

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



**Université de Batna 2**  
**Faculté de Technologie**  
**Département de Génie Mécanique**



## **THÈSE**

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

Par

**Mohamed Said Boutaani**

**Thème**

---

**Détermination du volume élémentaire représentatif  
(VER) et les propriétés macroscopiques d'un matériau  
hétérogène à microstructure aléatoire**

---

Soutenue le 17/01/2018 Devant le jury :

|                        |       |                               |              |
|------------------------|-------|-------------------------------|--------------|
| OUTTAS Toufik          | Prof. | Université de Batna 2         | Président    |
| MADANI Salah           | Prof. | Université de Batna 2         | Encadreur    |
| KANIT Toufik           | Dr.   | Université de Lille 1 -France | Co-encadreur |
| AMEDDAH Hacene         | MCA.  | Université de Batna 2         | Examineur    |
| BELKACEM BOUZIDA Aissa | Prof. | Université de Batna 1         | Examineur    |
| ZIDANI Mosbah          | Prof. | Université de Biskra          | Examineur    |

# Remerciements

Ce travail de thèse a été effectué au Laboratoire de Recherche en Mécanique des structures et Matériaux (*LaMSM*) du département de mécanique, Faculté de technologie, Université de Batna 2.

J'adresse mes tous premiers remerciements à mes directeurs de thèse le Pr. Madani Salah de l'Université de Batna 2 et le Dr. Kanit Toufik de l'Université Sciences et Technologies de Lille1, France, pour leurs contributions très importantes sur tous les plans et pour la disponibilité durant cette période. Je tiens aussi à remercier les membres du jury pour avoir accepté d'examiner ce travail.

Je tiens à remercier mon cher ami FEDAOUI Kamel qui m'a énormément soutenu et avec qui j'ai partagé de bons moments malgré les obstacles et les difficultés qu'on a rencontré durant la période de préparation de cette thèse. Je remercie également tous mes amis de l'université de Batna 2.

Je ne terminerai jamais sans remercier mes amis et collègues de l'université A. Mira de Béjaïa, notamment, Pr Yousef KHELFAOUI, Brahim BANOUNE, Toufik BAOUZ, Ali BRARA, Mustapha HAZZAM, Abdelkader IDDIR, Ahmed LAICHAOUI, Nasserddine OUDNI et Mme Dalila BEICHA.

Enfin, j'adresse mes remerciements à tous les membres de ma famille, notamment, mon père et ma chère mère, ma femme et mes deux enfants, ainsi que mes frères & sœurs pour leurs soutiens durant toute cette période.

*Mohamed Said Boutaani*

# Tableau des matières

|                                                                                   |     |
|-----------------------------------------------------------------------------------|-----|
| Tableau des matières .....                                                        | iii |
| Liste des Tableaux.....                                                           | vi  |
| Liste des figures .....                                                           | vii |
| Symbole & Notations générales.....                                                | x   |
| <b>Introduction générale</b> .....                                                | 1   |
| Plan du mémoire.....                                                              | 4   |
| <b>Chapitre I. Notions d'homogénéisation en élasticité linéaire</b> .....         | 6   |
| I.    Notions d'homogénéisation en élasticité linéaire.....                       | 7   |
| I.1    Introduction .....                                                         | 8   |
| I.2    Le concept du Volume Élémentaire Représentatif (VER) .....                 | 11  |
| I.3    Rappels de la théorie d'élasticité et la micromécanique.....               | 20  |
| I.3.1    Lois de comportement.....                                                | 21  |
| I.3.2    Lois de comportement & la relation déformation- déplacement.....         | 22  |
| I.3.3    Equations d'équilibre .....                                              | 22  |
| I.3.4    Problème de l'élasticité linéaire macroscopique .....                    | 22  |
| I.3.5    Les champs de contraintes-déformations micro-macro échelle .....         | 23  |
| I.4    Principes et représentation du milieu hétérogène .....                     | 25  |
| I.4.1    Représentation .....                                                     | 26  |
| I.4.2    Localisation .....                                                       | 27  |
| I.4.3    Homogénéisation.....                                                     | 27  |
| I.5    Présentation de quelques modèles analytiques de changement d'échelles..... | 29  |
| I.5.1    Bornes de Voigt et Reuss .....                                           | 30  |
| I.5.2    Bornes de Hashin - Shtrikman .....                                       | 31  |
| I.5.3    Modèle Self-consistent (Autocohérent) .....                              | 32  |
| I.6    Conclusion.....                                                            | 32  |
| <b>Chapitre II. Génération et maillage des microstructures</b> .....              | 33  |
| II.    Génération et maillage des microstructures .....                           | 34  |
| II.1    Introduction .....                                                        | 35  |

|                                                                     |                                                                                           |           |
|---------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>II.2</b>                                                         | <b>Modélisation de la microstructure : génération et maillage de microstructures.....</b> | <b>35</b> |
| II.2.1                                                              | Modèles de génération et reconstitution des microstructures .....                         | 36        |
| II.2.2                                                              | La reconstitution à partir d'un tomographe.....                                           | 37        |
| II.2.3                                                              | Modèle d'addition séquentielle aléatoire (RSA).....                                       | 40        |
| II.2.4                                                              | Modèle de génération par la technique dynamique moléculaire.....                          | 41        |
| <b>II.3</b>                                                         | <b>Génération de microstructures aléatoires en 2 et 3 dimensions.....</b>                 | <b>44</b> |
| II.3.1                                                              | Génération des particules en 2D dans une cellule carrée - Modèle 2D.....                  | 45        |
| II.3.2                                                              | Génération des particules en 3D dans un volume cubique - Modèle 3D .....                  | 48        |
| <b>II.4</b>                                                         | <b>Estimation du temps d'affichage de microstructure à N particules.....</b>              | <b>51</b> |
| <b>II.5</b>                                                         | <b>Différentes méthodes de maillage .....</b>                                             | <b>56</b> |
| II.5.1                                                              | Maillage régulier .....                                                                   | 56        |
| II.5.2                                                              | Maillage adaptatif.....                                                                   | 56        |
| <b>II.6</b>                                                         | <b>Maillage 2D/3D des microstructures .....</b>                                           | <b>57</b> |
| <b>II.7</b>                                                         | <b>Conclusion.....</b>                                                                    | <b>60</b> |
| <b>Chapitre III. Etude des matériaux poreux à deux phases .....</b> |                                                                                           | <b>61</b> |
| <b>III.</b>                                                         | <b>Etude des matériaux poreux à deux phases.....</b>                                      | <b>62</b> |
| III.1                                                               | Introduction.....                                                                         | 63        |
| III.2                                                               | Description et génération de la microstructure en 2D.....                                 | 64        |
| III.2.1                                                             | Description de la microstructure .....                                                    | 64        |
| III.2.2                                                             | Propriétés élastiques des composants.....                                                 | 66        |
| III.3                                                               | Procédure de calcul de la microstructure .....                                            | 67        |
| III.3.1                                                             | Processus de génération et maillage de la microstructure en 2D .....                      | 67        |
| III.3.2                                                             | Maillage de la microstructure.....                                                        | 68        |
| III.3.3                                                             | Conditions aux limites.....                                                               | 69        |
| III.4                                                               | Estimation des Propriétés élastiques apparentes et effectives .....                       | 71        |
| III.5                                                               | Fluctuation des propriétés effectives et détermination de la portée intégrale .....       | 75        |
| III.5.1                                                             | Notion de la portée intégrale .....                                                       | 75        |
| III.5.2                                                             | Les dispersions des propriétés élastiques .....                                           | 76        |
| III.6                                                               | Détermination du volume élémentaire représentative VER .....                              | 84        |
| III.7                                                               | Conclusion .....                                                                          | 88        |

|                                                                                           |            |
|-------------------------------------------------------------------------------------------|------------|
| <b>Chapitre IV. Comportement équivalent d'un matériau à structure complexe en 3D.....</b> | <b>90</b>  |
| IV. Comportement équivalent d'un matériau à structure complexe en 3D .....                | 91         |
| IV.1 Introduction.....                                                                    | 92         |
| IV.2 Description et génération de la microstructure en 3D.....                            | 93         |
| IV.3 Génération des deux microstructures .....                                            | 94         |
| IV.3.1 Génération d'une microstructure réelle.....                                        | 94         |
| IV.3.2 Génération d'une microstructure à particules .....                                 | 95         |
| IV.4 Méthode de calcul des propriétés élastiques .....                                    | 95         |
| IV.4.1 Génération de maillage et densité de maille.....                                   | 96         |
| IV.4.2 Conditions aux limites.....                                                        | 97         |
| IV.5 Résultats et discussion .....                                                        | 98         |
| IV.6 Effet de la fraction volumique sur les propriétés élastiques effectives.....         | 101        |
| IV.7 Concept de la morphologie équivalente.....                                           | 101        |
| IV.8 Conclusion .....                                                                     | 108        |
| <b>Conclusion générale &amp; perspectives .....</b>                                       | <b>109</b> |
| Conclusion générale et perspectives.....                                                  | 110        |
| Annexe .....                                                                              | 112        |
| <b>Bibliographie.....</b>                                                                 | <b>114</b> |
| Résumé.....                                                                               | i          |
| Abstract .....                                                                            | i          |

# Liste des Tableaux

|                                                                                                                                                                                    |     |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| Tableau II.1 Temps de génération de sphères avec une fraction 32%.....                                                                                                             | 54  |
| Tableau II.2 Temps de génération de sphères avec une fraction 35%.....                                                                                                             | 54  |
| Tableau II.3 Temps de génération de sphères avec une fraction 40%.....                                                                                                             | 55  |
| Tableau II.4 Temps de génération de sphères avec une fraction 50%.....                                                                                                             | 55  |
| Tableau III.1 Les propriétés élastiques des composants.....                                                                                                                        | 66  |
| Tableau III.2 Le nombre de réalisations $n$ , considéré pour chaque nombre d'inclusions $N$ ....                                                                                   | 66  |
| Tableau III.3 Les valeurs de résultats numériques, Bornes $VR$ , Bornes $HS$ et $SCM$ pour des propriétés élastiques effectives d'un matériau poreux hétérogène à deux phases..... | 77  |
| Tableau III.4. Portée intégrale pour les modules $k$ et $\mu$ dans le cas des trois fractions utilisées.....                                                                       | 85  |
| Tableau IV.1 Propriétés mécaniques des deux microstructures.....                                                                                                                   | 93  |
| Tableau IV.2 Les cas de composite utilisés pour la simulation numérique.....                                                                                                       | 93  |
| Tableau IV.3 Taille VER à partir de calculs numériques.....                                                                                                                        | 101 |
| Tableau IV.4 : Résultats numériques pour le module de compression pour les deux matériaux (complexe et sphérique) avec les limites HS.....                                         | 103 |
| Tableau IV.5 : Résultats numériques pour le module de compression pour les deux matériaux (complexe et sphérique) avec les limites HS.....                                         | 103 |

# Liste des figures

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |    |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Figure I-1 Photo de microscopie électronique à balayage d'un matériau polymère poreux .....                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       | 9  |
| Figure I-2 Matériaux polymères nano-poreux à porosité et fonctionnalité contrôlées. ....                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          | 10 |
| Figure I-3 Schéma explicatif l'homogénéité statistique .....                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      | 12 |
| Figure I-4 Schéma illustratif de la taille de VER (Zohdi, 2002).....                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              | 13 |
| Figure I-5 Série de volumes de matériau analyses comme <i>VER avec une fraction fixée</i> (Zohdi, 2002).....                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      | 13 |
| Figure I-6 (a) plusieurs cellules microstructurales de tailles différentes. (b) La convergence des propriétés apparentes aux valeurs effectives avec l'augmentation de la taille des cellules microstructurale pour différents types de conditions aux limites .....                                                                                                                                                                              | 14 |
| Figure I-7 Réponse de convergence en fonction du module de cisaillement $\mu$ d'un échantillon du matériau avec l'augmentation du nombre de particules.....                                                                                                                                                                                                                                                                                       | 14 |
| Figure I-8 Variation du module d'Young effectif moyen et de l'erreur en fonction de la taille du <i>VER</i> (image adaptée par Kari et <i>al.</i> 2007).....                                                                                                                                                                                                                                                                                      | 15 |
| Figure I-9 Vérification de l'indépendance des conditions aux limites avec l'augmentation du volume de contrôle (Terada et <i>al.</i> , 2000) .....                                                                                                                                                                                                                                                                                                | 16 |
| Figure I-10 Valeurs moyennes et intervalles de confiance du module de compressibilité $k^{app}$ en fonction de la taille du <i>VER</i> (Kanit et <i>al.</i> , 2003). ....                                                                                                                                                                                                                                                                         | 17 |
| Figure I-11 Schéma de l'équivalent d'un matériau hétérogène périodique.....                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       | 20 |
| Figure I-12 Les composantes du tenseur des contraintes $\sigma(x)$ , au point matériel (le cuboïde) $x \in V$ . Les composants sont donnés par rapport à la base de repère.....                                                                                                                                                                                                                                                                   | 21 |
| Figure I-13 Etapes d'homogénéisation .....                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        | 25 |
| Figure I-14 Direction utilisée par la limite Voigt pour calculer la rigidité du composite.....                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    | 30 |
| Figure I-15 Direction utilisée par la limite Reuss pour calculer la rigidité du composite. ....                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   | 31 |
| Figure II-1 Microstructure d'un réfractaire électro-fondu zircone-verre caractérisée par microtomographie (Madi, 2006). Volume représenté : 350 x 350 x 700 $\mu\text{m}$ , (a) Segmentation du volume pour séparer les phases en présence. (b) Détection de l'isosurface, et triangulation. (c) Maillage obtenu (éléments tétraédriques linéaires, 1 500 000 degrés de liberté). La zircone est ici en rouge, et la phase vitreuse en jaune..... | 38 |
| Figure II-2 Champ de déformation axiale sur une surface libre après 5% de déformation macroscopique sur du cuivre OFHC. A gauche : champ expérimental. A droite : champ obtenu par calculs éléments finis, avec une microstructure représentative, un maillage libre fin                                                                                                                                                                          |    |

