume est grand, ce qui est conforme à ce que l’on attendait. Si l’on s’autorise 10% d’écart relatif sur les propriétés macroscopiques le VER -qui assure la stabilité des propriétés élastiques homogénéisées- semble donc se situer autour de 75 grains en élasticité HPP. Pour un fort contraste et une non linéarité de comportement des phases il faut s’attendre à ce que le VER soit plus grand [FCJ⁺02, KFG⁺03].

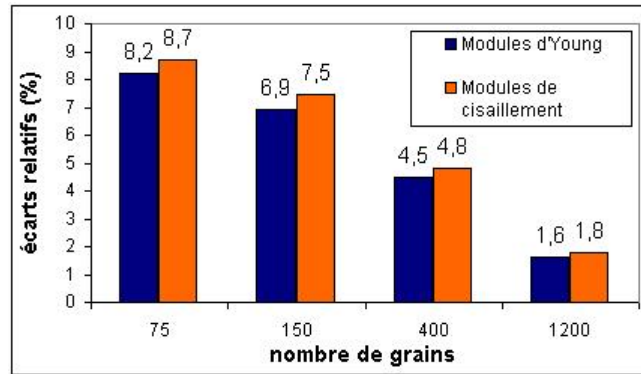


FIG. 5.13 – Ecart relatifs sur les modules homogénéisés par l'AM de volumes polyédriques de différentes tailles (référence : modules d'un volume à 2000 grains)

Comme nous l'avons mentionné en introduction, on pourra utiliser cette approche inspirée des travaux de Kanit et al. [KFG⁺03] une fois que l'étape de schématisation géométrique aura été optimisée. La démarche présentée est lourde compte-tenu du nombre de simulations qu'elle implique, mais elle constitue -à notre connaissance- le seul moyen disponible à l'heure actuelle pour tester la stabilité d'une propriété à estimer.

5.8 Premières confrontations expérience/calculs numériques

5.8.1 Comparaison expérience/AM

En guise de première application, bien que les différentes étapes que nous venons de présenter ne soient pas terminées aujourd'hui, nous proposons de simuler par l'AM la première phase d'un essai de compression triaxiale i.e. la phase de mise en pression hydrostatique (voir paragraphe 5.3.1), jusqu'à 600MPa.

L'AM est donc mise en œuvre sur un volume polyédrique de Butalite 400 selon le principe exposé au paragraphe 5.5.1 contenant environ 150 polyèdres. Ce dernier est soumis au gradient de transformation (5.1) avec $\gamma=0$ et α relié à la déformation ϵ mesurée expérimentalement par : $\alpha = \epsilon + 1$. Le comportement de la matrice est décrit par une loi de Mooney-Rivlin compressible dont les coefficients $C_{10} = 0.0114\text{MPa}$ et $C_{01} = 0.021\text{MPa}$ ont été identifiés à partir d'un essai de traction (cf. paragraphe 5.6) et le module de compressibilité à partir d'un essai de compression hydrostatique sur polybutadiène (essai réalisé au CEG) ; la réponse volumique n'étant pas linéaire, nous avons pris pour cette première

simulation un module moyen de 7GPa. Le contraste entre grains et matrice a quant à lui été pris égal à 100.

Les pressions hydrostatiques macroscopiques expérimentale (mesurée par un capteur de pression cf. paragraphe 5.3.1) et estimée par l'AM sont portées sur la figure 5.14, en fonction du facteur de charge α . Conformément à ce que l'on attendait compte-tenu des fortes simplifications que nous avons faites, on constate que la réponse estimée par l'AM est beaucoup plus rigide que la réponse expérimentale. On peut lister trois candidats responsables de l'écart ainsi observé :

- La description et l'identification du comportement des phases grain et matrice, qui sont loin d'être optimisées (cf. paragraphe 5.6).
- Les schématisations géométriques et cinématiques postulées dans l'AM, qui constituent une simplification du problème réel.
- La taille du volume sur lequel on a mis en œuvre l'AM, qui est sans doute éloignée de celle du VER relatif à l'AM.

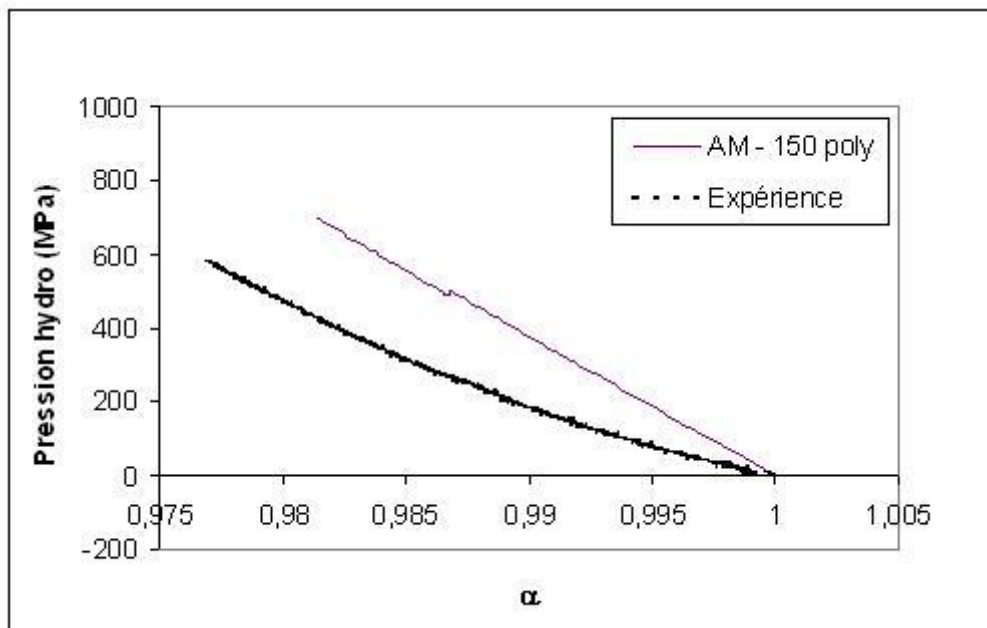


FIG. 5.14 – Pressions hydrostatiques expérimentale et estimée par l'AM pour un chargement de compression hydrostatique

Le paragraphe suivant propose une série de confrontations supplémentaires (confrontations à des calculs EF) pour essayer de découpler ces différentes sources d'erreur.

5.8.2 Programme de confrontations multiples (expérience / AM / calculs EF)

Nous venons de procéder à une première confrontation expérience/AM. Comme mentionné au cours de l'introduction du chapitre 3, une confrontation brute de ces deux éléments ne permet ni de dissocier, ni de quantifier les différentes sources d'erreur. Aussi, de manière à découpler ces erreurs, nous avons élaboré un programme de confrontations multiples faisant également intervenir des calculs EF réalisés au CEG.

Les multiples niveaux de confrontation que nous envisageons sont résumés sur la figure 5.15 et détaillés dans ce qui suit :

- En premier lieu, la confrontation aux courbes expérimentales de calculs EF effectués sur microstructure réelle i.e. à partir d'images tomographiques maillées de la butalite 400 (flèche bleue sur la figure 5.15) permet de quantifier les effets dûs à la description et à l'identification du comportement des phases.
- Deuxièmement, la confrontation des résultats macroscopiques EF sur microstructure réelle et sur microstructure polyédrisée (flèche orange sur la figure 5.15) permet cette fois de quantifier l'effet de la polyédrisation.
- Troisièmement, la confrontation des estimations AM aux résultats EF sur microstructure polyédrisée (flèche rose sur la figure 5.15) permet quant à elle une évaluation des effets de la schématisation cinématique. Cela poursuit les études effectuées aux chapitres 3 et 4.
- Pour finir, la comparaison des estimations AM aux résultats EF sur microstructure réelle (flèche verte sur la figure 5.15) permet de tester les effets de la technique elle-même (schématisations géométrique et cinématique).

Bien entendu, pour que les confrontations courbes expérimentales/résultats numériques soient rigoureuses il faut travailler sur un VER mécanique associé à la technique de modélisation employée (EF ou AM) de manière à ce que les propriétés homogénéisées calculées soient pertinentes. D'un point de vue fondamental, il serait d'ailleurs intéressant de regarder où se situe le VER lié à l'AM par rapport à celui lié aux EF.

Soulignons que le maillage des structures réelle et polyédrisée impliquées dans certaines des confrontations précitées constitue une difficulté majeure. Un outil a été réalisé à cet effet par Gérald Contesse du CEG. Il permet aujourd'hui de mailler automatiquement ce type de volumes, avec des éléments tétraédriques, comme l'illustre la figure 5.16 (5 millions d'éléments!). Des calculs EF sur de telles microstructures ainsi que l'analyse des résultats (post-traitement) constituent également des étapes longues, aujourd'hui opérationnelles dans le cas de la simulation d'un essai de compression hydrostatique.

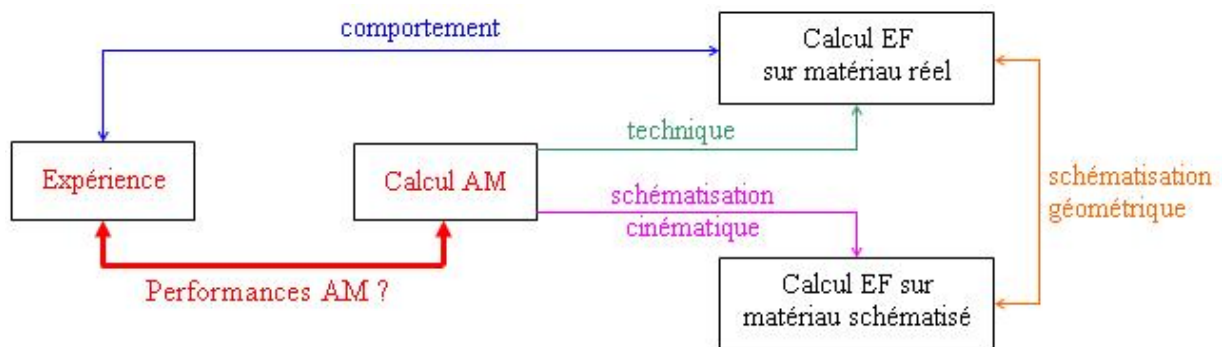


FIG. 5.15 – Confrontations programmées entre résultats expérimentaux et estimations numériques, par l’AM et par EF, de manière à découpler les effets des différentes approximations intervenant dans l’AM

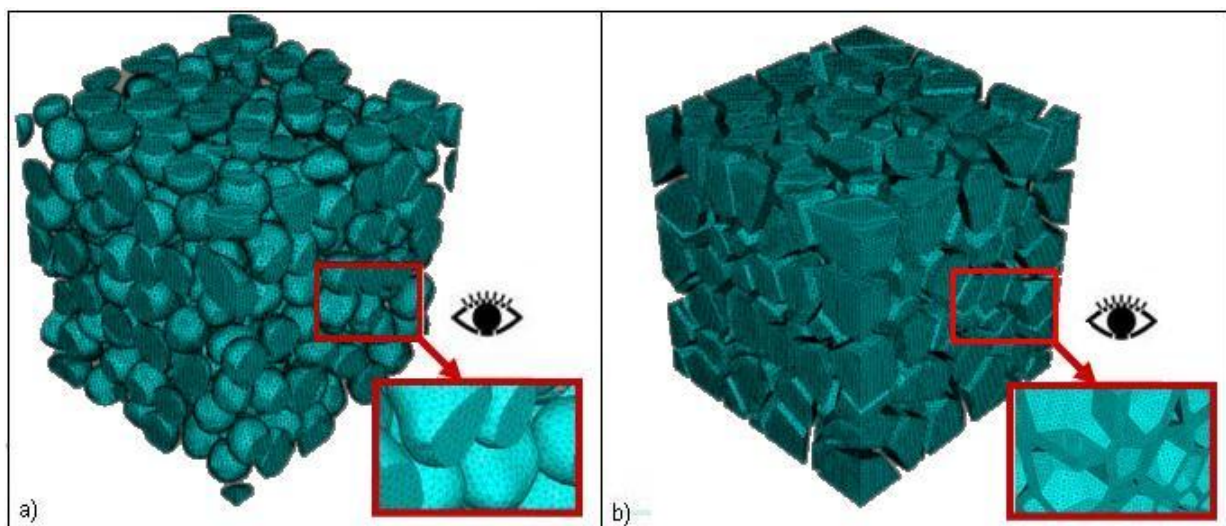


FIG. 5.16 – Maillages d’un volume réel et du volume schématisé associé avec la polyédri- sation proposée au paragraphe 5.5.1 (400 grains environ, 5 millions d’éléments)

5.8.3 Résultat des premières confrontations expérience / AM / EF

Nous disposons aujourd’hui de résultats EF sur les trois volumes suivants, dont les phases ont des comportements hyperélastiques définis par les mêmes modèles que dans le calcul AM présenté au paragraphe 5.8.1 :

- Un volume réel (i.e. issu de la microtomographie) contenant 400 grains environ.
- Un volume réel contenant 600 grains environ.

- Un volume schématisé contenant 400 grains polyédriques environ.

Ces volumes, une fois maillés, ont été soumis à des conditions aux limites en déplacement correspondant aux déformations relevées expérimentalement au cours de l'essai de compression hydrostatique jusqu'à 600 MPa. A l'issue de chaque simulation, on a pris soin de s'assurer de la conformité des CL appliquées au chargement que l'on cherchait à simuler. On a ainsi vérifié que le gradient de transformation moyen sur le volume était bien de la forme voulue, à savoir (5.1) avec γ nul et les valeurs expérimentales de α (comme en entrée de l'AM). La figure suivante 5.17 superpose les pressions hydrostatiques ainsi obtenues aux deux courbes précédemment présentées (cf. figure 5.14 du paragraphe 5.8.1).

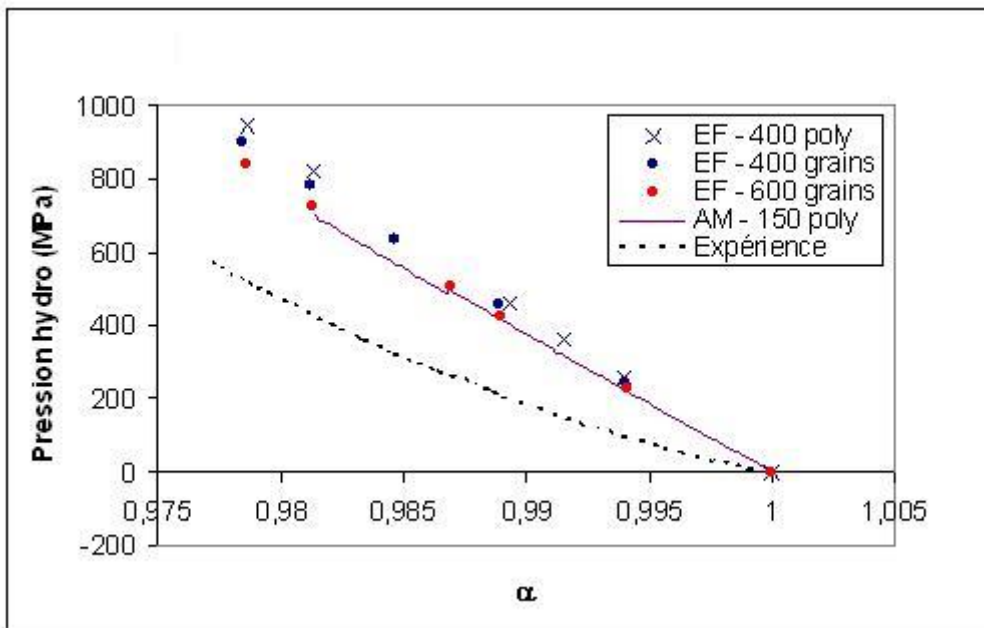


FIG. 5.17 – Pressions hydrostatiques expérimentale, estimée par l'AM et estimées par EF (volumes réels et schématisé) pour un chargement de compression hydrostatique

En premier lieu, les résultats EF obtenus sur 400 et 600 grains réels (i.e. émoussés) sont très proches (voir ronds rouges et bleus sur la figure 5.17). Cela signifie que nous sommes sans doute proches du VER relatif aux EF. En revanche, la comparaison de ces deux courbes à la courbe expérimentale n'est pas du tout satisfaisante. Considérant que le chargement réel a *a priori* été correctement appliqué (cf. vérification précitée), cela suggère que les modèles et/ou coefficients retenus pour représenter le comportement des différentes phases dans la modélisation EF (les mêmes que dans la simulation AM) ne sont pas bons. Au regard de la très forte rigidité des réponses EF par rapport à la réponse expérimentale, on peut même s'interroger sur la présence d'un éventuel endommagement au sein du matériau, non pris en compte dans les simulations.

En second lieu, on peut noter un faible écart entre les estimations EF sur 400 grains réels et polyédrisés (voir ronds bleus et croix bleues sur la figure 5.17). Ceci signifie que la polyédrisation proposée pour une première application n'a pas d'effet significatif sur les prévisions macroscopiques.

Enfin, même si nous n'avons pas encore déterminé le VER relatif à l'AM, la proximité des différents résultats EF et de l'estimation AM sur 150 polyèdres laisse présager de bonnes choses concernant l'approche morphologique...

Remarque : On précise que le choix de 150 polyèdres nous a été imposé par le manque de capacité mémoire dont nous disposions en interne au LMPM pour mettre en œuvre l'AM sur des volumes plus gros.

5.9 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons présenté la démarche générale à mettre en œuvre pour effectuer une confrontation entre résultats expérimentaux et estimations de l'AM. Ceci constitue la deuxième phase intervenant dans une démarche d'évaluation, la première (confrontation à des résultats numériques de référence, ici les EF) ayant été déjà largement amorcée dans les chapitres 3 et 4 précédents. Pour chacune des étapes introduites (essais sur la butalite 400, caractérisation du VESR, schématisation géométrique, description et identification du comportement des phases, recherche du VER) les travaux réalisés ont été présentés et des perspectives à court terme proposées.

Ce chapitre s'est soldé sur une première confrontation expérience/AM pour un chargement de compression hydrostatique. Une discussion concernant la phase d'analyse des confrontations expériences/calculs a également été menée. Elle propose de ne pas se limiter aux comparaisons courbes expérimentales/résultats AM et d'effectuer également des calculs EF sur microstructures réelles et polyédrisées de manière à découpler les différentes sources d'erreur. Les premiers résultats ainsi obtenus montrent que l'écart entre la courbe expérimentale et l'estimation AM est principalement dû à une mauvaise description et/ou identification du comportement des phases. La polyédrisation proposée, bien que non encore optimisée, semble quant à elle ne pas avoir d'effet significatif sur les propriétés macroscopiques.

Bien entendu, il est nécessaire de poursuivre les simulations AM et EF en vue notamment de déterminer leur VER respectif et de pouvoir ainsi affiner l'analyse des résultats à l'échelle macroscopique, mais aussi à l'échelle locale selon la démarche de la figure 5.15. Notons que les moyens de calcul, dont va se doter très prochainement le LMPM, permettront de réaliser des calculs AM sur des volumes tels que celui à 400 polyèdres sur lequel a été effectué le calcul EF au CEG. Enfin, on envisage d'optimiser la programmation de l'algorithme de résolution (pour l'instant en langage interprété) et de la paralléliser. Cet as-

pect est d'ailleurs indispensable si l'on envisage un jour d'implanter l'AM dans un code EF.

Soulignons que ce chapitre est plus consacré au volet « application » qu'au volet « évaluation » de l'AM en tant que prototype pour un nouveau genre d'approches d'homogénéisation. Un certain nombre de perspectives sont également à prévoir pour traiter ce second aspect : elles seront dégagées dans la conclusion générale.