|                                                                                                                                                                                                                         |    |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| respectant les joints de grains (130 818 nœuds), et des conditions aux limites de déformation homogènes aux contours (Musienko et al., 2007). .....                                                                     | 38 |
| Figure II-3 Etape de préparation et génération d'une microstructure réelle .....                                                                                                                                        | 39 |
| Figure II-4 Schéma de la procédure de traitement d'une microstructure réelle pour la simulation .....                                                                                                                   | 39 |
| Figure II-5 Microstructure générée à l'aide d'algorithme aléatoire séquentielle Adsorption (RSA). Nombre de sphères = 30, fraction volumique = 30%. (Segurado and Llorca, 2002).....                                    | 41 |
| Figure II-6 Packing d'ellipsoïdes aplatis généré en utilisant l'algorithme de dynamique moléculaire proposé par (Donev et al. 2005a,b). Nombre de l'ellipsoïdales = 1000, fraction volumique = 70% (Donev, 2006). ..... | 42 |
| Figure II-7 Génération des particules en 2D dans une cellule carrée.....                                                                                                                                                | 44 |
| Figure II-8 Génération des particules en 3D dans une cellule cubique.....                                                                                                                                               | 44 |
| Figure II-9 Propriétés géométriques initial de la cellule carrée .....                                                                                                                                                  | 45 |
| Figure II-10 Définition de la géométrie paramétrage des particules a) cercles, b) carrés c) elliptiques .....                                                                                                           | 46 |
| Figure II-11 Algorithme de génération aléatoire de particules en 2D dans un VE. ....                                                                                                                                    | 47 |
| Figure II-12 Propriétés géométriques de la cellule cubique.....                                                                                                                                                         | 48 |
| Figure II-13 Définition de la géométrie et du paramétrage des particules, a) cube, b) sphère, c) ellipsoïdale. ....                                                                                                     | 48 |
| Figure II-14 Algorithme de génération aléatoire de particules en 3D dans un VE. ....                                                                                                                                    | 50 |
| Figure II-15 Génération de différentes cellules contient des sphères avec une fraction volumique de 5%.....                                                                                                             | 52 |
| Figure II-16 Procédure RSA pour la génération des sphères aléatoires.....                                                                                                                                               | 53 |
| Figure II-17 Représentation de l'interface 2D .....                                                                                                                                                                     | 57 |
| Figure II-18 Maillage 2D et 3D de la géométrie d'une microstructure .....                                                                                                                                               | 58 |
| Figure II-19 Effet du nombre des éléments sur les valeurs du module de compressibilité apparent $k^{app}$ et module de cisaillement apparent $\mu^{app}$ .....                                                          | 58 |
| Figure II-20 Superposition entre le maillage et les images (cas 2D & 3D) .....                                                                                                                                          | 59 |
| Figure III-1 Modèle équivalent du matériau à deux phases .....                                                                                                                                                          | 63 |
| Figure III-2 Fraction volumique 0.10 d'inclusions, a) 5 inclusions, b) 10 inclusions, c) 200 inclusions.....                                                                                                            | 65 |
| Figure III-3 Fraction volumique 0.30 d'inclusions, a) 5 inclusions, b) 10 inclusions, c) 200 inclusions.....                                                                                                            | 65 |



|                                                                                                                                                                                                        |    |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Figure III-4 Fraction volumique 0.50 d'inclusions, a) 5 inclusions, b) 10 inclusions, c) 200 inclusions.....                                                                                           | 65 |
| Figure III-5 Microstructure étudiée en 2D .....                                                                                                                                                        | 66 |
| Figure III-6 Processus de génération, maillage de la microstructure en 2D et calcul des propriétés $k$ , $\mu$ & $E$ .....                                                                             | 68 |
| Figure III-7 Volume élémentaire représentatif <i>VER</i> associé au composite anisotrope :.....                                                                                                        | 69 |
| Figure III-8 Courbes de convergence des propriétés élastiques apparentes en fonction de la taille du domaine $V$ avec des conditions aux limites <i>KUBC</i> pour $P = 0,10$ : .....                   | 72 |
| Figure III-9 Courbes de convergence des propriétés élastiques apparentes en fonction de la taille du domaine $V$ avec des conditions aux limites <i>KUBC</i> pour $P = 0,30$ : .....                   | 73 |
| Figure III-10 Courbes de convergence des propriétés élastiques apparentes en fonction de la taille du domaine $V$ avec des conditions aux limites <i>KUBC</i> pour $P = 0,50$ : .....                  | 74 |
| Figure III-11 Courbes de convergence des propriétés élastiques apparentes en fonction de la taille du domaine $V$ avec des conditions aux limites <i>PBC</i> pour $P = 0,10$ : .....                   | 78 |
| Figure III-12 Courbes de convergence des propriétés élastiques apparentes en fonction de la taille du domaine $V$ avec des conditions aux limites <i>PBC</i> pour ( $P = 0,30$ : .....                 | 79 |
| Figure III-13 Courbes de convergence des propriétés élastiques apparentes en fonction de la taille du domaine $V$ avec des conditions aux limites <i>PBC</i> pour $P = 0,50$ : .....                   | 80 |
| Figure III-14 Cartographie des contraintes effectives pour une cellule à 200 cercles et de fraction 10%, a) contrainte $\sigma_{11}$ , b) contrainte $\sigma_{22}$ , c) contrainte $\sigma_{12}$ ..... | 81 |
| Figure III-15 Cartographie des contraintes effectives pour une cellule à 200 cercles et de fraction 30%, a) contrainte $\sigma_{11}$ , b) contrainte $\sigma_{22}$ , c) contrainte $\sigma_{12}$ ..... | 82 |
| Figure III-16 Cartographie des contraintes effectives pour une cellule à 200 cercles et de fraction 50%, a) contrainte $\sigma_{11}$ , b) contrainte $\sigma_{22}$ , c) contrainte $\sigma_{12}$ ..... | 83 |
| Figure III-17 Evolution de <i>VER</i> en fonction de la fraction volumique .....                                                                                                                       | 86 |
| Figure III-18 Relation entre le <i>VER</i> et le contraste .....                                                                                                                                       | 87 |
| Figure IV-1 . Procédé d'obtention des images successives à partir d'une microstructure réelle, a) Microstructure réelle, b) segmentation de la microstructure, c) coupe transversale.....              | 94 |
| Figure IV-2 Exemples de microstructures de différentes fractions volumiques, 5%, b) 10%, c) 20%,.....                                                                                                  | 95 |
| Figure IV-3 Processus de calcul numérique.....                                                                                                                                                         | 96 |
| Figure IV-4 . Exemple de matériau à structure complexe à deux phases : a) structure complexe à 30%, b) maillage 3D.....                                                                                | 96 |
| Figure IV-5 Evaluation du module de compression $k$ en fonction du nombre d'éléments .....                                                                                                             | 97 |

# Symbole & Notations générales

2D Deux dimensions

3D Trois dimensions

[.] : Symbole de matrice

{.} : Symbole de vecteur

*KUBC* : Conditions aux limites cinématiques

*SUBC* : Conditions aux limites statique

*PBC* : Conditions aux limites périodiques

*VE* : Volume élémentaire

*VER* : Volume élémentaire représentatif

*MHE* : Milieu homogène équivalent

HS : Les bornes de Hashin-Shtrikman

HS+ : Les bornes supérieurs de Hashin-Shtrikman

HS- : Les bornes inférieures de Hashin-Shtrikman

SC: Auto coherent (Self-consistent)

P, V : Fraction volumique

$f_m$  : Fraction volumique de la matrice

$f_i$  : Fraction volumique de l'inclusion

$\underline{x}$  : Point matériel

$\underline{u}$  : Vecteur de déplacement

$V$  : Domaine (où cellule)

$\partial V$  : Contour du domaine

$\delta_{ij}$  : Opérateur de Kronecker

$\langle . \rangle$  : Opérateur moyen

$b_i$  : Les forces internes du corps solide

$T_i$  : Les trois vecteurs associés aux trois plans perpendiculaires

$\sigma_{ij} = \underline{\underline{\sigma}}$  : Tenseur de contrainte du second ordre symétrique

$\varepsilon_{ij} = \underline{\underline{\varepsilon}}$  : Tenseur de déformation du second ordre symétrique

$\omega_{ij}$  : Tenseur de rotation antisymétrique

$\tilde{\sigma}_{ij}$  et  $\tilde{\varepsilon}_{ij}$  : désigner les fluctuations micro-échelle

$\underline{\underline{C}}^{macro}$  : Tenseur d'élasticité à l'échelle macroscopique

$C_{ijkl} = \underline{\underline{C}}$  : Tenseur de rigidité du quatrième ordre symétrique (tenseur d'élasticité effective)

$A_{ijkl} = \underline{\underline{A}}$  : Tenseur de localisation en déformation identique d'ordre quatre

$B_{ijkl} = \underline{\underline{B}}$  : Tenseur de concentration des contraintes identique d'ordre quatre

$S_{ijkl} = \underline{\underline{S}}(\underline{\underline{x}})$  : Tenseur de complaisance (des souplesses effectives) d'ordre quatre

$E$  : Module de Young

$\nu$  : Coefficient de Poisson

$k$  : Coefficient de compressibilité

$\mu$  : Module de cisaillement

$k_1, k_2$  : Modules de compressibilités (*Bulk*) pour les deux phases (matrice + inclusion)

$\mu_1, \mu_2$  : Modules de cisaillement (*Shear*) pour les deux phases (matrice + inclusion)

$f_1, f_2$  : Fractions volumiques pour les deux phases.

Les signes + et - : désignent les bornes respectivement supérieures et inférieures

$E_m$  et  $E_i$  : sont les tenseur élastique de la matrice et l'inclusion

$l$  : La taille d'une cellule (carrée où cubique)

$r$  : La taille d'une particule (rayon)

$r_1$  et  $r_2$  : Les tailles d'une ellipse

$r_1, r_2$  et  $r_3$  : Les tailles d'une ellipsoïdale

$d, D$  : La distance entre deux particules

$n$  : nombre de réalisations générées

$N = V = V_p$  : nombre de particule

$D_Z$  : Variation d'une propriété physique

$A_2$  : La portée intégrale

$k^{eff}$  : La propriété de compressibilité effective

$\mu^{eff}$  : La propriété de cisaillement effective

$k^{app}$  : La propriété de compressibilité apparente

$\mu^{app}$  : La propriété de cisaillement apparente

# **Introduction générale**

## ***Introduction générale***

Sur le plan formel de la démarche scientifique, cette étude est menée selon une approche micromécanique. Celle-ci s'appuie sur des méthodes des changements d'échelles, numériques et analytiques, visant à déterminer la réponse mécanique globale d'un matériau hétérogène à l'échelle d'un volume élémentaire représentatif (*VER*) et donne également accès aux champs locaux dans ce dernier. Les techniques de modélisation par changement d'échelles, appelé aussi techniques d'homogénéisation, ont pour objectif de prendre en compte des informations sur la microstructure des matériaux, notamment des informations morphologiques, dans leurs modèles de comportement. Notons que le comportement des matériaux à l'échelle d'une structure est fortement dépendant des phénomènes physiques intervenant à l'échelle de leur microstructure.

Les matériaux industriels, ainsi que tout dans la nature, sont en général des matériaux hétérogènes lorsqu'ils sont observés dans une certaine échelle. La détermination des caractéristiques macroscopiques des matériaux hétérogènes est un problème majeur dans de nombreuses applications d'ingénierie et de sciences. L'étude de la relation entre les phénomènes de microstructure et le comportement macroscopique permet non seulement de prédire le comportement des matériaux qui existe déjà, mais fournit également un outil pour la conception de microstructures des matériaux de telle sorte que le comportement macroscopique résultant correspond aux caractéristiques souhaitées. Le calcul de microstructures dans le cadre la mécanique des milieux continus est désormais une discipline scientifique à part entière, et combine les méthodes numériques du calcul des structures et les connaissances en sciences des matériaux.

Il existe de nombreuses façons d'obtenir des propriétés effectives telles que, par exemple, la théorie mathématique de l'homogénéisation, qui est principalement appliquée à des matériaux à structure périodique ([Sanchez-Palencia, 1980](#) ; [Bakhvalov & Panasenko, 1984](#)), les méthodes analytiques ou semi-analytiques et des méthodes d'analyse. Nous pouvons évoquer le modèle de Hashin/Shtrikman ([Hashin & Shtrikman, 1963](#)), la méthode auto-cohérente généralisée de Christensen-Lo ([Christensen & Lo, 1979](#)), ou la méthode de Mori-Tanaka ([Mori & Tanaka, 1973](#)).

Différentes techniques d'évaluation du comportement mécanique de ces matériaux ont été développées et sont toujours sous enquête jusqu'à aujourd'hui, l'une de ces techniques nommée homogénéisation. Cette technique insiste sur l'usage des milieux continus généralisés, comme milieu homogène équivalent à substituer au matériau hétérogène au niveau microscopique. Elle fournit une loi de comportement homogène explicite au niveau macroscopique. Les techniques d'homogénéisation utilisent la notion du volume élémentaire représentatif. Ce *VER* joue un rôle important dans la mécanique et la physique des milieux hétérogènes aléatoires dans le but de déterminer leurs propriétés effectives. Une définition quantitative de la taille du *VER* a été définie dans le travail de ([Kanit et al., 2003](#)) en utilisant une approche numérique et statistique. La taille du *VER* peut être associée à une précision donnée sur l'estimation de la propriété macroscopique recherchée et à un nombre de réalisations d'un volume donné  $V$  de la microstructure. Cette taille dépend de la propriété morphologique ou physique recherchée, du contraste dans les propriétés des phases, de leurs fractions volumique et du nombre de phases dans le milieu hétérogène. Ce dernier point sera étroitement développé dans ce travail. En effet, le but de cette thèse est de prévoir la pertinence des différents modèles analytiques existants et de valider l'approche statistique comme une nouvelle alternative. Une généralisation aux milieux hétérogènes biphasés aléatoires est prévue afin de boucler cette question fondamentale dans la mécanique des milieux hétérogènes.