Conclusion générale

Les travaux présentés dans ce manuscrit ont concerné l'évaluation d'une technique de transition d'échelle non classique destinée à terme à modéliser le comportement de composites énergétiques en réponse à des chargements compressifs.

Cette technique, qualifiée d'approche morphologique (AM), repose sur deux étapes originales réalisées en amont du processus de changement d'échelle. La première vise à considérer un volume schématisé possédant un lien fort avec la microstructure réelle. La seconde formule un jeu d'hypothèses cinématiques sur les champs régnant au sein du volume schématisé. Il en résulte une technique non conventionnelle, à caractère direct, qu'il convient de situer dans le contexte global de l'homogénéisation non linéaire.

Le premier chapitre de ce manuscrit a commencé par rappeler le cadre général dans lequel s'inscrit cette thèse. Suite à des accidents survenus lors de la manipulation de composites énergétiques, le Centre d'Etude de Gramat (CEG) a lancé une étude de manière à disposer, à long terme, d'un outil théorique capable de prédire la vulnérabilité de cette classe de matériaux. Une grande campagne expérimentale a tout d'abord permis de cibler les caractéristiques principales de ce type de matériaux : forts taux de charges, grande déformabilité, viscoélasticité... Les premiers travaux de modélisation effectués par Trumel [TRU96] ont conclu à la nécessité de procéder par homogénéisation (ou transition d'échelle).

Nous avons alors présenté le principe général de l'homogénéisation par les méthodes de moyenne et effectué une revue bibliographique non exhaustive des techniques les plus couramment utilisées en homogénéisation non linéaire. Nous avons également porté une attention particulière aux difficultés sous-jacentes à la réalisation d'un changement d'échelle efficace pour des matériaux tels que les composites énergétiques. La prise en compte de la microstructure, de l'hétérogénéité intraphase, le traitement des grandes déformations et de la viscoélasticité (résolution simplifiée et description de l'effet mémoire longue) se sont révélés comme autant d'enjeux auxquels la technique retenue devait se mesurer.

Dans une dernière section, nous avons rappelé les raisons pour lesquelles le CEG s'est intéressé aux travaux de Christoffersen [CHR83] : lien fort et explicite avec la microstructure réelle laissant entrevoir la possibilité d'introduire l'endommagement, formulation adaptée aux forts taux de charges. Nous avons ensuite présenté la démarche progressive adoptée

pour étendre la technique initiale de Christoffersen au cadre comportemental des phases constitutives des composites énergétiques. L'approche a ainsi été étendue à la viscoélasticité HPP par Martin [MAR99, NMTDF03] puis aux grandes déformations par Guiot [GUI05, GND06]. Il a alors été possible de formuler le double objectif de la présente thèse : prouver l'aptitude de l'AM à venir à bout du problème viscohyperélastique et évaluer ses performances non seulement vis-à-vis de l'application prévue, mais aussi vis-à-vis du contexte général de l'homogénéisation non linéaire et de ses enjeux.

Le second chapitre a rappelé la méthodologie propre à l'AM. La discussion menée sur chaque étape qu'elle comporte a mis en exergue les avantages théoriques suivants : lien direct avec la microstructure réelle, hétérogénéité dans la phase matrice, formulation unique quel que soit le type de comportement envisagé, accessibilité aux champs locaux, simplicité de mise en œuvre. Cette discussion a également pointé du doigt les faiblesses théoriques de l'AM : les difficultés liées à la réalisation et à l'optimisation de la schématisation géométrique qui requiert de fortes contraintes, l'hypothèse de gradient de transformation identique pour tous les grains qui semble très restrictive, la non description des effets dans les zones médianes et ses conséquences notamment en terme d'admissibilité cinématique.

L'AM a ensuite été mise en œuvre sur une microstructure aléatoire, générée numériquement, à matrice viscohyperélastique. L'algorithme de résolution développé à cet effet a opéré dans l'espace-temps réel (voir aussi [TNMDF07]), conférant ainsi à l'AM une lisibilité certaine et un caractère direct, ce qui constitue un atout indéniable dans le contexte actuel de l'homogénéisation des milieux viscoélastiques (voir par exemple [LS07]). Des résultats présentant de bonnes tendances qualitatives ont ainsi été obtenus. Illustrant au passage la simplicité de mise en œuvre de cette approche dans un contexte complexe, ce travail a répondu au premier objectif de la thèse en prouvant la possible applicabilité de l'AM aux propergols solides.

Le chapitre 3 a été consacré à l'évaluation quantitative des estimations globales et locales fournies par l'AM dans un contexte géométrique simple. Nous avons ainsi considéré un matériau périodique à grains cubiques et nous avons calculé ses réponses à différents trajets de chargement par l'AM puis par éléments finis (EF). La comparaison à un calcul numérique de référence est une pratique courante dans le domaine de l'évaluation d'un modèle d'homogénéisation [MMS99, MS04b].

Pour un comportement hyperélastique des phases, dans le cas d'une compression œdométrique, les résultats fournis par l'AM se sont trouvés très proches des résultats de référence EF aussi bien au niveau global (macroscopique) que local. Avec une matrice viscohyperélastique, l'application de ce même chargement a fourni des résultats globaux et locaux également très proches de la réponse EF, ce qui a permis conclure que l'effet mémoire longue, résultant des interactions spatio-temporelles entre les constituants, était bien transcrit par

l'AM et que l'adjonction d'une non linéarité supplémentaire (physique) n'affectait pas la qualité de l'AM dans ce cadre précis (matériau et chargement considérés).

L'application d'un glissement simple à la microstructure hyperélastique a quant à elle révélé quelques faiblesses de l'AM. En effet, l'une des composantes du tenseur des contraintes de Piola-Kirchhoff 1 macroscopique s'est trouvée mal estimée par l'AM. L'écart entre les solutions AM et EF a été imputé à la mauvaise estimation par l'AM d'une seule des composantes du gradient de transformation local. Plusieurs hypothèses ont été avancées pour expliquer cette mauvaise estimation. Tout d'abord, le chargement incompressible envisagé est très sévère pour la microstructure considérée, et le rôle des zones médianes, mal décrites dans l'AM, est apparu plus important que dans le cas de la compression œdométrique. Il serait intéressant de reprendre les travaux de Guiot [GUI05] concernant la prise en compte des zones médianes pour la microstructure particulière envisagée et de comparer les résultats de l'AM ainsi étendue aux résultats EF pour voir si une amélioration est constatée. Ensuite, l'hypothèse de gradient de transformation homogène dans le grain est moins bien vérifiée au cours de ce chargement, notamment pour ce qui est de la composante 21. Ceci est probablement un effet de structure lié à la forme cubique très particulière du grain considéré. Sans doute, la considération d'un matériau périodique, constitué de grains présentant un allongement privilégié dans une direction, permettrait d'augmenter la zone homogène et d'améliorer la qualité des estimations. Rappelons pour finir que la réponse AM a semblé « saturer ». Cet effet est quant à lui probablement lié à la quasi incompressibilité du matériau envisagé (c'est ce qu'a montré une rapide étude de compressibilité). D'un point de vue fondamental, l'extension de l'approche à des comportements incompressibles est ainsi une autre amélioration possible. Néanmoins, les chargements envisagés pour l'application de l'AM à des composites énergétiques généreront des niveaux de pression suffisants pour activer la compressibilité de la matrice. Notons que, dans cette perspective, les résultats obtenus en compression œdométrique sont tout à fait encourageants.

Le matériau périodique retenu dans le chapitre 3 n'a pas permis de mettre à défaut l'une des hypothèses cinématiques formulées dans l'AM : celle qui suppose un gradient de transformation identique pour tous les grains. Nous avons donc considéré dans le chapitre 4, une microstructure plus complexe. Des contraintes liées notamment à la difficulté de réalisation du modèle EF (taille du modèle, application du chargement, durée des calculs en transformations finies) nous ont conduits à opter pour une microstructure périodique dont la cellule de base possède trois plans de symétrie. Cette dernière contient néanmoins des grains de tailles, de formes et d'orientations différentes. Une série de simulations a été effectuée sur cette microstructure pour des constituants hyperélastiques d'abord à faible puis à fort contraste entre les phases.

Dans le cas du faible contraste, de même qu'au chapitre 3, on a pu constater que les estimations macroscopiques étaient meilleures dans le cas de la compression œdométrique que

dans le cas du glissement simple. Si l'hypothèse de gradient de transformation homogène et identique pour tous les grains a semblé acceptable pour le premier type de chargement, elle l'a moins été pour le second au cours duquel les grains se sont beaucoup déformés.

La situation de fort contraste a ensuite été considérée pour tester l'hypothèse portant sur le gradient de transformation dans les grains dans un contexte plus représentatif de l'application visée à terme. Les simulations effectuées ont confirmé la validité de ladite hypothèse en compression œdométrique et amélioré sa validité en glissement simple en limitant les déformations des grains et en favorisant une rotation d'ensemble.

Il a cependant été difficile de conclure sur la validité de l'AM dans la situation étudiée, les résultats obtenus tenant probablement beaucoup de la spécificité de la microstructure retenue (notamment en terme de symétrie). En outre, les acuités des grains de cette microstructure et de celle du chapitre précédent ont fait office de concentrateurs de champs dans les simulations EF. Or, même si dans l'AM la schématisation géométrique des grains réels introduit des acuités artificielles, leurs effets (concentration des champs) ne sont pas pris en compte. Ainsi, les estimations AM seraient peut-être plus proches des résultats EF sur microstructure à grains émoussés que sur microstructure à grains polyédriques associée. Pour finir, on a pu mettre en exergue les limites de l'outil numérique seul dans une démarche d'exploration de la validité d'une approche micromécanique.