Ce travail utilise un système d'approche de calcul ainsi que la théorie du champ moyen, également appelé théorie des propriétés effectives, méthode d'analyse et détermination du *VER* ([Kanit, 2002](#) ; [El-Moumen, 2014](#)). L'idée de la méthode est basée sur le fait que les propriétés effectives mesurées dans les expériences sont des rapports entre les champs moyens internes des variables impliquées dans le volume d'un échantillon de la microstructure ([Hori & Nemat-Nasser, 1999](#)). Ce rapport doit être calculé sur un matériau d'échantillon représentatif incorporant une quantité suffisante de micro-inhomogénéités. La propriété effective est déterminée sur la base d'une analyse statistique d'une série des *VERs* soumis à une charge d'essai. Pour calculer les champs internes des différentes variables est nécessaire pour résoudre un problème de condition aux limites pour la microstructure.

La méthode d'homogénéisation que l'on va présenter dans cette thèse est concentrée à l'étude des matériaux hétérogènes isotropes poreux. Sachant que les matériaux poreux sont de plusieurs types et natures. La création du *VER* est fondée sur l'évaluation des propriétés de la

matrice et les propriétés des inclusions pour caractériser les pores. Dans ce travail, le *VER* se compose d'une cellule carrée en 2D et cubique en 3D, avec des particules ou inclusions dispersées dans une matrice, à porosité circulaire en cas 2D, et sphérique en cas 3D. La cellule est donc composée de matrice et d'inclusions. Ce *VER* est soumis à différents chargements macroscopiques en déformation planes et différentes conditions aux limites sont appliquées, en particulier les conditions périodiques en déformations (*KUBC*) ou Periodic boundary conditions (*PBC*), certes plus délicates à implémenter, mais elles donnent de meilleurs estimations ([Kanit et al., 2003](#)). La prédiction du comportement obtenu par la simulation numérique étant confrontée par comparaison avec les résultats donnés par les approches analytiques.

## Plan du mémoire

Dans le but de déterminer le volume élémentaire représentatif d'un matériau hétérogène à structure aléatoire et évaluer leurs propriétés macroscopiques, ce travail est organisé de la manière suivante :

Dans la partie bibliographique de cette thèse, le premier chapitre débute par une présentation des matériaux hétérogènes, et une généralité sur la mécanique des milieux continus (*MMC*) utilisée dans le domaine de la micromécanique. On introduit ensuite certains outils de la modélisation pour décrire les modèles micromécaniques d'homogénéisation.

Le deuxième chapitre se compose de deux parties. Dans la première, on présente le développement d'un outil complètement automatisable développé sous *Python*, permettant la génération de particules aléatoirement dispersées dans un cube périodique en 2D et 3D. En imposant des conditions liées aux interférences entre les particules et leurs collisions afin d'empêcher leur recouvrement et leur contact entre elles, et notamment entre les parois de la cellule. L'objectif est donc de générer numériquement des échantillons de la microstructure d'un matériau composite. Nous nous intéressons dans une deuxième partie, à étudier l'influence de la densité et la finesse du maillage de la cellule en 2D et 3D, en appliquant en particulier les conditions aux limites périodiques.

Le troisième chapitre est consacré à la modélisation par homogénéisation numérique à l'aide du code *ZeBuLon* et le calcul des propriétés effectives d'un matériau poreux en 2D contenant des particules en forme circulaires. Les résultats sont comparés avec les bornes de Hashin-Strikman (*HS*) ([Hashin & Shtrikman, 1963](#)) et le modèle autocohérent de Christensen-Lo ([Christensen & Lo, 1979](#)). Une attention particulière est portée sur la détermination de la taille du volume élémentaire représentatif.

Alors que le dernier chapitre est consacré à une comparaison entre deux microstructures biphasées visées dans ce travail, à morphologies aléatoires. L'une chargée des particules sous forme sphériques, et l'autre de forme plus complexes.

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



## *Chapitre I.*

# **Notions d'homogénéisation en élasticité linéaire**

# I. Notions d'homogénéisation en élasticité linéaire

*Ce chapitre propose une revue bibliographique des connaissances et des travaux portant sur les matériaux composites, en particulier ceux à particules de type inclusions circulaires ou sphériques. Nous nous intéressons à la modélisation de leur comportement élastique linéaire mécanique dans le domaine de l'élasticité. La première partie de ce chapitre est consacrée à la méthodologie de la modélisation par changement d'échelles. Nous présentons la démarche générale de cette modélisation dans le cadre du comportement mécanique, en détaillant les notions d'homogénéisation et de localisation, de volume élémentaire représentatif et les différents types de conditions aux limites employés. La seconde partie présente quelques modèles utilisés pour l'estimation des propriétés effectives d'un matériau hétérogène dans le domaine de changement d'échelles formulés dans le cadre de la mécanique linéaire.*

## I.1 Introduction

Les matériaux hétérogènes sont ceux composés de différentes phases, comme un composite, ou d'un même matériau dans différents états, comme un polycristal. Il est important de souligner l'échelle avec laquelle ces hétérogénéités sont observées. Il existe différents systèmes hétérogènes à la fois synthétiques ou naturels. Au sein de synthèse, on peut citer comme exemples : les composites à fibres ou particules, les matériaux poreux et les nanomatériaux, pour le cas des matériaux naturels, on trouve aussi, les milieux granulaires, le bois, le tissu animal et plant, ...etc.

Les matériaux composites sont des matériaux hétérogènes formés d'au moins deux constituants non miscibles, disposés selon une organisation géométrique particulière. Quasiment tous les composites sont constitués :

- De renforts, prenant généralement la forme de fibres ou de particules, assurant l'essentiel des propriétés mécaniques du composite ;
- D'une matrice dans laquelle sont noyés les renforts, assurant la cohésion de l'ensemble et le transfert des efforts ainsi que l'essentiel des propriétés autres que mécaniques.

Ces matériaux possèdent des microstructures simples ou complexes couvrant un large spectre d'échelles de longueur, qui déterminent leurs propriétés et les performances macroscopiques ([Christensen, 1979](#) ; [Torquato, 2002](#)). Les exigences croissantes en matière de durabilité mondiale, la sécurité nationale, et les énergies renouvelables ont soulevé de grands défis dans le développement de matériaux multifonctionnels qui peuvent atteindre une performance optimale dans des conditions extrêmes ([Sahimi, 2003](#) ; [Millar, 2012](#)). Le succès d'une telle mission repose fortement sur notre capacité à caractériser et modifier les propriétés des matériaux et des comportements sous une myriade de stimuli externes. Ainsi, une compréhension intrinsèque et la connaissance des microstructures complexes et comment ils évoluent dans diverses conditions est extrêmement important.

Lorsqu'un matériau composite soumis à un chargement élastique (mécanique) ou thermique, la différence entre l'état de changement élastique ou thermique des phases constitutives donne l'ordre d'apparition des contraintes élastique/thermiques résultant de cette

homogénéité microscopique. Dans ces conditions, il est essentiel de connaître les propriétés mécaniques/thermiques effectives des matériaux. Ceux-ci peuvent être déterminés en utilisant des modèles analytiques et la simulation numérique. Les modèles analytiques sont généralement associés à des matériaux composites avec des géométries simples, composés de particules de différentes formes.

Parmi les matériaux composites, on trouve les matériaux poreux, ces matériaux ont une caractéristique appelée "la porosité", qui est l'ensemble des vides (ou pores) d'un matériau solide. Les matériaux poreux couramment utilisés dans l'industrie sont d'une structure simple, quoique largement variable.

Les matériaux poreux jouent un rôle important dans l'industrie avec leurs applications très variées dans des domaines aussi divers que ceux concernant l'amélioration du confort des véhicules et la durabilité des véhicules et des routes. Les différents types de matériaux, ainsi que les procédés de fabrication et leurs domaines d'applications, sont présentés : matériaux fibreux, mousses (polyuréthane, mélamine, mousses métalliques) (figures I. 1 et I. 2), textiles et plaques perforées. Des exemples, principalement choisis dans le domaine des mousses, sont analysés en termes de liens entre microstructures et propriétés ou fonctionnalités finales, notamment dans le domaine thermique et acoustique. On parle aussi du nouveau matériau qui s'appelle les matériaux poreux nanostructures.

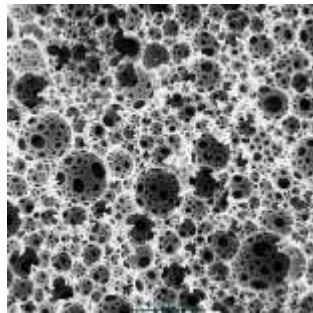


Figure I-1 Photo de microscopie électronique à balayage d'un matériau polymère poreux

(O. Mondain-Monval, H. Deleuze, CRPP/LCOO)

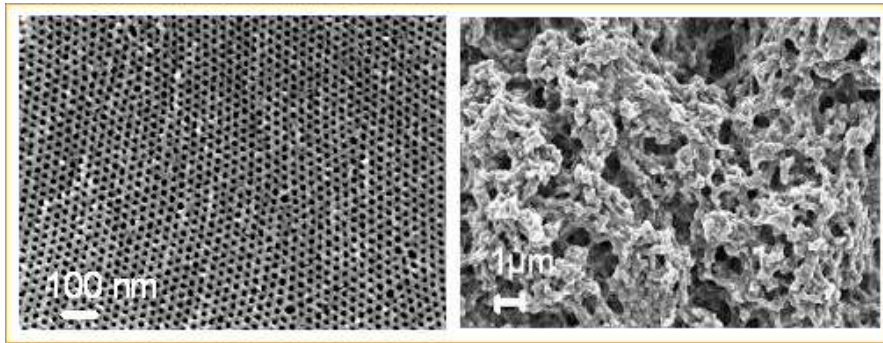


Figure I-2 Matériaux polymères nano-poreux à porosité et fonctionnalité contrôlées.

Les modèles analytiques sont généralement associés à des matériaux composites avec des géométries simples, composés d'inclusions sphériques ou cylindriques, d'où ils peuvent être tirés non seulement des propriétés effectives mécaniques, mais aussi d'obtenir les limites inférieures et supérieures pour ces propriétés. Pour les matériaux composites avec des géométries complexes, on utilise généralement la simulation numérique, en particulier la modélisation par éléments finis. Même en termes de linéaire, la modélisation numérique du comportement mécanique de ces composants structurels est en quelque sorte incapable d'accomplir, en raison qu'il soit nécessaire d'utiliser une grande mémoire et donc un temps de calcul trop long.

Ainsi, pour réduire ces temps de calcul et les coûts élevés liés à la modélisation numérique des composants structuraux en matériaux composites, on peut adopter des techniques nommées "homogénéisation". Ces techniques permettent le remplacement d'un milieu hétérogène par un milieu homogène équivalent, qui permet de donner les lois de comportement des microstructures à partir des informations à l'échelle des microstructures. En général, les matériaux composites présentent des hétérogénéités microstructurales dont les dimensions caractéristiques se révèlent beaucoup plus faible que les dimensions caractéristiques des composants structuraux qui sont normalement insérées. Si la distribution des hétérogénéités au sein de la matrice est présente d'une manière équitable ou aléatoire, la morphologie de ces hétérogénéités peut être généralement approximée par l'arrangement de la deuxième phase dans une cellule élémentaire qui représente des détails microstructuraux du matériau composite.

Le comportement de matériaux hétérogènes est souvent décrit par la notion de volume élémentaire représentatif (VER). En effet, il permet de définir la structure macroscopique à

l'aide d'un échantillon beaucoup plus petit (qui est encore assez grand pour être constitutivement valide). Avant de répondre à la question de la taille du *VER* qui sera considérée dans notre étude, il convient bien définir la notion de *VER* et de résumer les différentes techniques de la littérature visant à identifier sa taille. La question de l'existence du volume élémentaire représentatif pour les matériaux poreux, tels que le béton, est un sujet de recherche actuel ([Gitman et al., 2007](#) ; [Nguyen et al., 2010](#)).

## **I.2 Le concept du Volume Élémentaire Représentatif (VER)**

Le Volume Élémentaire Représentatif (VER) est un concept introduit par ([Hill, 1963](#)), et il est largement utilisé dans l'étude des matériaux hétérogènes. Plusieurs définitions quantitatives de cet élément (VER), détaillant ces caractéristiques et les méthodes de sa détermination, sont trouvées dans la littérature. Différentes définitions du VER sont traduits par l'évaluation de leurs importances de leurs estimations des propriétés effectives du composite. Les définitions donnant la spécificité de cet élément sont énumérées ci-dessous.

[Hill \(1963\)](#), a défini le VER comme un échantillon d'un matériau hétérogène qui remplit les deux conditions suivantes :

- i) contiennent tous les éléments qui caractérisent la microstructure du matériau hétérogène à l'étude ;
- ii) contiennent un nombre suffisant de ces composants de sorte que les propriétés moyennes correspondant au *VER* sont indépendants des conditions aux limites appliquées, à condition que les produits soient homogènes macroscopiquement.

Le *VER* doit être choisi suffisamment grand par rapport à la taille de la microstructure, mais il est le plus petit élément de volume du matériau composite à partir duquel le module macroscopique représentatif reste constant. Il est un modèle suffisamment précis pour représenter la réponse moyenne du comportement du matériau ([Drugan and Willis, 1996](#)).

Le *VER* est défini comme le volume minimal de l'échantillon à l'échelle du laboratoire, de sorte que les résultats obtenus avec cet échantillon puissent encore être considérés comme représentatifs d'un continuum ([Van Mier, 1997](#)).

Un *VER* est le volume de matière minimale, contenant suffisamment de mécanismes de déformation. L'augmentation de ce volume ne devrait conduire ni à des changements d'équations d'évolution pour les différents champs de valeurs, ni à des changements de description de ces mécanismes ([Trusov and Keller 1997](#)).

Le *VER* est un échantillon de matière à utiliser pour déterminer les propriétés effectives du modèle macroscopique homogénéisé. Le *VER* doit être suffisamment grand pour contenir suffisamment d'informations sur la microstructure afin d'être représentatif, mais il doit être beaucoup plus petit que le corps macroscopique ([Hashin Z, 1983](#)).