C'est donc naturellement que nous nous sommes penchés, dans le dernier chapitre de ce manuscrit (chapitre 5), sur le deuxième volet intervenant dans une démarche d'évaluation d'un modèle micromécanique. Nous nous sommes donc intéressés à l'application de l'AM à un composite énergétique réel en vue de confronter les résultats à des courbes expérimentales.

La démarche générale de confrontation présentée au paragraphe 5.2 fait intervenir deux volets : réalisation d'une base de données expérimentales concernant les essais prévus sur composite et mise en œuvre de l'AM. Compte tenu du contexte d'application prévu, des essais triaxiaux ont été réalisés sur la butalite 400, matériau retenu pour une première application de l'AM (faible dispersion granulométrique). Les différentes étapes à franchir pour simuler de tels essais avec l'AM ont alors été détaillées. Les travaux, progressivement mis en place au cours de la thèse, concernant la caractérisation du VESR, la schématisation géométrique, la description et l'identification du comportement des phases, ainsi que la recherche du VER mécanique associé à l'AM ont été présentés. Des perspectives à court terme ont également été dégagées.

La dernière section de ce chapitre a proposé une première confrontation expérience/calcul AM dans le cas d'une compression hydrostatique (première phase d'un essai de compression triaxiale). De manière à découpler les différentes sources d'erreurs, un programme de confrontations multiples faisant intervenir des calculs EF sur microstructure réelle et polyédrique a été élaboré et entrepris. Les premiers résultats de cette démarche de confron-

tation transversale sont encourageants, suggérant que l'écart observé entre les réponses expérimentale et estimée par l'AM est principalement dû à une mauvaise description et/ou identification du comportement des phases. En revanche, la polyédrisation proposée, bien que non encore optimisée, s'avère ne pas avoir d'effet significatif à l'échelle macroscopique. Outre la réalisation de calculs EF et AM sur des volumes plus gros (notamment pour l'AM) en vue d'affiner l'analyse, les prochains travaux doivent être consacrés en priorité à l'amélioration de la description du comportement des phases (part volumique de la matrice notamment), de manière à rapprocher les estimations macroscopiques de l'AM de la courbe expérimentale. Par ailleurs, il faudra intégrer la description de la part visqueuse du comportement de la matrice, non prise en compte dans les premières simulations réalisées. Enfin, on rappelle que l'un des intérêts de l'AM est son aptitude à fournir des estimations des champs locaux. Il conviendra alors de les confronter à ceux obtenus par EF selon la démarche présentée sur la figure 5.15 (flèches rose et orange) en vue de quantifier les influences respectives, à cette échelle, des deux schématisations au départ de l'AM. A ce titre, il est donc doré et déjà nécessaire de réfléchir à une nouvelle polyédrisation possédant plus de lien avec la microstructure réelle, de manière à conférer le maximum de représentativité aux quantités locales estimées par l'AM.

A l'issue de ces travaux, l'approche morphologique apparaît donc comme une technique de transition d'échelle non classique capable d'intégrer un lien fort avec la morphologie et de traiter de manière directe des comportements complexes. Elle reste néanmoins réservée aux composites particuliers fortement chargés. La confrontation des estimations AM aux résultats EF sur des microstructures « modèles » a permis d'illustrer sa simplicité de mise en œuvre (par rapport à la réalisation du modèle EF) et ses performances techniques (temps de calcul bien moindres que ceux du calcul EF, formulation et résolution directe pour des comportements complexes). Les travaux d'évaluation entrepris suggèrent à notre avis que de nouvelles techniques d'homogénéisation directes et performantes peuvent être développées pour divers matériaux. D'un point de vue fondamental, les perspectives envisageables pour l'amélioration de l'approche étudiée dans ce manuscrit sont nombreuses (enrichissement de la description cinématique intégrant une prise en compte des zones médianes dans le cas général tridimensionnel, traitement de la condition d'incompressibilité, étude de concentration, nouveau jeu d'hypothèses cinématiques...) et devraient permettre d'élargir le spectre d'application de ce type d'approches.

Annexes

Annexe A

Rappels concernant les transformations finies

L'objectif de cette annexe est de rappeler les grandes lignes de la mécanique des milieux continus lorsque l'on travaille dans le formalisme des grandes déformations. Seuls les concepts de base et outils nécessaires à la compréhension des travaux effectués dans la présente thèse sont rappelés.

Nous souhaitons étudier l'évolution d'un domaine matériel D entre deux instant t_0 et t . Notons D_0 et D_t les configurations respectivement initiale (à l'instant t_0) et actuelle (à l'instant t) de D .

Soit P une particule de D . A l'instant t_0 (configuration non déformée), P est en P_0 ; à l'instant t (configuration actuelle), P est en P_t . L'application vectorielle $\vec{\chi}$ est la transformation qui permet de relier $\vec{x} = \vec{OP}_t$ à $\vec{X} = \vec{OP}_0$ (voir figure A.1) :

$$\vec{x} = \vec{\chi}(\vec{X}, t) \tag{A.1}$$

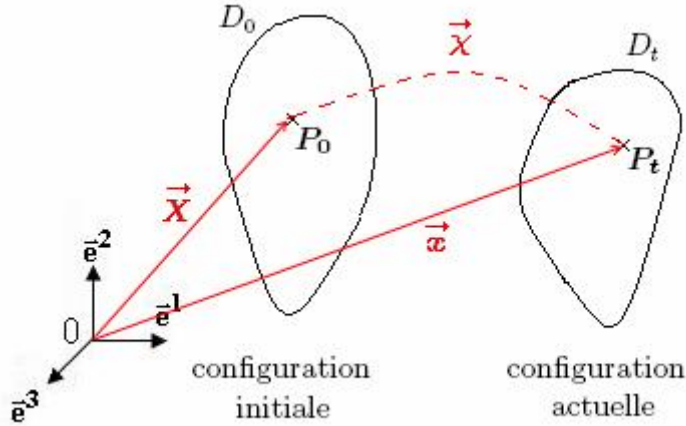


FIG. A.1 – Déformation d'un domaine matériel

Afin d'étudier la transformation géométrique autour de la particule P_0 entre les instants t_0 et t , on introduit le tenseur gradient de la transformation \mathbf{F} :

$$\mathbf{F}(\vec{X}, t) = \mathbf{Grad} \vec{\chi}(\vec{X}, t) \quad (\text{A.2})$$

Grad est l'opérateur gradient. On a ainsi :

$$F_{iJ} = \frac{\partial x_i}{\partial X_J} \quad (\text{A.3})$$

Le tenseur \mathbf{F} permet d'étudier :

- *La variation de longueur* d'une petite fibre qui peut être mesurée de différentes manières (dilatation, allongement unitaire...). Par exemple, la dilatation d'une petite fibre initialement colinéaire à \vec{N} est donnée par : $\lambda(\vec{N}) = \frac{dl}{dL} = \sqrt{\vec{N} \cdot \mathbf{C} \vec{N}}$. dL et dl désignent respectivement les longueurs initiale et actuelle de la petite fibre et \mathbf{C} est le tenseur de Cauchy-Green droit défini à partir de \mathbf{F} par : $\mathbf{C} = \mathbf{F}^T \cdot \mathbf{F}$.
- *La variation d'angle* entre deux petites fibres initialement orthogonales. Soient deux petites fibres initialement orthogonales et colinéaires à \vec{N} et \vec{N}' respectivement. Après transport par \mathbf{F} ces deux petites fibres sont colinéaires aux vecteurs \vec{n} et \vec{n}' respectivement. $\gamma = \frac{\pi}{2} - (\vec{n}, \vec{n}')$, glissement de l'angle initialement droit (\vec{N}, \vec{N}') , est tel que $\sin \gamma = (\vec{N} \cdot \mathbf{C} \vec{N}') / (\lambda(\vec{N}) \lambda(\vec{N}'))$
- *La variation de volume* d'un petit élément défini par trois petites fibres. Cette dernière est donnée par $J = \det \mathbf{F}$. Une transformation isochore (à volume constant) est caractérisée par $J = 1$. Un matériau incompressible ne peut subir que des transformations isochores.

Il est également possible de séparer dans \mathbf{F} la part de déformation pure de la part de rotation pure (caractérisée par un tenseur orthogonal \mathbf{R}). On peut ainsi écrire \mathbf{F} sous les formes :

$$\mathbf{F} = \mathbf{R}.\mathbf{U} \ ; \ \mathbf{F} = \mathbf{V}.\mathbf{R} \quad (\text{A.4})$$

suivant que l'on perçoit \mathbf{F} comme la combinaison d'une déformation pure puis d'une rotation pure ou l'inverse. Les tenseurs \mathbf{U} et \mathbf{V} permettent de définir une infinité de mesures de déformation, tel que le tenseur de Green-Lagrange utilisé au chapitre 2 : $\mathbf{E} = \frac{1}{2}(\mathbf{U}^2 - \mathbf{Id})$.

Chaque mesure de déformation est énergétiquement conjuguée à une mesure de contrainte. Ainsi, dans le cadre des transformations finies, il existe différents tenseurs de contraintes : Cauchy, Piola-Kirchhoff 2, nominal et son transposé le tenseur des contraintes de Piola-Kirchhoff 1, respectivement notés $\boldsymbol{\sigma}$, \mathbf{s} , $\bar{\mathbf{s}}$ et $\boldsymbol{\pi}$.

Dans ce manuscrit on a eu recours à une description lagrangienne du mouvement, c'est-à-dire que l'on a préféré exprimer les différentes quantités dans la configuration initiale. En réalité toutes les grandeurs peuvent aussi bien être exprimées dans la configuration actuelle. On parle alors de description eulérienne. Le choix de travailler avec l'une ou l'autre de ces descriptions dépend du contexte. Ici, il est nettement plus pratique de travailler dans la configuration de référence, notamment pour les calculs de moyennes (seuls les volumes initiaux sont nécessaires). De plus, des quantités lagrangiennes vérifient automatiquement le principe d'objectivité i.e. elle sont naturellement invariantes par rapport à l'observateur. Dans le cas de quantités eulériennes, le respect du principe d'objectivité conduit à la formulation de critères mathématiques avec lesquels il peut être difficile de travailler.