[Hashin, \(1983\)](#), indique que le *VER* doit être grand par rapport à la taille et l'espacement de cette microstructure typique présent à l'intérieur. Il établit également le concept d'homogénéité statistique des matériaux hétérogènes et la nécessité de son existence à la détermination de l'élément de volume représentatif. Il est défini statistiquement microstructure homogène, comme celui dans lequel ses caractéristiques microstructurales sont les mêmes dans tout élément de volume analysé, indépendamment de leur emplacement. En se appuyant sur la figure I.3, s'il y a une homogénéité statistique, les caractéristiques de la microstructure des volumes  $V_1$ ,  $V_2$  et  $V_3$  sont égaux ([Hollister et Kikuchi, 1992](#)).

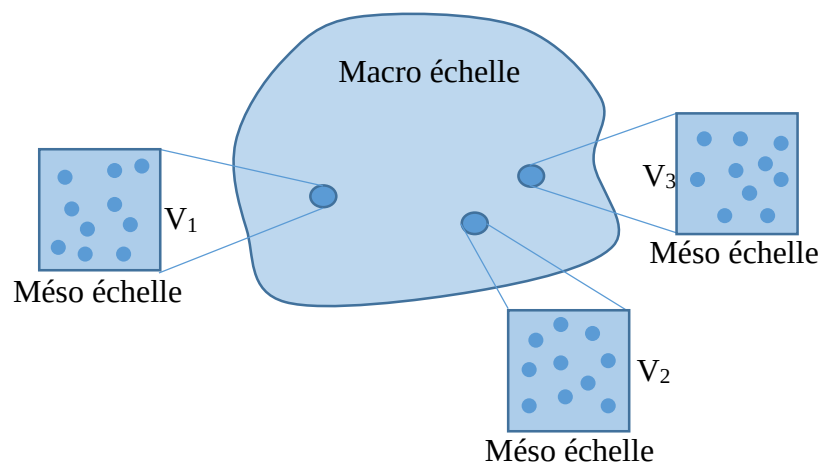


Figure I-3 Schéma explicatif l'homogénéité statistique

Les définitions précédentes suggèrent que le *VER* devrait avoir une représentation suffisante des micro-constituants du matériau analysé. Par conséquent, doit être grande par rapport à la taille caractéristique de cette particule dans la microstructure, mais en même temps doit être faible par rapport aux dimensions des structures à l'échelle macroscopique, parce que

dans le même sera tenu compte des détails de la microstructure d'être l'analyse de l'ordinateur portatif. En résumé, il doit satisfaire à la relation  $L_1 \gg L_2 \gg L_3$  (figure I.4).

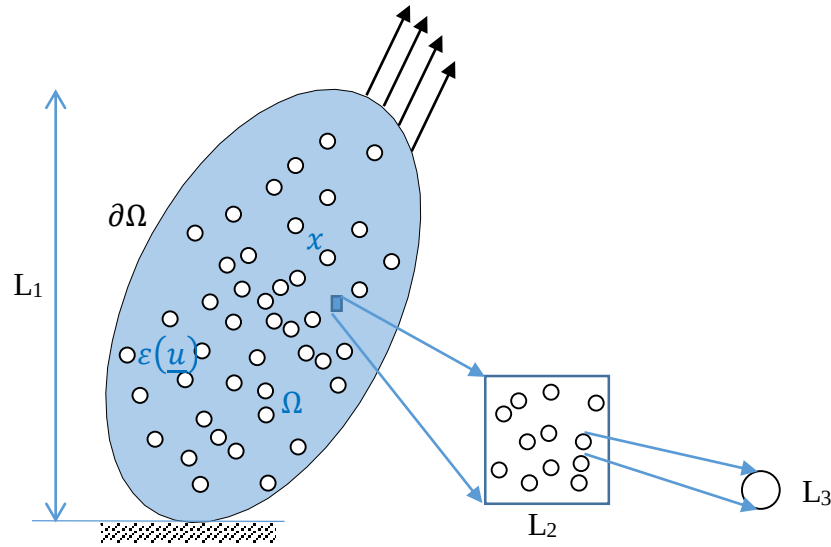


Figure I-4 Schéma illustratif de la taille de VER (Zohdi, 2002)

Malgré la controverse concernant l'utilisation de l'un ou l'autre critère (Aidum *et al.*, 1999), les deux ont été utilisés avec succès (Terada *et al.*, 2000 ; Kanit, 2003), et on vérifie que la taille de *VER* est influencée par des facteurs tels que le degré de dispersion de la fraction du volume des micro-constituants de celui-ci, à la différence des propriétés mécaniques, des biens qui soit homogénéisation, entre autres.

La détermination de la taille de *VER* est effectuée en résolvant des problèmes des échantillons de valeurs micro-constituants dans lequel on vérifie la réponse moyenne des variables de champ (Zohdi, 2002). Habituellement, il va augmenter le nombre d'échantillons dans les micro-constituants, en gardant les fractions de volume constant (figure I.5).

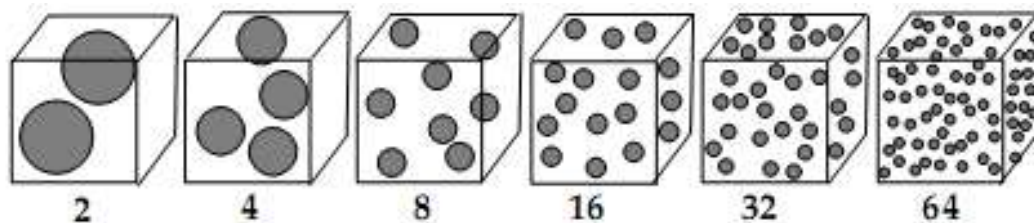


Figure I-5 Série de volumes de matériau analysés comme *VER* avec une fraction fixée (Zohdi, 2002)



Selon les définitions précédentes, le VER sera considéré comme un échantillon représentatif d'un matériau dans lequel une des propriétés homogénéisées sont indépendants des conditions aux limites (figure I.6) (Huet 1990, 1999 ; Ostoja-Starzewski, 1998 ; 1999 ; Pecullan et al., 1999 ; Tarada et al., 2000 ; Kouznetsova, 2001) puis celui pour lequel il est établi l'homogénéité statistique (figure I.7).

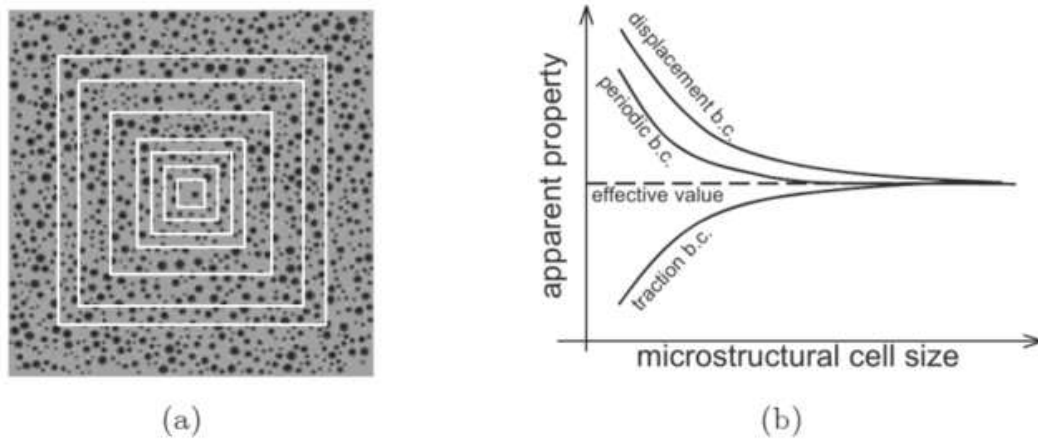


Figure I-6 (a) plusieurs cellules microstructurales de tailles différentes. (b) La convergence des propriétés apparentes aux valeurs effectives avec l'augmentation de la taille des cellules microstructurale pour différents types de conditions aux limites

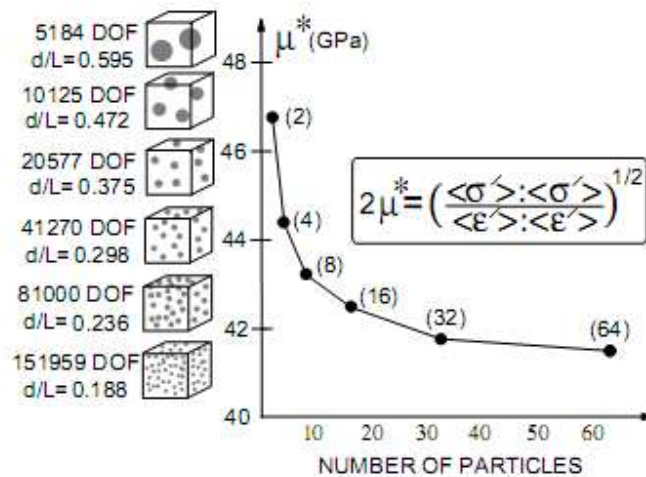


Figure I-7 Réponse de convergence en fonction du module de cisaillement  $\mu$  d'un échantillon du matériau avec l'augmentation du nombre de particules

La définition d'un *VER* est une étape importante des méthodes d'homogénéisation numériques. De manière générale, un *VER* est défini comme le modèle contenant le minimum d'hétérogénéités (ex. des sphères d'un composite formé de particules sphériques distribuées dans une matrice) pour obtenir les propriétés effectives du matériau contenant un plus grand nombre d'hétérogénéités. ([Kanit et al., 2003](#)) ont donné une définition rigoureuse du *VER* en effectuant une étude statistique qui a permis d'obtenir les propriétés effectives avec une précision choisie en effectuant un nombre suffisant d'analyses avec des modèles différents à chaque essai (réalisations). Par exemple, ([Kari et al., 2007](#)) ont utilisé la notion du *VER* pour obtenir les propriétés effectives d'un composite avec une distribution aléatoire de renforts sphériques et élastiques dans une matrice élastique. Ils ont utilisé l'algorithme d'addition séquentielle aléatoire *RSA* ([Wang, 1998](#)) pour générer des modèles de tailles différentes qui représentaient la microstructure. Pour déterminer le module d'Young effectif d'un composite avec une fraction volumique de renforts de 30%, ils ont effectué 5 réalisations pour 5 tailles différentes de modèles. Les résultats de cette analyse sont présentés à la figure I.8 où on note que le module d'Young effectif ne varie plus significativement lorsque la taille du *VER* est augmentée au-delà de la troisième taille. Ce *VER* a été déterminé à partir de la variation d'une propriété effective. ([Khan et al., 2011](#)) ont introduit une définition du *VER* qui découlait de la définition de ([Kanit et al., 2003](#)). Ils ont défini que la taille du *VER* est celle où l'augmentation de la taille (nombre d'hétérogénéités) ne fait plus varier la réponse transitoire sous un chargement donné et ce, pour une précision choisie.

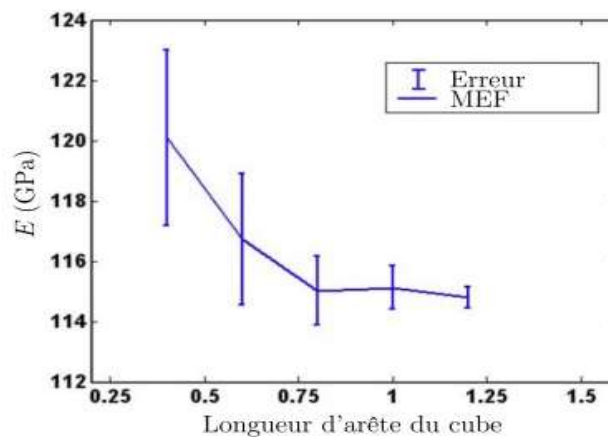


Figure I-8 Variation du module d'Young effectif moyen et de l'erreur en fonction de la taille du *VER* (image adaptée par [Kari et al. 2007](#))

Dans le cas de l'homogénéisation élastique linéaire, ([Terada et al., 2000](#)) ont utilisé le critère d'indépendance des conditions aux limites proposées par les études de Hill, les études

sur la taille du VER d'un composite à base de bore et de silicium, en fonction d'une réponse élastique constante obtenue à partir des valeurs moyennes de contrainte et de déformation. Les volumes de contrôle sont générés par le procédé de traitement d'image à partir de la structure réelle. On peut voir dans les résultats présentés dans la figure I.9, que l'indépendance relative des conditions aux limites appliquées est atteinte, pour une taille d'échantillon d'environ 33 fois plus grande que la taille moyenne des micro-constituants.

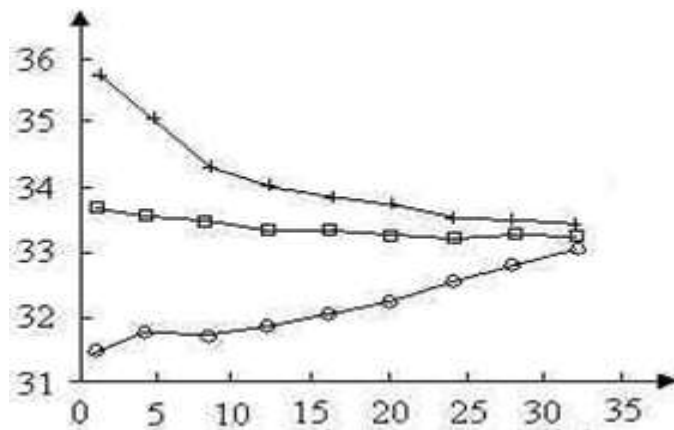


Figure I-9 Vérification de l'indépendance des conditions aux limites avec l'augmentation du volume de contrôle ([Terada et al., 2000](#))

Notons que ces définitions de VER ont toutes été mises en place pour des considérations mécaniques, plus globalement physiques. Toutefois, la taille du VER n'est pas nécessairement unique pour un matériau composite, car il est sensible aux propriétés considérées (mécaniques, physiques...).