Annexe B

Etude de maillage réalisée sur la cellule cubique

L'objectif de cette annexe est de présenter les différents maillages EF envisagés et les résultats afférents sur la microstructure périodique à grain cubique étudiée au chapitre 3.

Afin de nous assurer de la validité de notre référence (le calcul EF) nous avons maillé la cellule à grain cubique avec trois maillages différents :

- Maillage 1 (figure B.1 a)) : le grain est maillé avec 1000 éléments identiques et la matrice avec 21184 éléments identiques. Ce sont les résultats obtenus avec ce maillage qui sont présentés dans le chapitre 3.
- Maillage 2 (figure B.1 b)) : le grain est maillé avec 1000 éléments identiques et la matrice avec 169472 éléments identiques (maillage 8 fois plus fin dans la matrice que pour le maillage 1).
- Maillage 3 (figure B.1 c)) : le grain est maillé avec 8000 éléments identiques et la matrice avec 21184 éléments identiques (maillage 4 fois plus fin dans le grain que pour le maillage 1).

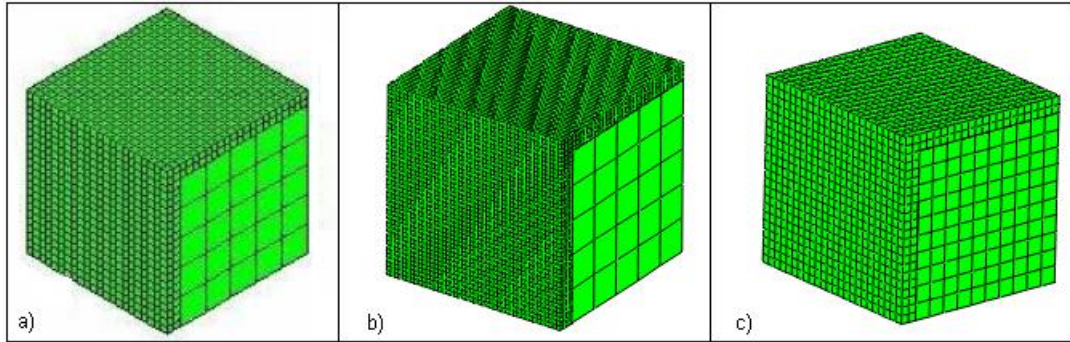


FIG. B.1 – Les différents maillages testés sur la cellule à grain cubique

Les figures suivantes (B.2 à B.4) présentent des résultats globaux et locaux obtenus pour ces trois maillages différents dans le cas du glissement simple, trajet de chargement pour lequel les résultats de l'AM sont les moins bons (cf. chapitre 3). La superposition des trois séries de courbes montre que la réponse EF ne dépend pas du maillage. Cela assure par conséquent la validité de notre référence.

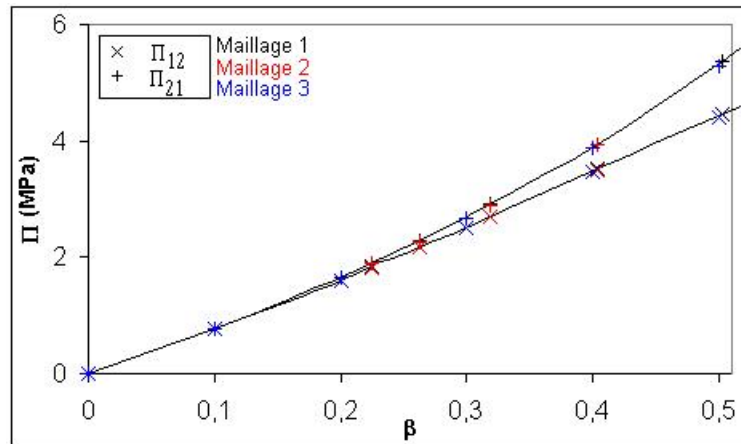


FIG. B.2 – Comparaison des contraintes macroscopiques Π_{12} et Π_{21} estimées par EF pour les trois maillages considérés (voir figure B.1) lors de la simulation d'un glissement simple

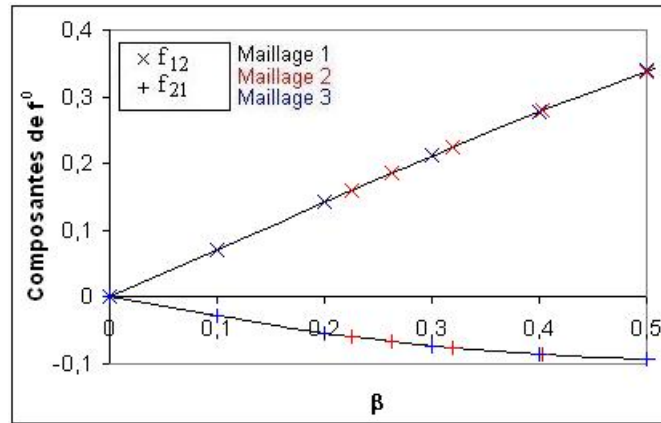


FIG. B.3 – Comparaison des composantes f_{12}^0 et f_{21}^0 du gradient de transformation moyen dans le grain, estimées par EF pour les trois maillages considérés (voir figure B.1) lors de la simulation d'un glissement simple

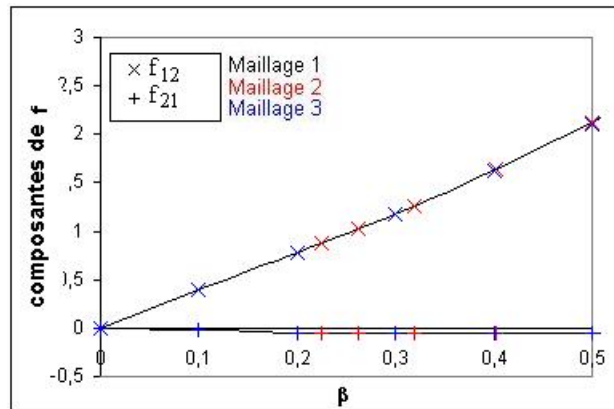


FIG. B.4 – Comparaison des composantes f_{12} et f_{21} du gradient de transformation moyen dans la zone intergranulaire 2, estimées par EF pour les trois maillages considérés (voir figure B.1) lors de la simulation d'un glissement simple

Annexe C

Détails concernant la modélisation EF des matériaux périodiques modèles étudiés dans les chapitres 3 et 4

Dans cette annexe nous donnons des indications concernant l'application des conditions aux limites et de périodicité qu'il a fallu appliquer aux modèles éléments finis des microstructures considérées dans les chapitres 3 et 4.

Comme nous l'avons mentionné au paragraphe 3.3.2 du chapitre 3, l'application d'un chargement défini par le gradient de déplacement \mathbf{H} à un matériau périodique peut se traduire de la manière suivante :

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}^A) - \mathbf{u}(\mathbf{x}^B) = \mathbf{H} \cdot (\mathbf{x}^A - \mathbf{x}^B) \quad (\text{C.1})$$

pour tous points A et B de la cellule de base tels que $\mathbf{x}^B = \mathbf{x}^A + \mathbf{x}^P$ (\mathbf{x}^P vecteur de périodicité du milieu).

Dans le cas représenté sur la figure C.1, les points A et B appartiennent aux faces de normales $\pm \mathbf{e}^1$ si bien que $\mathbf{x}^A - \mathbf{x}^B = \{-L_1, 0, 0\}$ et que l'équation précédente devient :

$$\begin{cases} u_1^A - u_1^B = -H_{11}L_1 \\ u_2^A - u_2^B = -H_{21}L_1 \\ u_3^A - u_3^B = -H_{31}L_1 \end{cases} \quad (\text{C.2})$$

Cette relation est à appliquer à tous les couples de points situés sur les faces de normales $\pm \mathbf{e}^1$. Pour les autres types de faces, d'autres équations, faisant intervenir les dimensions de la cellule dans les directions \mathbf{e}^2 et \mathbf{e}^3 , sont à expliciter.

Dans la modélisation par éléments finis, ces conditions doivent être appliquées séparément

aux faces (arêtes et coins exceptés), puis aux arêtes et enfin aux coins de la cellule. En effet, l'application de la relation C.1 avec le mot clé « *equation » dans Abaqus® engendre la suppression de certains degrés de liberté. Ces derniers ne peuvent donc pas être réutilisés dans une autre équation. Or, les nœuds appartenant aux arêtes ou aux coins de la cellule vérifient des équations supplémentaires puisqu'ils appartiennent à plusieurs faces en même temps. Ces nœuds doivent donc être traités indépendamment du cas des faces.

Enfin, soulignons que ces équations peuvent être appliquées à des groupes de nœuds appelés « sets » (ce qui est préférable étant donné la finesse des maillages retenus). Il faut cependant faire très attention à l'ordre des nœuds au cours de la définition des groupes. En effet, le premier nœud du groupe « face1+ » (de normale \vec{e}^1) doit correspondre -i.e. être effectivement en face- du premier nœud du groupe « face1- » (de normale $-\vec{e}^1$). Dans le cas du matériau à grain cubique considéré au chapitre 3, cela n'a pas posé de problème particulier : lors de la réalisation manuelle du maillage les numéros des nœuds ont été pensés de manière à satisfaire d'emblée cette contrainte. En revanche, dans le cas du matériau à cellule complexe (chapitre 4) le maillage a été effectué semi automatiquement par le logiciel si bien que la numérotation des nœuds n'a pas pu être maîtrisée. Il a donc fallu consacrer du temps à la recherche des couples de nœuds à lier par les équations C.1.