Du point de vue (termes) numérique et statique, de nombreuses méthodes ont été proposées dans la littérature pour analyser la taille du VER numériquement. Elles utilisent normalement plusieurs réalisations de l'échantillon à méso-micro échelle, suivi par une simulation numérique par éléments finis de ces échantillons et une procédure statistique pour analyser les résultats. Un exemple typique est fourni par les travaux de ([Kanit et al. 2003](#)), dont la méthodologie peut être résumée ci-dessous :

- (i) Générer différentes réalisations des échantillons pour 4-5 tailles différentes.
- (ii) Soumettre chaque échantillon à des conditions de chargements et enregistrer les propriétés effectives obtenues.

(iii) Calculer la valeur moyenne et la variance de la propriété effective pour les tailles de volume considérées.

(iv) Définir la précision souhaitée pour l'estimation de la propriété effective et un certain nombre de réalisation, utiliser le modèle pour définir la taille finale du VER.

Les résultats obtenus de la propriété homogénéisés (module de compressibilité  $k$ ) en fonction de la taille du volume sont présentés dans la figure I.10. Dans ce cas, il y a une certaine indépendance dans les conditions aux limites que pour un volume de contrôle que le volume de la cellule de Voronoï considérée. Bien que dans ce cas, Ils ont été comparés à des volumes et non à la taille des particules par rapport à la taille de volume contrôle sur le côté utilisé, comme cela avait été montré par ([Terada et al., 2000](#)) que les deux le critère d'indépendance dans les conditions aux limites, que le critère d'homogénéité statistique peut être utilisée pour déterminer le VER.

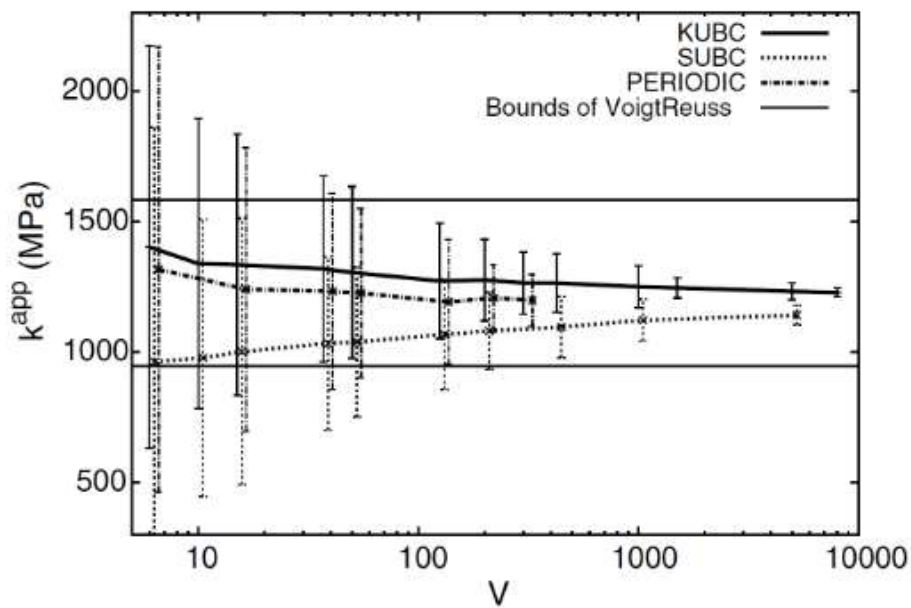


Figure I-10 Valeurs moyennes et intervalles de confiance du module de compressibilité  $k^{\text{app}}$  en fonction de la taille du VER ([Kanit et al., 2003](#)).

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

Du point de vue expérimental, de nombreuses tentatives ont été faites pour déterminer la taille du VER expérimentalement. ([Romero et Masad, 2001](#)) présentent un fond théorique sur les besoins statistiques pour un VER. Une technique d'analyse d'image en utilisant la tomographie par rayons X a été employée pour déterminer le VER en mesurant le volume auquel la fraction volumique totale des granulats devient indépendante de la taille du volume analysé et atteint une valeur constante. La fraction volumique de granulats a été dérivée à partir de différentes zones d'images bidimensionnelles d'un béton asphaltique.

Dans l'analyse expérimentale de ([Al-Raoush & Papadopoulos, 2010](#)), il s'agit souvent de la sélection d'une géométrie particulière de l'échantillon pour les essais et de l'analyse d'image de l'échantillon après les essais. Afin d'obtenir des résultats significatifs, un nombre suffisant de particules ou un volume suffisant de matériau doit être inclus à la fois dans l'analyse expérimentale et de l'image.

Enfin, l'estimation de la taille du VER peut également être effectuée de manière analytique. ([Drugan et Willis, 1996](#)) emploient une équation constitutive non-locale explicite pour estimer le VER du matériau élastique. Ils considèrent les champs de déformations moyennes qui varient avec la position, et déterminent à quelle longueur d'onde cette variation entraînera l'apparition d'un terme non-local dans l'équation constitutive. Sur la base de cela, ils estiment la taille minimale du VER.

En définitive, la taille du *VER* est, bien entendu, fonction du milieu étudié (morphologie, fractions volumiques, répartition spatiale des différentes phases, etc.), des propriétés de ses constituants, ainsi que du contraste de propriétés entre ses constituants et, aussi, de ce que l'on cherche à modéliser : comportement thermique, mécanique élastique ou non linéaire.

En plus de ces paramètres, l'obtention du volume élémentaire représentatif *VER* dépend aussi des conditions aux limites *CAL*. En théorie, un *VER* est suffisamment grand pour que son comportement moyen ne dépend pas des *CAL* utilisées pour son chargement. En pratique, on observe que les résultats obtenus sur des volumes élémentaires *VE* diffèrent selon les *CAL*, mais que ces résultats convergent lorsque la taille du *VE* étudié augmente et se rapproche de celle du *VER* ([Kanit et al., 2003](#) ; [Qi, 2006](#) ; [Kari et al., 2007](#)). Il existe plusieurs conditions aux limites utiliser pour analyser le *VER*, les plus utilisés sont les conditions aux limites

périodiques (*PBC*) (*ou mixtes*), ces *PBC* sont ainsi largement utilisées pour analyser le comportement apparent de *VE*. Il est possible de générer des microstructures aléatoires par domaine en imposant une condition de périodicité géométrique afin de pouvoir se placer dans ce cas ([Segurado et Llorca, 2002](#)). Pourtant, ces conditions périodiques n'impliquent aucune restriction sur la géométrie de la microstructure du *VE* étudié ([Özdemir et al., 2008](#)), en plus ces conditions donnent une meilleure estimation des propriétés apparentes par rapport aux conditions homogènes ([Hazanov et Huet, 1994](#) ; [Kanit et al., 2003](#)).

L'approche de calcul d'homogénéisation, ainsi que la plupart des autres techniques d'homogénéisation, sont basées sur le concept d'un volume élémentaire représentatif (*VER*). Un *VER* est un modèle des matériaux de microstructure à utiliser pour obtenir la réponse du continuum macroscopique homogénéisée correspondant à un point matériel macroscopique. Ainsi, le choix approprié du *VER* détermine en grande partie la précision de la modélisation d'un matériau hétérogène.

L'Homogénéisation en matériaux composites dans le cas des *structures périodiques* est basée sur la théorie des développements asymptotiques et a été introduit dans les années 70. Parmi certains de leurs précurseurs sont ([Sanchez-Palencia & Babushka, 1980](#)). Les principales considérations de ce type d'homogénéisation sont :

- i) l'existence d'une périodicité dans la microstructure de la matière, qui, a priori, une méthode consiste à imposer la condition d'homogénéité statistique de celle-ci ([Terada et al., 2000](#)),
- ii) le déplacement total d'un matériau micro-hétérogénéité peut être représenté par un développement asymptotique, comprenant le déplacement de toutes les échelles ([Hollister & Kikuchi, 1992](#)). Dans le cas des matériaux hétérogènes avec des milieux périodiques, la modélisation de ce type est équivalente à une structure de base d'une morphologie de cellule unitaire simple, qui joue le rôle d'un élément de volume représentatif du matériau (figure I.11). Cette caractéristique réduit de manière significative le temps et l'effort de calcul dans l'analyse.

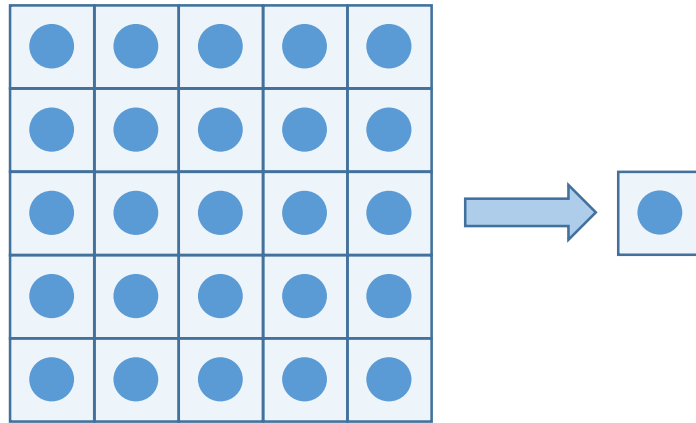


Figure I-11 Schéma de l'équivalent d'un matériau hétérogène périodique

### I.3 Rappels de la théorie d'élasticité et la micromécanique

La mécanique des milieux continus considère généralement, le comportement de la matière solide en supposant qu'il n'y a pas des vides, des discontinuités ou des différences de phase à l'intérieur. Les analyses portent sur le comportement macroscopique d'un solide, peu importe ce qui se passe à des niveaux qui peuvent être identifiés comme microscopiques. À l'échelle macroscopique se développent par exemple, le comportement élastique ou élasto-plastique et le processus de la rupture avec l'apparition de fissures visibles. Depuis plus de deux siècles, cette approche a permis de modéliser et d'analyser la réponse des matériaux en ingénierie.

La théorie de l'élasticité s'insère dans la mécanique des milieux continus (*MMC*) dans laquelle la configuration d'un solide est décrite par un modèle mathématique qui associe chaque point matériel du solide à un point géométrique défini par ses coordonnées. Ainsi, le matériau est constitué de l'ensemble de points matériels et leurs contours. En même temps, la mécanique des milieux continus suppose que la distribution des matériaux, contraintes et déformations dans un milieu (voisinage) infinitésimale de particules typique (macro-éléments) peut être considérée comme uniforme. En micro-échelle, cependant, ce voisinage des matériaux (particules) infinitésimales est généralement pas uniforme, puisque il composé de plusieurs micro-hétérogénéité. Par conséquent, les champs de contraintes et de déformations dans les macroéléments ne sont pas uniformes au niveau des micro-échelles. Le but principal de la micromécanique est d'exprimer en une quantité continue de manière systématique et rigoureuse

associée à un matériel voisinage infinitésimal en fonction des paramètres qui caractérisent la microstructure et les propriétés des micro-constituants du voisinage du matériau.

Dans cette analyse, une révision des concepts basiques de la théorie de l'élasticité et certains théorèmes de la micromécanique qui seront utilisés dans le reste du travail est faite. Une importance particulière est donnée à l'élasticité anisotrope en deux dimensions et aux théorèmes de la Théorie des Champs Moyens utilisés pour trouver les propriétés effectives des matériaux micro-hétérogènes.

### I.3.1 Lois de comportement

L'état des contraintes est donc caractérisé par la relation entre  $T_i$  (ou  $\underline{T}$ ) et  $n_j$  (ou  $\underline{n}$ ). On définit alors le *tenseur des contraintes de Cauchy*  $\sigma_{ij}$  (ou  $\underline{\sigma}$ ) au point matériel qui relie de manière matricielle le vecteur contrainte et la normale :

$$T_i = \sigma_{ij} n_j \quad (\text{où } \underline{T} = \underline{\sigma} \underline{n}) \quad (\text{I.1})$$

où sous forme matricielle :

$$\begin{Bmatrix} t_1^n \\ t_2^n \\ t_3^n \end{Bmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} n_1 \\ n_2 \\ n_3 \end{Bmatrix}$$

où  $T_i$  les trois vecteurs associés aux trois plans perpendiculaires

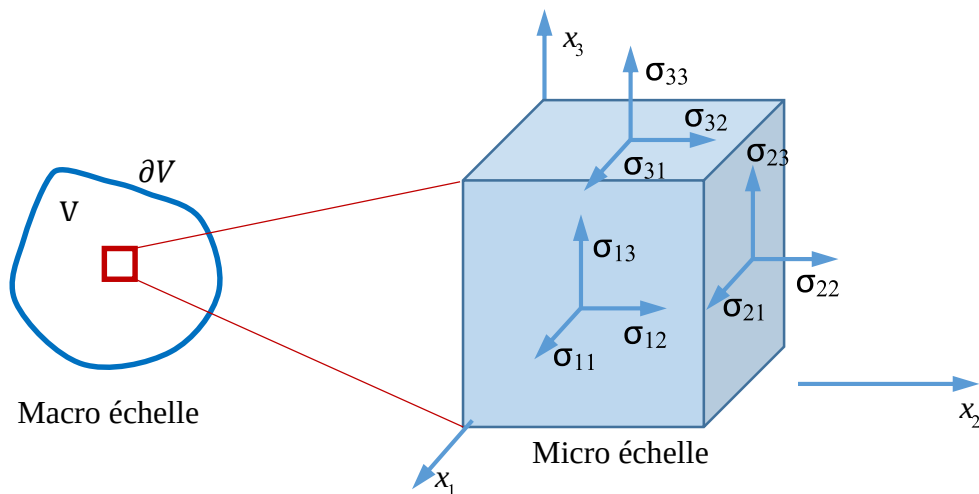


Figure I-12 Les composantes du tenseur des contraintes  $\sigma(x)$ , au point matériel (le cuboïde)  $\underline{x} \in V$ . Les composants sont donnés par rapport à la base de repère.



### I.3.2 Lois de comportement & la relation déformation- déplacement

Dans ce travail, nous considérons l'hypothèse de déformations infinitésimales de Cauchy. Ainsi, les relations contrainte-déplacement sont (Malvern, 1969) :

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}(u_{i,j} + u_{j,i}) \quad (\text{I.4})$$

Où  $\varepsilon_{ij}$  est un tenseur du second ordre symétrique appelé déformations infinitésimales.