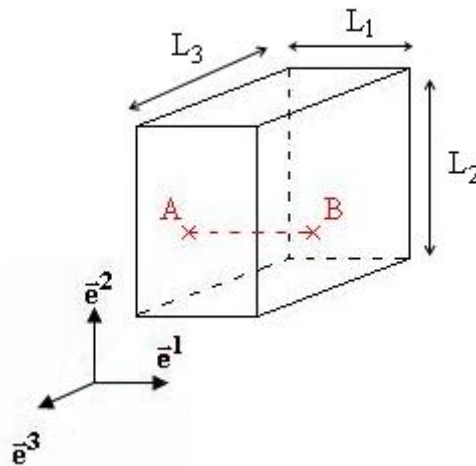


FIG. C.1 – Illustration de deux points A et B d'une cellule de base dont les déplacements sont liés par l'équation C.1

Annexe D

Travaux préliminaires concernant l'optimisation de la schématisation géométrique

Dans cette annexe, nous amorçons l'étude de l'optimisation de la schématisation géométrique en considérant un matériau modèle simple. Nous proposons et testons trois schématisations distinctes, ce qui nous permet de dégager quelques tendances à suivre pour l'optimisation de cette étape. Nous proposons ensuite quelques perspectives envisagées pour poursuivre cette étude.

En guise d'étude préliminaire, nous avons jugé intéressant de nous pencher sur le cas d'un matériau tridimensionnel périodique simple constitué de grains sphériques périodiquement répartis selon l'arrangement présenté sur la figure 1.10 b) du chapitre 1 (paragraphe 1.5.1). Ce composite peut être représenté par la cellule de base de la figure D.1. La fraction volumique de charges est de 39%.

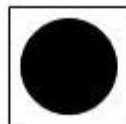


FIG. D.1 – Vue 2D de la cellule de base du matériau à grains sphériques de la figure 1.10 b) (cf. paragraphe 1.5.1 du chapitre 1)

Dans le cadre du stage ingénieur de Barbara Laffon (élève en 2^{ème} année à l'ENSMA),

nous avons voulu trouver la schématisation géométrique optimale de ce matériau. Pour ce faire, nous avons proposé trois schématisations différentes (voir figure D.3 a) à c)). Soulignons tout d'abord que le polyèdre associé au grain de ce matériau est forcément un cube. Ceci est imposé par la répartition spatiale des constituants. En effet, il n'est pas possible de définir le grain selon la représentation 2D portée sur la figure D.2 sinon deux couches différentes (entre les grains 1 et 4 puis entre les grains 2 et 3) intercepteraient une même zone (zone hachurée). Ainsi, le nombre le nombre de faces d'un polyèdre représentant un grain d'un matériau réel est imposé par le nombre de voisins « directs » existant autour de ce grain.

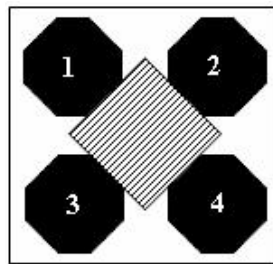


FIG. D.2 – Schématisation non possible du matériau à grains sphériques de la figure D.1 (vue 2D)

Détaillons les trois schématisations testées :

- Dans la première (voir figure D.3 a)) le cube est circonscrit à la sphère du matériau représenté sur la figure D.1. Il s'agit du matériau à grains cubiques considéré au chapitre 3. Le grain cubique occupe 75% de la cellule de base.
- Dans la seconde (voir figure D.3 b)) le cube est inscrit dans la sphère du matériau représenté sur la figure D.1. Le grain cubique n'occupe plus que 26% de la cellule de base.
- Dans la troisième (voir figure D.3 c)) le cube est tel que la concentration en charge est de 39%, comme dans le matériau à grains sphériques représenté sur la figure D.1.

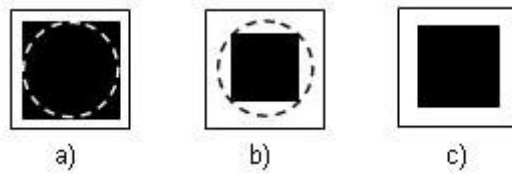


FIG. D.3 – Vues 2D des schématisations testées pour représenter le matériau à grains sphériques de la figure D.1 : a) cube circonscrit à la sphère ; b) cube inscrit dans la sphère ; c) cube de même volume que la sphère

Pour chacune de ces schématisations, nous avons calculé les paramètres morphologiques associés à l'AM (lorsque cela était possible : cf. remarque plus bas) et nous avons confronté les résultats homogénéisés de l'AM aux résultats EF obtenus sur le matériau à grains sphériques pour un comportement hyperélastique des phases (mêmes modèles hyperélastiques de type Mooney-Rivlin que dans le chapitre 3, cf. paragraphe 3.3.1, et paramètres matériaux donnés par le jeu n°1 du tableau 4.1).

Remarque : Pour la schématisation b) il n'a pas été possible d'appliquer l'AM. En effet, en calculant les paramètres de la même façon que dans le paragraphe 3.2.3 du chapitre 3 l'aire projetée obtenue était négative.

Dans le cas d'un glissement simple dans le plan (\vec{e}^1, \vec{e}^2) , les résultats sont portés sur la figure D.4 qui présente l'évolution des contraintes de Piola-Kirchhoff 1 Π_{12} et Π_{21} en fonction du facteur de charge β . Notons que pour la schématisation c), nous retrouvons dans l'AM le problème sur la contrainte Π_{21} (voir paragraphe 3.3.5.1 du chapitre 3).

En observant la composante Π_{12} seule, nous pouvons conclure que c'est la schématisation c) qui fournit la réponse la plus proche de celle du composite à grains sphériques mais les résultats ne sont pas très satisfaisants : l'écart relatif sur Π_{12} est de 14% à la fin du chargement.

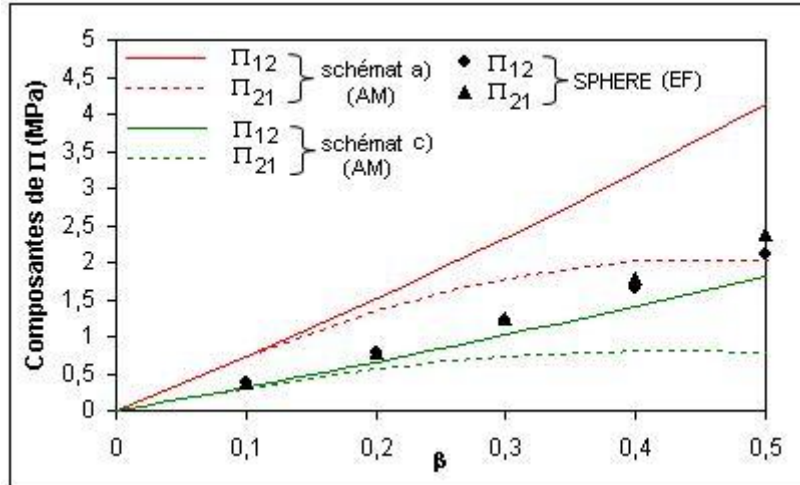


FIG. D.4 – Contraintes homogénéisées Π_{12} et Π_{21} sur le matériau à grains sphériques de la figure D.1 (résultat EF) puis pour les schématisations a) et c) de la figure D.3 (résultats AM)

Nous pouvons avancer différents arguments pour justifier les observations faites. Tout d'abord, il faut bien être conscient que le cas considéré ici (matériau à grains sphériques) constitue la situation la pire pour l'AM. En effet, les grains sont très réguliers et se trouvent alors très éloignés de leurs représentants (cubes) imposés par la schématisation géométrique. D'autre part, la répartition des charges retenue ne permet pas de décrire des taux de charges très importants (maximum de 52% dans le cas de sphères en contact). Dans la schématisation c) ce dernier n'est que de 39%. Or nous avons vu que certaines hypothèses de base de l'AM sont d'autant plus justifiées que le taux de charge est élevé. Enfin, en diminuant la taille du cube, la proportion des zones médianes augmente de manière significative (elles occupent 17.7% du volume de la cellule dans le cas de la schématisation c) contre 2% dans le cas a)), altérant ainsi probablement les prévisions de l'AM qui ne décrivent pas les effets dans ces zones. Les conclusions tirées de cette première étude suggèrent de réaliser une étude du même type sur un autre matériau simple, plus apte à être correctement modélisé par l'AM. Ceci pourrait se faire sur un matériau plus fortement chargé tel que celui représenté sur la figure D.5 et/ou possédant des grains moins réguliers que des sphères. Une telle étude permettrait de dégager quelques indications à suivre pour optimiser la schématisation géométrique et/ou préciser la définition des paramètres morphologiques.

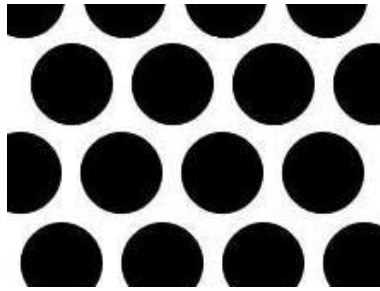


FIG. D.5 – Exemple de matériau envisageable pour poursuivre les premiers travaux concernant l'optimisation de la schématisation géométrique de Christoffersen

Bibliographie

- [ABA] Abaqus/ standard theory manual version 6.6.
- [BAL77] J.M. BALL. Convexity conditions and existence theorems in nonlinear elastostatics. *Archives of Rational Mechanics and Analysis*, 63 :337–403, 1977.
- [BM05] R. BRENNER and R. MASSON. Improved affine estimates for nonlinear viscoelastic composites. *Eur. J. Mech. A/Solids*, 24 :1002–1015, 2005.
- [BOR96] M. BORNERT. A generalized pattern-based self-consistent scheme. *Computational Materials Science*, 5 :17–31, 1996.
- [BOR01] M. BORNERT. Homogénéisation des milieux aléatoires : bornes et estimations. In : Homogénéisation en mécanique des matériaux 1 - Matériaux aléatoires élastiques et milieux périodiques. HERMES Science Publications, Paris, 2001.
- [BOR03] M. BORNERT. Estimations et encadrements des modules d'élasticité des milieux aléatoires. Cours de l'école d'été. CNRS - Homogénéisation en Mécanique et Physique des Matériaux, 2003.
- [BOU06] A. BOUKAMEL. Modélisations mécaniques et numériques des matériaux et structures en élastomères. Habilitation à Diriger des Recherches, Université de la Méditerranée (Aix-Marseille II), Juillet 2006.
- [BPC98] M. BORNERT and P. PONTE-CASTANEDA. Second-order estimates of the self-consistent type for viscoplastic polycrystals. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 454 :3035–3045, 1998.
- [BS01] M. BORNERT and P. SUQUET. Propriétés non linéaires des composites : approches par les potentiels. In : Homogénéisation en mécanique des matériaux 2 - Comportements non linéaires et problèmes ouverts. HERMES Science Publications, Paris, 2001.
- [BSZ96] M. BORNERT, C. STOLZ, and A. ZAOUI. Morphologically representative pattern-based bounding in elasticity. *J. Mech. Phys. Solids*, 44(3) :307–331, 1996.
- [BZ79] M. BERVEILLER and A. ZAOUI. An extension of the self-consistent scheme to plastically-flowing polycrystals. *J. Mech. Phys. Solids*, 26 :325–344, 1979.