La loi de comportement linéaire ou l'équation constitutive linéaire d'un matériau élastique est écrit sous forme :

$$\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{C}} \cdot \underline{\underline{\varepsilon}} \quad (\text{I.5})$$

ou sous forme de notation indicielle :

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl}$$

### I.3.3 Equations d'équilibre

Ce point matériel est considéré comme un élément infinitésimal dans le corps solide  $\Omega$ , la condition d'équilibre de forces conduit à l'équation dite équation d'équilibre de forme :

$$\sigma_{ij,j} + b_i = 0 \quad (\text{I.6})$$

où  $b_i$  sont les forces du corps. La condition d'équilibre des moments conduit à la symétrie du Tenseur des contraintes :  $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$

### I.3.4 Problème de l'élasticité linéaire macroscopique

On définit la relation qui relie le tenseur de déformation macroscopique  $\underline{\underline{E}}$  et le tenseur de contrainte macroscopique  $\underline{\underline{\Sigma}}$  sous la forme matricielle suivante :

$$\underline{\underline{\Sigma}} = \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{E}} \quad (\text{I.7})$$

$$\begin{pmatrix} \Sigma_{11} \\ \Sigma_{22} \\ \Sigma_{33} \\ \Sigma_{12} \\ \Sigma_{23} \\ \Sigma_{31} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ & & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ & & & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ & & & & C_{55} & C_{56} \\ & & & & & C_{66} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{11} \\ E_{22} \\ E_{33} \\ 2E_{12} \\ 2E_{23} \\ 2E_{31} \end{pmatrix}$$

### I.3.5 Les champs de contraintes-déformations micro-macro échelle

La plupart des modèles micromécaniques sont basés sur l'hypothèse que les échelles de longueur dans un matériau hétérogène sont parfaitement séparées. Ceci est interprété comme signifiant que pour chaque paire d'échelles micro-macro, les fluctuations des contributions aux champs (domaines) à l'échelle de longueur inférieure influencent sur le comportement à l'échelle de longueur grande que par leurs moyennes de volume. D'autre part, les gradients des champs, ainsi que des gradients de composition à l'échelle de longueur grande ne sont pas significatifs à l'échelle de longueur inférieure, où ces domaines de semblent être localement constante et peuvent être décrits en termes d'uniforme "appliqué domaines de» ou «domaines de loin". Formellement, ce partage de la déformation et de contrainte dans les champs contributions lents et rapides peut être écrit comme :

$$\underline{\underline{\sigma}} = \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle + \underline{\underline{\tilde{\sigma}}} ; \quad \underline{\underline{\varepsilon}} = \langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle + \underline{\underline{\tilde{\varepsilon}}} \quad (\text{I.8})$$

Sous forme indicielle :

$$\sigma_{ij} = \langle \sigma_{ij} \rangle + \tilde{\sigma}_{ij} ; \quad \varepsilon_{ij} = \langle \varepsilon_{ij} \rangle + \tilde{\varepsilon}_{ij}$$

où  $\sigma_{ij}$ ,  $\varepsilon_{ij}$  désignent les champs micro-contrainte et micro-déformation respectivement,  $\tilde{\sigma}_{ij}$  et  $\tilde{\varepsilon}_{ij}$  désignent les fluctuations micro-échelle de ces champs, et  $\langle . \rangle = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} . d\Omega$  est définie l'opérateur moyenne spatial, où :

$$\langle . \rangle = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} . d\Omega$$

Si les relations (I.8) ne sont pas suffisamment respectées, celle-ci peut prendre la forme d'homogénéisation des systèmes de deuxième ordre qui représentent explicitement des gradients de déformation sur la micro-échelle ([Kouznetsova et al., 2004](#)) et entraîner un comportement homogénéisé non local ([Feyel, 2003](#)).

Dans les échelles de longueur inférieures à celles considérées dans un modèle donné peuvent ou ne peuvent pas être se prêter la description de la mécanique continu. Pour un aperçu des méthodes applicables en dessous de l'échelle continu ([Raabe, 1998](#)).

On suppose que le tenseur des déformations macroscopiques infinitésimales  $E_{ij}$ , qui est la moyenne spatiale du tenseur des déformations infinitésimales  $\varepsilon_{ij}$  (eq. I.4) dans un VER ([Nemat-Nasser & Hori, 1999](#)) :

$$\underline{\underline{E}} = \langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle_{\Omega} \quad (\text{I.9})$$

où

$$E_{ij} = \langle \varepsilon_{ij} \rangle_{\Omega}$$

Noter que ce champ à l'échelle micro n'est pas négligeable, et la moyenne doit être prise sur un *VER*. Ce champ n'est pas satisfait pour certaines quantités cinématiques dans l'analyse non linéaire ([Kouznetsova, 2002](#))

De même, il est postulé que le tenseur des contraintes macroscopiques  $\underline{\underline{\Sigma}}_{ij}$  est la moyenne spatiale de tenseur des contraintes  $\sigma_{ij}$  dans le *VER* ([Nemat-Nasser & Hori, 1999](#)) :

$$\underline{\underline{\Sigma}} = \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_{\Omega} \quad (\text{I.10})$$

où

$$\Sigma_{ij} = \langle \sigma_{ij} \rangle_{\Omega}$$

Le théorème de l'énergie moyenne connue dans la littérature de Hill où la condition macro-homogénéité ([Hill, 1963](#) ; [Suquet, 1985](#)), exige que le volume de travail moyen effectué par les champs internes de contrainte et de déformation dans le *VER* est égal au travail local dans la macro-échelle. Ainsi, pour un matériau micro-hétérogène élastique linéaire est exprimé par la condition de Hill, par :

$$\langle \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle_{\Omega} = \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\varepsilon}} \quad (\text{I.11})$$

où

$$\langle \sigma_{ij} : \varepsilon_{ij} \rangle_{\Omega} = \sigma_{ij} : \varepsilon_{ij}$$

où, comme la relation suivante :

$$\langle \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle_{\Omega} = \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_{\Omega} : \langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle_{\Omega}$$

*micro-énergie de déformation*      *macro-énergie de déformation*

en tenant compte des relations (I.10) et (I.11).

Cette condition est essentielle dans la micromécanique et permet d'interpréter le problème d'homogénéisation d'une façon de trouver un matériau homogène qui est énergétiquement équivalent à une microstructure donnée. Au même temps, elle assure que pour les matériaux avec répartition aléatoire, les propriétés effectives définies en termes d'énergie élastique coïncident avec celle définie en termes de la relation entre la contrainte et la déformation moyenne ([Nemat-Nasser et Hori, 1999](#)). Il est important de noter que cette condition n'est pas satisfaite pour toutes les microstructures.

## I.4 Principes et représentation du milieu hétérogène

Pour calculer le comportement apparent ou/et effectif, nous procédons généralement en étapes principales : la représentation du *VER*, la localisation et enfin l'étape d'homogénéisation. Afin de construire des modèles de comportement prédictifs, des recherches ont été entreprises pour prendre en compte l'hétérogénéité de la matière à l'échelle microscopique dans la modélisation de son comportement macroscopique. La modélisation par changement d'échelles consiste à remplacer un milieu homogène équivalent (*MHE*) à un milieu hétérogène. Cette modélisation permet :

- de simplifier la représentation du milieu hétérogène ;
- d'estimer le comportement de matériaux hétérogènes à élaborer ;
- d'améliorer le caractère prédictif des lois de comportement.

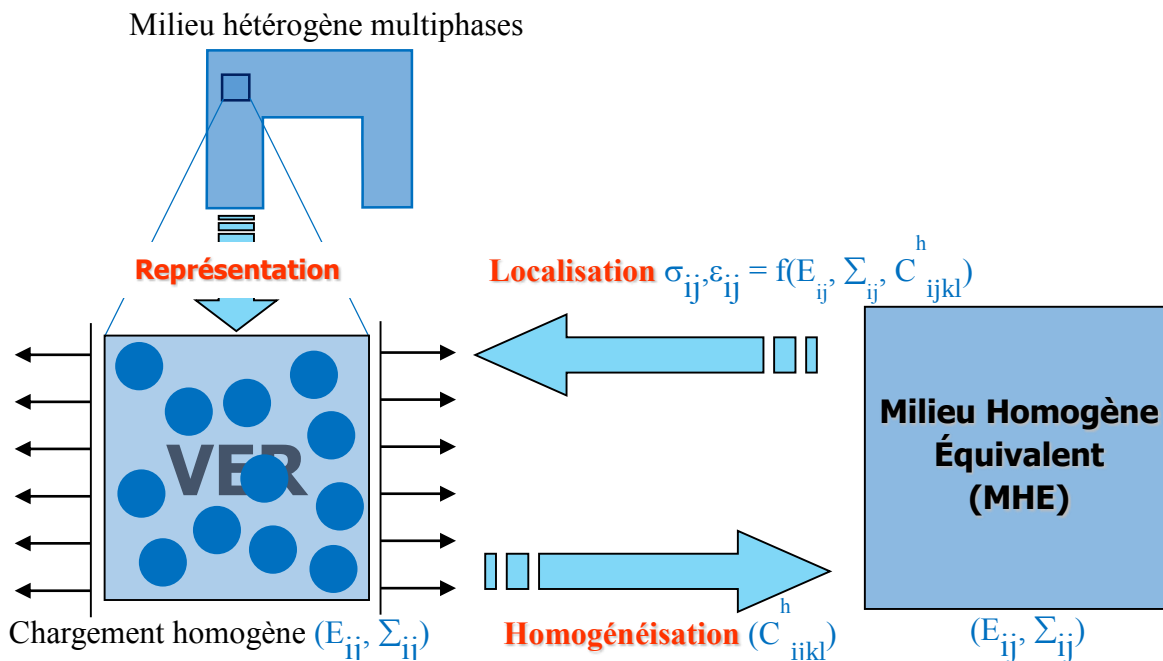


Figure I-13 Etapes d'homogénéisation

L'homogénéisation a pour but de remplacer un matériau ou une structure hétérogène par un milieu homogène de comportement équivalent (figure I-13). Pour atteindre cet objectif, la plupart des modélisations micromécaniques suivent trois étapes :

- l'étape de la représentation : définition des phases, description de leur répartition spatiale et de leur comportement mécanique
- l'étape de la localisation : modélisation mécanique et détermination des relations entre champs locaux et grandeurs macroscopiques

- l'étape d'homogénéisation : opération de moyenne et détermination du comportement effectif.

Nous rappelons ci-dessous les détails de chacune de ces étapes d'homogénéisation. On considère un chargement correspondant à des conditions aux limites homogènes. La surface extérieure  $\partial V$  du *VER* peut être soumise à un déplacement  $u_i$ , tel que :

$$u_i = E_{ij}x_j \quad x \in \partial V \quad (\text{I.12})$$

qui générerait un champ de déformation  $E_{ij}$  uniforme dans tout le volume  $V$ .

Les conditions aux limites de force imposée, compatibles avec un champ de contrainte uniforme  $\Sigma_{ij}$  sont définies telles que :

$$\sigma_{ij}n_j = \Sigma_{ij}n_j \quad x \in \partial V \quad (\text{I.13})$$

La démarche de modélisation par changement d'échelles se décompose classiquement en trois étapes:

### I.4.1 Représentation

Dans l'étape de représentation, le nombre de phases contenues dans le *VER* est très important. On doit déterminer la nature des paramètres permettant la description des phases correspondantes, ensuite, caractériser le comportement mécanique de chaque phase et enfin décrire la géométrie et la proportion de chaque phase. Pour une détermination exacte du comportement effectif du matériau composite, il est nécessaire de connaître de manière précise la répartition spatiale des phases. La fraction volumique de renforts est le paramètre commun à tous les modèles. Le comportement microscopique élastique de chaque phase « i » est donné par :

$$\begin{aligned} \underline{\underline{\sigma}}_i &= \underline{\underline{C}}_i : \underline{\underline{\varepsilon}}_i \\ \text{et} & \\ \underline{\underline{\varepsilon}}_i &= \underline{\underline{S}}_i : \underline{\underline{\sigma}}_i \end{aligned} \quad (\text{I.14})$$

où :  $\underline{\underline{\sigma}}_i$  et  $\underline{\underline{\varepsilon}}_i$  représentent respectivement les contraintes et déformations locales de la phase « i »

$\underline{\underline{C}}_i$  et  $\underline{\underline{S}}_i$  représentent respectivement le tenseur de rigidité et le tenseur de souplesse de la phase « i ».

### I.4.2 Localisation

On considère dans cette étape le *VER* déterminé dans l'étape de représentation. Il s'agit de relier les grandeurs mécaniques microscopiques locales et macroscopiques. C'est-à-dire, on recherche des relations entre déformations moyennes locales de chaque phase  $\langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle$  et déformations macroscopiques  $\underline{\underline{E}}$  imposées, ou contraintes moyennes locales de chaque phase  $\langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle$  et contraintes macroscopiques  $\underline{\underline{\Sigma}}$  imposées. Les grandeurs moyennes sont définies par :

$$\langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_i = \frac{1}{|V|} \int_V \underline{\underline{\sigma}}_i dV$$

et

(I.15)

$$\langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle_i = \frac{1}{|V|} \int_V \underline{\underline{\varepsilon}}_i dV$$

Les relations de localisation des déformations et de concentration des contraintes à partir des quantités moyennes sont :

$$\langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_i = \underline{\underline{B}}_i : \underline{\underline{\Sigma}}$$

et

(I.16)

$$\langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle_i = \underline{\underline{A}}_i : \underline{\underline{E}}$$

où  $\underline{\underline{A}}$  et  $\underline{\underline{B}}$  désignent respectivement les tenseurs de localisation des déformations et de concentration des contraintes.

### I.4.3 Homogénéisation

Cette étape consiste à déterminer le comportement équivalent du matériau hétérogène. Les propriétés effectives de ce matériau relient le champ de contrainte moyenne  $\langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle$  au champ de déformation moyenne  $\langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle$ , calculés dans un *VER*.

$$\langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle = \sum_{i=1}^n f_i \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_i$$

et

(I.17)

$$\langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle = \sum_{i=1}^n f_i \langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle_i$$

A partir des conditions aux limites imposées (équations (I.12) et (I.13)), il est possible de démontrer que les contraintes et les déformations locales doivent vérifier les relations :

$$\underline{\underline{\Sigma}} = \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle \text{ et } \underline{\underline{E}} = \langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle \quad (\text{I.18})$$

Grâce aux équations (I.16), (I.17), (I.18), on peut déduire les propriétés des tenseurs  $A$  et  $B$  :

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n f_i \underline{\underline{A}}_i &= \underline{\underline{I}} \\ \text{et} \\ \sum_{i=1}^n f_i \underline{\underline{B}}_i &= \underline{\underline{I}} \end{aligned} \quad (\text{I.19})$$

où :  $f_i$  désigne la fraction volumique du domaine occupé par la phase  $i$ .

$\underline{\underline{I}}$  est le tenseur d'identité d'ordre 4.

La relation constitutive pour le matériau hétérogène est donnée par :

$$\langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle = \underline{\underline{C}} : \langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle \quad (\text{I.20})$$

En utilisant les équations (I.19) et (I.20), on obtient le tenseur de rigidité équivalent  $\underline{\underline{C}}$  qui s'exprime en fonction des tenseurs de rigidité  $\underline{\underline{C}}_i$  de chaque phase «  $i$  » et des tenseurs de localisation  $A$  de la déformation dans chaque phase «  $i$  » :

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n f_i \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_i &= \underline{\underline{C}} : \langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle \Rightarrow \sum_{i=1}^n f_i \underline{\underline{C}}_i \langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle_i = \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{E}} \Rightarrow \sum_{i=1}^n f_i \underline{\underline{C}}_i \underline{\underline{A}}_i : \underline{\underline{E}} = \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{E}} \\ \underline{\underline{C}} &= \sum_{i=1}^n f_i \underline{\underline{C}}_i \underline{\underline{A}}_i \\ \underline{\underline{C}} &= \underline{\underline{C}}^{hom} \end{aligned} \quad (\text{I.21})$$

Le tenseur de rigidité équivalent d'un matériau hétérogène dépend donc du tenseur de localisation. Ce tenseur de localisation dépend de chaque modèle d'homogénéisation.

L'approche énergétique définit  $\underline{\underline{C}}$  comme le tenseur reliant la moyenne de l'énergie de déformation microscopique à l'énergie de déformation macroscopique :

$$\left\langle \frac{1}{2} \underline{\underline{\varepsilon}} : \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{\varepsilon}} \right\rangle = \frac{1}{2} \underline{\underline{E}} : \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{E}} \quad (\text{I.22})$$

où  $\underline{\underline{C}}$  désigne le tenseur des rigidités défini en tout point du VE.

Se pose alors la question de savoir si ces deux définitions fournissent la même valeur du comportement apparent. La réponse est négative si l'on n'ajoute pas de conditions supplémentaires sur les champs de déformation et de contrainte. L'équivalence entre les deux approches est assurée par la condition de macro-homogénéité (aussi nommée condition de Hill), qui impose l'égalité du travail macroscopique et de la moyenne du travail microscopique ([Bornert et al., 2001a](#)) :

$$\frac{1}{2} \langle \underline{\underline{\varepsilon}} : \underline{\underline{\sigma}} \rangle = \frac{1}{2} \underline{\underline{E}} : \underline{\underline{\Sigma}} \quad (\text{I.23})$$

## 1.5 Présentation de quelques modèles analytiques de changement d'échelles

Cette partie récapitule les principaux modèles analytiques utilisables en élasticité linéaire parmi les nombreux modèles d'homogénéisation existants.

Un aspect important dans l'étude de modèles micromécaniques est de savoir si les méthodes utilisées donnent des résultats cohérents. Les limites de ([Reuss, 1929](#) ; [Voigt 1928](#)) et ([Hashin-Shtrikman, 1961, 1962](#)) sont utilisés pour vérifier les bornes des modèles analysés, en d'autres termes, les résultats obtenus par les modèles décrits précédemment devraient se situer dans la région formée par ces limites.

Dans cette section, les différents modèles et limites pour les prédictions élastiques des composites à deux phases sont examinées. Les méthodes comprennent les approximations de Voigt et Reuss (règle de mélangeurs), des bornes de type Hashin-Shtrikman, et les estimations auto-cohérentes classiques.

Par la suite, on site les différents limites (bornes) de rapproches pour le domaine de multi échelle (dit micromécanique).



### I.5.1 Bornes de Voigt et Reuss

Le modèle de [Voigt \(1928\)](#) est utilisé comme un seuil pour évaluer les propriétés élastiques effectives d'un matériau hétérogène. En général, cette limite surestime la rigidité du composite (Figure I.14). Pour constituants isotropes, le modèle Voigt prédit toujours l'isotropie du matériau composite. L'équation (I.24) représente la relation utilisée pour ce modèle.

$$C = f_i C_i + (1 - f_i) C_m \quad (I.24)$$

Or, Les expressions pour les coefficients de compression  $k$  et de cisaillement  $\mu$  sont donc :

$$k^{Voigt} = p.k_i + (1 - p).k_m \quad (I.25)$$

$$\mu^{Voigt} = p.\mu_i + (1 - p).\mu_m \quad (I.26)$$



Figure I-14 Direction utilisée par la limite Voigt pour calculer la rigidité du composite

Le tenseur des modules effectifs est approché par l'équation :

$$C^{hom} = \langle c(\underline{x}) \rangle \quad (I.27)$$

Ainsi que le modèle de Voigt, le modèle de [Reuss \(1929\)](#) est utilisé pour trouver la limite des propriétés effectives d'un matériau hétérogène. En général, cette limite sous-estime la rigidité du composite (équation I.27). Pour les constituants isotropes, le modèle de Reuss prédit toujours l'isotropie du matériau composite :

$$C = [f_i C_i^{-1} + (1 - f_i) C_m^{-1}]^{-1} \quad (I.28)$$

Dans ce cas, les coefficients de compression  $k$  et de cisaillement  $\mu$  sont donnés par les expressions suivantes :

$$k^{Reuss} = \frac{k_i k_m}{(1 - p)k_i + p k_m} \quad (I.29)$$

$$\mu^{Reuss} = \frac{\mu_i \mu_m}{(1 - p)\mu_i + p \mu_m} \quad (I.30)$$

Le tenseur de souplesse est donné par :

$$S^{hom} = \langle s(\underline{x}) \rangle \quad (I.31)$$

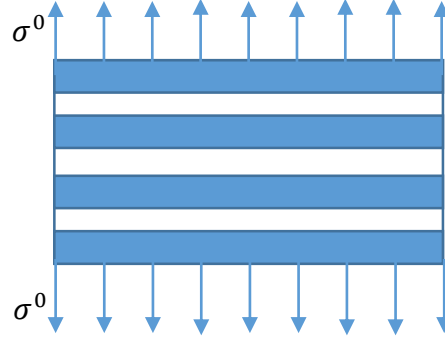


Figure I-15 Direction utilisée par la limite Reuss pour calculer la rigidité du composite.

## I.5.2 Bornes de Hashin - Shtrikman

Les limites ([Hashin & Shtrikman, 1961 ; 1962](#)) sont les plus souvent utilisées dans la littérature, car ils ont un intervalle plus limité. Pour les composite isotrope macroscopiquement avec deux phases isotropes 1 et 2, les limites de module d'élasticité volumique et de module de cisaillement sont données par :

$$k^{HS\pm} = k_m + \frac{f_i}{(k_i - k_m)^{-1} + f_m \left( k_m + \frac{4}{3} \mu_m \right)^{-1}} \quad (\text{I.32})$$

$$\mu^{HS\pm} = \mu_m + \frac{f_i}{(\mu_2 - \mu_1)^{-1} + \frac{2f_m(k_m + 2\mu_m)}{5\mu_m \left( k_m + \frac{4}{3} \mu_m \right)}} \quad (\text{I.33})$$

avec:  $K_m > K_i$  ;  $\mu_i > \mu_m$  ;  $V_i + V_m = 1$ .

Les équations (I.23) et (I.24) représentent la plage des valeurs extrêmes pour le module d'élasticité volumique.

où  $(k_1, k_2)$  et  $(\mu_1, \mu_2)$  sont respectivement les modules de compressibilités et de cisaillement pour les deux phases ;  $f_1$  et  $f_2$  sont les fractions volumiques pour les deux phases ; les signes  $^+$  et  $^-$  désignent respectivement les bornes supérieures et inférieures

Le schéma de Hashin-Shtrikman est le même que pour la méthode autocohérente mais le matériau homogène équivalent entourant les différents constituants est remplacé par un matériau de comparaison. Si le matériau de comparaison est plus 'raide', on trouve la borne supérieure de la rigidité du composite, par contre, si le matériau comparaison est plus 'souple', on aboutit à la borne inférieure de la rigidité du composite. Ces bornes conduisent à des prédictions plus resserrées que celles fournies par les bornes de Voigt et Reuss.

### I.5.3 Modèle Self-consistent (Autocohérent)

Pour un matériau isotrope en 2D qui contient des particules avec des module de compressibilité  $k$  et modules de cisaillement  $\mu$ , l'estimation obtenue par le modèle self-consistent peut-être écrit par :

$$k = k_m + \frac{f_i \mu (k_i - k_m)}{k + \left(\frac{3k}{3k+4\mu}\right)(k_i - k)} \quad (\text{I.34})$$

Il faut noter que le module de compressibilité estimait par ce modèle le self consistent dépend de l'estimation du module de cisaillement  $\mu^{SC}$  :

$$\mu = k_m + \frac{f_i \mu (k_i - k_m)}{k + \left(\frac{6k+12\mu}{15k+10\mu}\right)(k_i - k)} \quad (\text{I.35})$$

$P_i$  est la fraction volumique de la phase  $i$ .

## I.6 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons rappelé les étapes de l'homogénéisation ainsi que la notion de volume élémentaire représentatif (VER). Nous avons cité quelques modèles micromécaniques usuels comme : les bornes de Voigt, Reuss et Hashin-Shtrikman ainsi que l'approche Auto-Cohérente. Ces modèles d'homogénéisation seront ensuite comparés aux résultats de simulation pour prédire les comportements équivalents des matériaux hétérogènes étudiés dans la suite de ce travail.

## ***Chapitre II.***

# **Génération et maillage des microstructures**

## **II. Génération et maillage des microstructures**

*Dans ce chapitre on traite la génération et le maillage des microstructures à simuler. Il est divisé en deux parties. La première est le développement d'un code de génération des particules en 2D et 3D dont le but est de déterminer les propriétés mécaniques moyennes du matériau hétérogène, ainsi que le volume élémentaire représentatif (VER). La description du maillage utilisé pour la microstructure, et le choix proposé pour les calculs du comportement du matériau utilisé seront donnés dans la deuxième partie.*

## **II.1 Introduction**

Dans le domaine d'étude des microstructures réelles, le problème qui nous confronte toujours est comment dimensionner à une certaine échelle la microstructure d'une structure complexe (grains, cristaux, ...). Le développement des algorithmes de génération de ces microstructures permettant de faciliter l'étude de comportement de ces derniers, la réalisation de ces microstructures est basée sur la connaissance de leur morphologie et des constituants qu'elles possèdent, ces constituants sont en général de différentes formes (simples et complexes). Pour l'obtention de ces formes, il existe plusieurs techniques pour les créer, ces techniques s'appellent "méthodes de génération ou reconstitution de forme".

De nombreux chercheurs ont utilisé l'une de ces méthodes, et ont trouvé des moyens pour l'obtention d'une grande proportion de saturation (percolation), la proportion des particules à l'intérieur d'une cellule. Il y a ceux qui génèrent ces particules de manière à atteindre la fraction 30%, et il y a des auteurs qui ont dépassé la fraction 75% pour les microstructures à distribution périodique ou hexagonale.

Ce chapitre présente les méthodes de génération des particules en 2D et 3D. Parmi ces méthodes on a choisi la méthode la plus utilisée dans le domaine de génération de microstructure et qui est l'un de nos buts de ce travail.

## **II.2 Modélisation de la microstructure : génération et maillage de microstructures**

Le calcul de comportement de la microstructure consiste à décrire le mieux possible la méthodologie de génération et de maillage de microstructures. Cette partie est consacrée aux types de modèles de génération et reconstitution des microstructures, ensuite au choix du type de modèle de génération utilisé dans cette thèse, en terminant par les types de maillage utilisés pour le cas de microstructures et le choix utilisé pour l'application dans l'étude de comportement élastique.

## II.2.1 Modèles de génération et reconstitution des microstructures

L'augmentation de la puissance de calcul des ordinateurs permet de réaliser des modélisations numériques de plus en plus fines et complexes des structures. Ces progrès profitent également à la modélisation du comportement des matériaux. Ainsi, depuis une vingtaine d'années, se développe l'activité de calcul de microstructure, qui consiste à modéliser explicitement la microstructure des matériaux par des outils numériques ([Forest, 2006](#)). Elle permet de représenter différents phénomènes physiques au sein du matériau et d'établir des liens entre la microstructure et les propriétés des matériaux. La modélisation de la microstructure peut être plus ou moins idéalisée (utilisation de schémas booléens, agrégats de polyèdres de Voronoï pour modéliser les polycristaux) ou bien basée sur une image 3D réelle de la microstructure, acquise par microtomographie, par exemple.

Le développement des algorithmes de génération de ces microstructures permettant de faciliter l'étude de comportement de ces derniers. La réalisation de ces microstructures est basée sur la connaissance de leur morphologie et ces constituants qu'elles possèdent, ces constituants sont en général de différentes formes (simples et complexes). Pour l'obtention de ces formes, il existe plusieurs techniques pour les créer, ces techniques s'appellent "méthodes de génération ou reconstitution de forme", parmi ces méthodes on trouve :

- La reconstitution à partir d'un tomographe,
- La méthode de génération dite d'addition séquentielle aléatoire (RSA),
- La dynamique moléculaire.