- [BZ00] S. BEURTHEY and A. ZAOUI. Structural morphology and relaxation spectra of viscoelastic heterogeneous materials. *Eur. J. Mech. A/Solids*, 19 :1–16, 2000.
- [CAG87] J. CAGNOUX. Endommagement d’un composite à liant polyuréthane. effet de la pression et de la vitesse de déformation. Centre d’Etudes de Gramat, Note T87-21, 1987.
- [CHR83] J. CHRISTOFFERSEN. Bonded granulates. *J. Mech. Phys. Solids*, 31(1) :55–83, 1983.
- [DEX06] M. DEXET. *Méthode de couplage entre expérimentations et simulations numériques en vue de l’identification de lois de comportement intracristallin. Application aux alliages de zirconium*. PhD thesis, Ecole Polytechnique, 2006.
- [DHN⁺07] S. DARTOIS, D. HALM, C. NADOT, A. DRAGON, and A. FANGET. Introduction of damage evolution in a scale transition approach for highly-filled particulate composites. *Engineering Fracture Mechanics, In Press, Accepted Manuscript, Available online 11 July 2007*, 2007.
- [DOU00] P. DOUMALIN. *Microextensométrie locale par corrélation d’images numériques, application aux études micromécaniques par microscopie électronique à balayage*. PhD thesis, Ecole Polytechnique, 2000.
- [DVO92] G. DVORAK. Transformation field analysis of inelastic composite materials. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 437 :311–327, 1992.
- [FCJ⁺02] S. FOREST, G. CAILLETAUD, D. JEULIN, F. FEYEL, I. GALLIET, V. MOUNOURY, and S. QUILICI. Introduction au calcul de microstructures. element of microstructural mechanics. *Mécanique et Industries*, 3 :439–456, 2002.
- [FEY03] F. FEYEL. A multilevel finite element method to describe the reponse of highly non-linear structures using generalized continua. *Comput. Methods in Appl. Mech. Engrg.*, 192 :3233–3244, 2003.
- [FJH⁺06] S. FOREST, D. JEULIN, F. EL HOUDAIGUI, T. KANIT, K. MADI, F. N’GUYEN, A. ZEGHADI, and M. BOUSSUGE. Calcul de microstructures à morphologies 3d complexes : des crèmes glacées aux réfractaires. Actes du Colloque National MECAMAT Aussois 2006, Approches multi-échelles en mécanique des matériaux, 2006.
- [FUN07] C. FUNFSCHILLING. *Comportement et endommagement de composites viscoélastiques. Application aux composites énergétiques*. PhD thesis, Ecole Centrale Paris, Mars 2007.
- [GIL96] P. GILORMINI. *A critical evaluation of various nonlinear extensions of the self-consistent model*. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1996.

- [GIL01] P. GILORMINI. Application. In : Homogénéisation en mécanique des matériaux 1 - Matériaux aléatoires élastiques et milieux périodiques. HERMES Science Publications, Paris, 2001.
- [GND06] B. GUIOT, C. NADOT, and A. DRAGON. Towards a non-linear micromechanics-based analysis for particulate composites. *Composites Science and Technology*, 66 :2726–2735, 2006.
- [GS92] S. GOVINDJEE and J.C. SIMO. Mullin’s effect and the strain energy amplitude dependence of the storage modulus. *Int. J. Solids Structures*, 29 :1737–1751, 1992.
- [GUI05] B. GUIOT. *Contribution à la transition d’échelles en (visco-)hyperélasticité pour une classe de composites particulaires fortement chargés*. PhD thesis, Université de Poitiers - ENSMA, Janvier 2005.
- [HD97] P. HEUILLET and L. DUGAUTIER. Modélisation du comportement hyperélastique des élastomères compacts. Appolor, 1997.
- [HIL65] R. HILL. Continuum micro-mechanics of elastoplastic polycrystals. *J. Mech. Phys. Solids*, 13 :89–101, 1965.
- [HIL67] R. HILL. The essential structure of constitutive laws for metal composites and polycrystals. *J. Mech. Phys. Solids*, 15 :79–95, 1967.
- [HN03] S. HARTMANN and P. NEFF. Polyconvexity of generalized polynomial-type hyperelastic strain energy functions for near-incompressibility. *Int. J. Solids Struct.*, 40 :2767–2791, 2003.
- [HS63] Z. HASHIN and S. SHTRIKMAN. A variational approach to the theory of the elastic behaviour of multiphase materials. *J. Mech. Phys. Solids*, 11 :127–140, 1963.
- [HUT76] J.W. HUTCHINSON. Bounds and self-consistent estimates for creep of polycrystalline materials. *Proc. R. Soc. Lond.*, A348 :101–127, 1976.
- [IGM⁺07] H.M. INGLIS, P.H. GEUBELLE, K. MATOUS, H. TAN, and Y. HUANG. Cohesive modeling of dewetting in particulate composites : micromechanics vs. multiscale finite element analysis. *Mechanics of Materials*, 39(6) :580–595, June 2007.
- [IMPCS06] M.I. IDIART, H. MOULINEC, P. PONTE-CASTANEDA, and P. SUQUET. Macroscopic behavior and field fluctuations in viscoplastic composites : Second-order estimates versus full-field simulations. *J. Mech. Phys. Solids*, 2006.
- [JCF⁺07] D. JEULIN, T. CLEMENCEAU, M. FAESSEL, V. TARIEL, G. CONTESSE, and A. FANGET. Morphological analysis of 3d images of pyrotechnical granular materials obtained by microtomography. DYMAT, 2007.

- [JEU01] D. JEULIN. Caractérisation morphologique et modèles de structures aléatoires. In : Homogénéisation en mécanique des matériaux 1 - Matériaux aléatoires élastiques et milieux périodiques. HERMES Science Publications, Paris, 2001.
- [KFG⁺03] T. KANIT, S. FOREST, I. GALLIET, V. MOUNOURY, and D. JEULIN. Determination of the size of the representative volume element for random composites : statistical and numerical approach. *Int. J. Solids Struct.*, 40 :3647–3679, 2003.
- [KPC98] M. KAILASAM and P. PONTE-CASTANEDA. A general constitutive theory for linear and nonlinear particulate media with microstructure evolution. *J. Mech. Phys. Solids*, 46(3) :427–465, 1998.
- [LEJ06] S. LEJEUNES. *Modélisation de structures lamifiées élastomères - métal à l'aide d'une méthode de réduction de modèles*. PhD thesis, Université de la Méditerranée (Aix-Marseille II), Mars 2006.
- [LMM04] N. LAHELLEC, F. MAZEROLLE, and J.C. MICHEL. Second-order estimate of the macroscopic behavior of periodic hyperelastic composites : theory and experimental validation. *J. Mech. Phys. Solids*, 52 :27–49, 2004.
- [LPPC06] O. LOPEZ-PAMIEZ and P. PONTE-CASTANEDA. On the overall behavior, microstructure evolution, and macroscopic stability in reinforced rubbers at large deformations : I-theory. *J. Mech. Phys. Solids*, 54 :807–830, 2006.
- [LS07] N. LAHELLEC and P. SUQUET. Effective behavior of linear viscoelastic composites : a time integration approach. *Int. J. Solids Struct.*, 44(2) :507–529, 2007.
- [LW98] J. LI and G.J. WENG. A unified approach from elasticity to viscoelasticity to viscoplasticity of particle-reinforced solids. *Int. J. Plasticity*, 14(1-3) :193–208, 1998.
- [MAN71] J. MANDEL. Plasticité classique et viscoplasticité. Courses and Lectures 17, CISM Udine, Ed. Springer-Verlag, 1971.
- [MAR99] C. MARTIN. *Contribution à l'homogénéisation du comportement viscoélastique et de la détérioration d'une classe d'élastomères fortement chargés*. PhD thesis, Université de Poitiers - ENSMA, Février 1999.
- [MAR05] J.M. MARTINEZ. *Modélisation et caractérisation du comportement hyper-visco-plastique d'un élastomère sous sollicitations multi-harmoniques et à différentes températures*. PhD thesis, Université de la Méditerranée (Aix-Marseille II), 2005.

- [MBSZ00] R. MASSON, M. BORNERT, P. SUQUET, and A. ZAOUI. An affine formulation for the prediction of the effective properties of nonlinear composites and polycrystals. *J. Mech. Phys. Solids*, 48 :1203–1227, 2000.
- [MIC01] J.C. MICHEL. Théorie des modules effectifs. approximations de voigt et de reuss. In : Homogénéisation en mécanique des matériaux 1 - Matériaux aléatoires élastiques et milieux périodiques. HERMES Science Publications, Paris, 2001.
- [MMS99] J.C. MICHEL, H. MOULINEC, and P. SUQUET. Effective properties of composite materials with periodic microstructure : a computational approach. *Comp. Meth. Appl. Mech. Engrng*, 172 :109–143, 1999.
- [MMS01] J.C. MICHEL, H. MOULINEC, and P. SUQUET. Composites à microstructure périodique. In : Homogénéisation en mécanique des matériaux 1 - Matériaux aléatoires élastiques et milieux périodiques. HERMES Science Publications, Paris, 2001.
- [MOR52] C.B. Jr. MORREY. Quasi-convexity and the lower semicontinuity of multiple integrals. *Pacific Journal of Mathematics*, 2 :25–53, 1952.
- [MS98] H. MOULINEC and P. SUQUET. A numerical method for computing the overall response of nonlinear composites with complex microstructure. *Comput. Methods in Appl. Mech. Engrng.*, 157 :69–94, 1998.
- [MS03a] J.C. MICHEL and P. SUQUET. Nonuniform transformation field analysis. *Int. J. Solids Structures*, 40(25) :6937–3955, 2003.
- [MS03b] H. MOULINEC and P. SUQUET. Intraphase strain heterogeneity in nonlinear composites : a computational approach. *Eur. J. Mech. A/Solids*, 22 :751–770, 2003.
- [MS04a] J.C. MICHEL and P. SUQUET. Computational analysis of nonlinear composite structures using the nonuniform transformation field analysis. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 193(48-51) :5477–5502, 2004.
- [MS04b] H. MOULINEC and P. SUQUET. *Homogenization for non linear composites in the light of numerical simulations*. Kluwer Academic Publishers, The Netherlands, 2004.
- [MUL87] S. MULLER. Homogenization of nonconvex integral functionals and cellular elastic materials. *Arch. Rat. Mech. Anal.*, 99 :189–212, 1987.
- [NDTF06] C. NADOT, A. DRAGON, H. TRUMEL, and A. FANGET. Damage modeling framework for viscoelastic particulate composites via a scale transition approach. *J. Theor. Appl. Mech.*, 44(3) :553–83, 2006.

- [NMTDF03] C. NADOT-MARTIN, H. TRUMEL, A. DRAGON, and A. FANGET. Morphology-based homogenization for viscoelastic particulate composites : Part 1 : Viscoelasticity sole. *Eur. J. Mech. A/Solids*, 22 :89–106, 2003.
- [NNH93] S. NEMAT-NASSER and M. HORI. Micromechanics : overall properties of heterogeneous materials. North-Holland Series in Applied Mathematics and Mechanics, 1993.
- [PC91] P. PONTE-CASTANEDA. The effective mechanical properties of nonlinear isotropic composites. *J. Mech. Phys. Solids*, 39 :45–71, 1991.
- [PC92] P. PONTE-CASTANEDA. New variational principles in plasticity and their application to composite materials. *J. Mech. Phys. Solids*, 40 :1757–1788, 1992.
- [PC96] P. PONTE-CASTANEDA. Exact second-order estimates for the effective mechanical properties of nonlinear composite materials. *J. Mech. Phys. Solids*, 44(6) :827–862, 1996.
- [PC02a] P. PONTE-CASTANEDA. Second-order homogenization estimates for non linear composites incorporating field fluctuations : 1 -theory. *J. Mech. Phys. Solids*, 50 :737–757, 2002.
- [PC02b] P. PONTE-CASTANEDA. Second-order homogenization estimates for non linear composites incorporating field fluctuations : 2 - applications. *J. Mech. Phys. Solids*, 50 :759–782, 2002.
- [PCS98] P. PONTE-CASTANEDA and P. SUQUET. Non linear composites. *Adv. Appl. Mech.*, 34 :171–302, 1998.
- [PCT00] P. PONTE-CASTANEDA and E. TIBERIO. A second-order homogenization method in finite elasticity and applications to black-filled elastomers. *J. Mech. Phys. Solids*, 48 :1389–1411, 2000.
- [PCW95] P. PONTE-CASTANEDA and J.R. WILLIS. The effect of spatial distribution on the effective behavior of composite materials and cracked media. *J. Mech. Phys. Solids*, 43 :1919–1951, 1995.
- [RABZ07] A. REKIK, F. AUSLENDER, M. BORNERT, and A. ZAOUI. Objective evaluation of linearization procedures in nonlinear homogenization : A methodology and some implications on the accuracy of micromechanical schemes. *Int. J. Solids Struct.*, 44 :3468–3496, 2007.
- [RBAZ05] A. REKIK, M. BORNERT, F. AUSLENDER, and A. ZAOUI. A methodology for an accurate evaluation of the linearization procedures in nonlinear mean field homogenization. *C.R. Mécanique*, 333 :789–795, 2005.
- [RBG⁺89] H.P. RICHTER, L.R. BOYER, K.J. GRAHAM, A.H. LEPIC, and N.C. ZWIERZCHOWSKI. Shock sensitivity of damaged energetic materials. 1989.

- [RG97] S. REESE and S. GOVINDJEE. A presentation and comparison of two large deformation viscoelasticity models. *J. Engrg. Mat. Tech.*, 119 :251–255, 1997.
- [ROG06] E. ROGUET. *Caractérisation expérimentale et modélisation de l'état relaxé dans le polyamide 11 à hautes températures*. PhD thesis, ENSMA - Université de Poitiers, 2006.
- [RSZ93] Y. ROUGIER, C. STOLZ, and A. ZAOUI. Représentation spectrale en viscoélasticité linéaire des matériaux hétérogènes. *C.R. Acad. Sci. Paris*, 316 :1517–1522, 1993.
- [SAL81] M. SALVIA. *Propriétés dynamiques des propergols solides composites*. PhD thesis, Université de Lyon 1, 1981.
- [SB01] P. SUQUET and M. BORNERT. Rappels de calcul tensoriel et d'élasticité. In : *Homogénéisation en mécanique des matériaux 1 - Matériaux aléatoires élastiques et milieux périodiques*. HERMES Science Publications, Paris, 2001.
- [SID74] F. SIDOROFF. Un modèle viscoélastique non linéaire avec configuration intermédiaire. *J. de Mécanique*, 13 :679–713, 1974.
- [SIM87] J.C. SIMO. On a fully three dimensional finite-strain viscoelastic damage model : formulation and computational aspects. *Comput. Methods in Appl. Mech. Engrg.*, 60 :153–173, 1987.
- [SP80] E. SANCHEZ-PALENCIA. *Non homogeneous media and vibration theory*. Lecture Notes in Physics 127, Ed. Springer Verlag, Berlin, 1980.
- [STO87] C. STOLZ. *Anélasticité et stabilité*. PhD thesis, Université Pierre et Marie CURIE, Paris, 1987.
- [SUQ85] P. SUQUET. Approach by homogenization of some linear and non linear problems in solid mechanics. in : *Plastic behavior of anisotropic solids*. Ed. J.P. Boehler, Editions du CNRS, 1985.
- [SUQ87] P. SUQUET. Elements of homogenization for inelastic solid mechanics. In : *Sanchez-Palencia E., Zaoui A. (Eds), Homogenization Techniques for Composite Media*, Springer-Verlag, BERLIN, 1987.
- [SUQ03] P. SUQUET. Homogénéisation de matériaux non linéaires. Cours de l'école d'été CNRS Homogénéisation en Mécanique et Physique des Matériaux, 2003.
- [SZ91] C. STOLZ and A. ZAOUI. Analyse morphologique et approches variationnelles du comportement d'un milieu élastique hétérogène. *C. R. Acad. Sci.*, 312 :143–150, 1991.
- [TDFL01] H. TRUMEL, A. DRAGON, A. FANGET, and P. LAMBERT. A constitutive model for the dynamic and high-pressure behaviour of a propellant-like material : Part 1 : Experimental background and general structure of the model. *Int. J. Numer. Anal. Meth. Geomech.*, 25 :551–579, 2001.

- [TDLM99] H. TRUMEL, A. DRAGON, P. LAMBERT, and C. MARTIN. Vulnérabilité des explosifs - premiers travaux de modélisation de l'endommagement des explosifs composites. Rapport Technique T99 - 0032, Centre d'Etudes de Gramat, 1999.
- [TGD07] J.M. TYRUS, M. GOSZ, and E. DESANTIAGO. A local finite element implementation for imposing periodic boundary conditions on composite micromechanical models. *Int. J. Solids Struct.*, 44 :2972–2989, 2007.
- [TNMDF07] M. TOUBOUL, C. NADOT-MARTIN, A. DRAGON, and A. FANGET. A multi-scale "morphological approach" for highly-filled particulate composites : evaluation in hyperelasticity and first application to viscohyperelasticity. *Archives of Mechanics*, 59(4-5) :403–433, 2007.
- [TRU96] H. TRUMEL. *Un modèle viscoélastique-viscoplastique pour un composite particulaire. Application à un problème de pénétration dynamique*. PhD thesis, Université de Poitiers, 1996.
- [TRU99] H. TRUMEL. Etude mécanique et microstructurale de l'explosif composite g2238. Note interne du CEG, 1999.
- [ZAO01] A. ZAOUI. Changement d'échelle : motivation et méthodologie. In : Homogénéisation en mécanique des matériaux 1 - Matériaux aléatoires élastiques et milieux périodiques. HERMES Science Publications, Paris, 2001.
- [ZAO06] A. ZAOUI. Aspects mécaniques de la plasticité multiéchelle. Exposé lors du congrès Matériaux 2006, 2006.
- [ZR93] A. ZAOUI and J.L. RAPHANEL. On the nature of the intergranular accommodation in the modeling of elastoviscoplastic behavior of polycrystalline aggregates. MECAMAT'91, "Large Plastic Deformation, Fundamentals and Application to Metal Forming", Teodosiu, Raphanel and Sidoroff (eds), Balkema, Rotterdam, 1993.