On distingue en général deux types de méthodes pour générer des microstructures en 2D ou 3D :

- Génération des microstructures réelles à l'aide d'une microtomographie
- Génération des microstructures à l'aide des outils numériques soit des logiciels (Digimat, Abaqus, Ansys) ou soit à l'aide des scripts créent avec des langages (*Matlab*, *C+*, *Python*, *Java* ...).

L'objectif de ce travail est de générer des modèles numériques de la microstructure d'un matériau composite, constitué des particules de même diamètre, dispersées aléatoirement dans une matrice, et dont la fraction volumique est relativement élevée (supérieure à 30 %). On

distingue, dans la littérature, deux types de méthodes pour construire des arrangements aléatoires compacts de sphères ([Lubachevsky et al., 1991](#)) :

- \_ les méthodes dites *séquentielles* où le système initial est constitué d'un arrangement de quelques particules et la compacité est augmentée en ajoutant des particules une à une (séquentiellement) par un procédé déterministe ou stochastique ;
- \_ les méthodes dites *concurrentes* où le système contient initialement toutes les particules et la compacité est augmentée en réarrangeant ces particules par un procédé approprié.

Pour les méthodes séquentielles, nous présentons le modèle d'addition séquentielle aléatoire très largement utilisé et simple à mettre en œuvre. Pour les méthodes concurrentes, nous présentons le modèle de ([Lubachevsky et Stillinger, 1990](#)).

Nous présentons, dans cette partie, le principe de reconstitution à partir d'un tomographe ainsi que les différents modèles de génération des microstructures utilisées par les auteurs scientifiques

## **II.2.2 La reconstitution à partir d'un tomographe**

Les techniques expérimentales actuelles pour l'obtention des modèles de type image sont basés sur l'appareil microtomographie, qui permet la représentation réelle de microstructures en deux ou trois dimension. Cette technique reste très couteuse en temps et moyens, et n'est pas à ce jour exploitable pour tous les matériaux. Les techniques de microtomographie aux rayons X mettent en évidence la structure tridimensionnelle de matériaux à un contraste entre phases suffisant. Un exemple en est donné à la figure II.1 ([Madi, 2006](#) ; [Forest et al., 2006](#)).

Cette technique est basée sur la reconstruction couche par couche d'un échantillon par polissage et cartographie EBSD ([Rey et al., 2006](#)). Toutefois ce procédé présente l'inconvénient d'influer sur la structure de l'échantillon. Sur ce point des progrès sont donc espérés avec l'arrivée des techniques d'érosion ionique des échantillons in situ, bien qu'elles se limitent à de petites zones avec de petit dimensions ([Lee et al., 2007](#)).

Cette démarche a néanmoins été mise en œuvre dans ([Musienko et al., 2007](#)). Un échantillon de cuivre a subi après essai une succession de cartographies EBSD et polissages électrolytiques afin de pouvoir reconstruire la microstructure sur une épaisseur de 100  $\mu\text{m}$ .



D'une part cette technique n'a permis de décrire qu'une couche de grains, d'autre part l'échantillon étant analysé post-mortem, la microstructure décrite est celle après déformation. Malgré ces deux approximations, Musienko ([Musienko et al., 2007](#)) ont obtenus un bon accord entre champs expérimentaux et simulés en utilisant un maillage 3D libre, respectant les joints de grains, et suffisamment fin (voir figure II.2). En réalisant le même calcul pour différentes finesses de maillage, il montre que ce paramètre influe sensiblement sur l'impact du choix des conditions aux limites appliquées.



Figure II-1 Microstructure d'un réfractaire électro-fondu zircone-verre caractérisée par microtomographie ([Madi, 2006](#)). Volume représenté :  $350 \times 350 \times 700 \mu\text{m}$ , (a) Segmentation du volume pour séparer les phases en présence. (b) Détection de l'isosurface, et triangulation. (c) Maillage obtenu (éléments tétraédriques linéaires, 1 500 000 degrés de liberté). La zircone est ici en rouge, et la phase vitreuse en jaune.

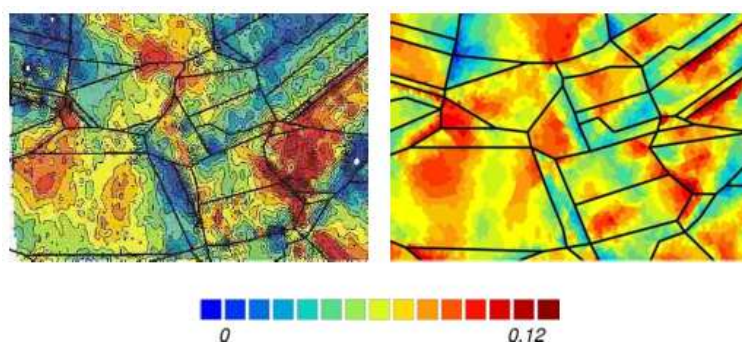


Figure II-2 Champ de déformation axiale sur une surface libre après 5% de déformation macroscopique sur du cuivre OFHC. A gauche : champ expérimental. A droite : champ obtenu par calculs éléments finis, avec une microstructure représentative, un maillage libre fin respectant les joints de grains (130 818 nœuds), et des conditions aux limites de déformation homogènes aux contours ([Musienko et al., 2007](#)).

La tomographie aux rayons X est une alternative intéressante à la microscopie ([Matuana et al., 1998](#)) pour l'analyse de la microstructure dans divers matériaux. C'est une technique qui fournit des images tridimensionnelles avec une résolution spatiale qui peut être inférieure au micromètre et qui consiste à partir de radiographie X sur 360° de reconstituer une image volumique qui en chaque position de l'espace retourne une valeur liée au coefficient d'absorption du matériau. La tomographie (Figure II.3) est basée sur des mesures de transmissions d'un faisceau de rayons X monochromatique à travers un échantillon sous toute une série d'incidences entre 0 et  $\pi$ . On acquiert ainsi un grand nombre de radiographies 2D sur un détecteur bidimensionnel à base de matrice CCD. Les projections ainsi obtenues permettent de retrouver l'image 3D de l'échantillon (Figure II.3) par une reconstruction par rétroprojection filtrée. Le schéma de la procédure de traitement d'une microstructure réelle pour la simulation est représenté sur la figure II.4.

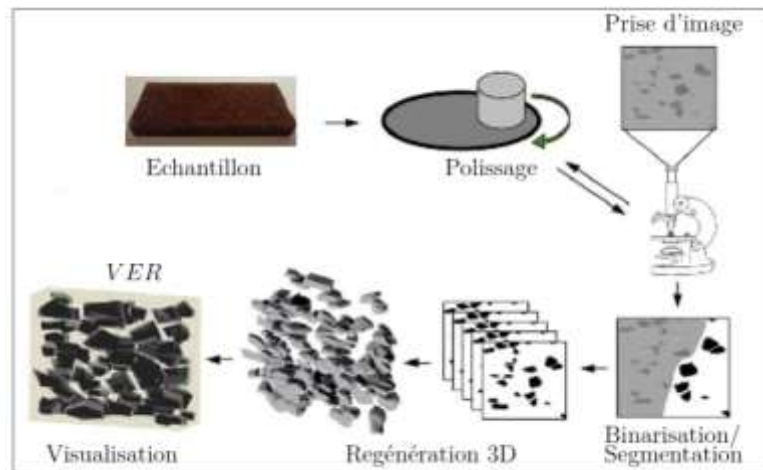


Figure II-3 Etape de préparation et génération d'une microstructure réelle

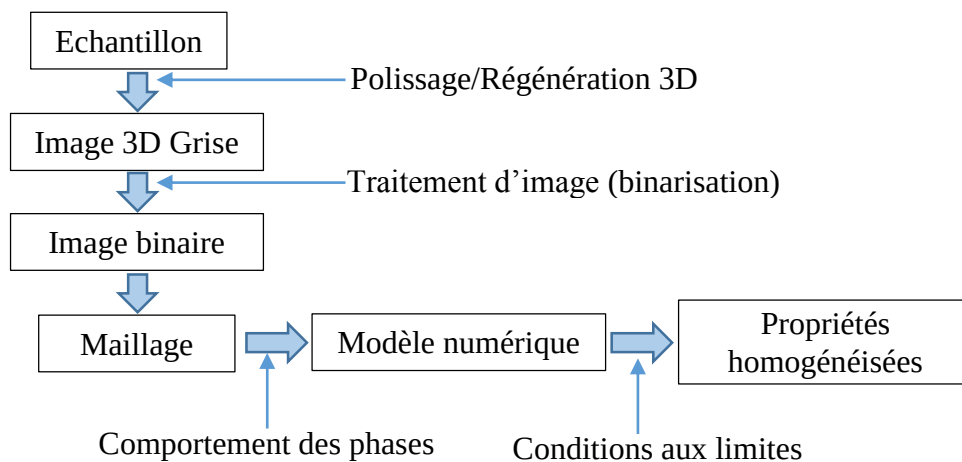


Figure II-4 Schéma de la procédure de traitement d'une microstructure réelle pour la simulation

### II.2.3 Modèle d'addition séquentielle aléatoire (RSA)

Le modèle d'addition séquentielle aléatoire ou *Random Sequential Addition (RSA)* est une méthode de type Monte-Carlo, qui consiste à placer les particules de diamètre  $D$  les unes après les autres dans un volume fixe (cube de côté  $L$  par exemple), jusqu'à obtenir la concentration de particules souhaitée, en tirant les coordonnées de leurs centres de manière aléatoire. À chaque tirage d'une nouvelle particule, on vérifie la condition de non interpénétration avec les particules précédemment placées. En cas d'interpénétration, le tirage est exclu et une nouvelle particule est tirée. Chaque particule placée correctement est définitivement acceptée et sa position est fixée. Cette méthode est simple à mettre en œuvre et semble la plus naturelle pour générer une distribution aléatoire de sphères dures. On trouvera quelques détails sur l'utilisation du modèle RSA dans les références suivantes : ([Widom, 1966](#) ; [Feder, 1980](#) ; [Hinrichsen et al., 1986](#) ; [Rintoul et Torquato, 1997](#)). Cette méthode a été utilisée dans de nombreux domaines scientifiques tels que la chimie, la biologie, la physique et les mathématiques. Elle a permis de décrire, par exemple, l'oxydation de polymères ([Gonzalez et al., 1974](#)), la germination de particules sur une membrane cellulaire biologique ([Finegold et Donnell, 1979](#)), l'adsorption de protéines sur une surface solide plane ([Feder et Giaever, 1980](#)) ou le partage des territoires chez certains animaux ([Tanemura et Hasegawa, 1980](#)).

La fraction volumique maximale de particules que l'on peut atteindre selon cette méthode, en supposant la taille du domaine  $L$  très grande par rapport à  $D$ , reste un problème ouvert en 2D et en 3D ([Torquato, 2002](#) ; [Evans, 1993](#)). La recherche de sa valeur limite a été étudiée en 1D (génération aléatoire de segments de taille  $D$  dans un segment de taille  $L$ ), 2D (génération de disques de diamètre  $D$  dans un carré de côté  $L$ ) et 3D (génération de sphères de diamètre  $D$  dans un cube de côté  $L$ ) :

- \_ La valeur exacte du problème 1D a été calculée par ([Rényi, 1958](#)). La fraction linéique limite est, en s'arrêtant à la quatrième décimale, de 74.76 % (pour  $L$  infiniment grand).
- \_ La fraction surfacique limite du problème en 2D a été estimée numériquement à 54.7 % ([Tanemura, 1979, 1981, 1988a,b](#) ; [Feder, 1980](#); [Hinrichsen et al., 1986](#)).
- \_ Les fractions volumiques limites estimées en 3D ne dépassent pas 40 %. Quelques exemples de calculs donnent des limites de concentration de 38.5 % ([Cooper, 1988](#)), 38.2 % ([Sherwood, 1997](#)), 38.1 % ([Tanemura, 1981, 1988a,b](#)).

Notons que les estimations pour les problèmes 2D et 3D sont obtenues pour un rapport entre la taille du cube et le rayon de particules ( $L=D$ ) relativement élevé, par exemple,  $L=D \geq 20$  dans ([Cooper, 1988](#)).

Cette méthode ne permet donc pas d'atteindre des fractions volumiques de particules supérieures à 40 %. Cependant, elle assure une distribution statistiquement isotrope des particules ([Rintoul et Torquato, 1997](#)) et peut être modifiée de manière à atteindre des fractions volumiques de particules plus élevées ([Segurado et Llorca, 2002](#)).

[Segurado et Llorca \(2002\)](#) ont ajouté deux mécanismes au modèle RSA pour obtenir des fractions volumiques de particules supérieures à 40 %. À partir d'un nuage de points obtenu par le modèle RSA, avec une fraction volumique de 30 % par exemple (figure II-5), ils effectuent un compactage de ces points (homothétie), puis un réarrangement aléatoire des particules ne respectant plus la condition de non interpénétration. En répétant ces étapes de compactage et de réarrangements aléatoires, les auteurs atteignent des fractions volumiques supérieures à 50 %, et jusqu'à 60 % si l'on autorise les particules à entrer en contact.

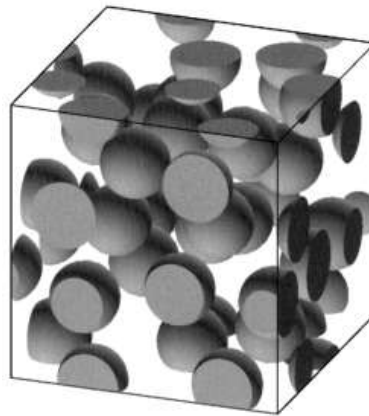


Figure II-5 Microstructure générée à l'aide d'algorithme aléatoire séquentielle Adsorption (RSA). Nombre de sphères = 30, fraction volumique = 30%. ([Segurado and Llorca, 2002](#)).

#### II.2.4 Modèle de génération par la technique dynamique moléculaire

La deuxième méthode de génération des particules avec la distribution aléatoire dans une cellule élémentaire VE est basée sur la dynamique moléculaire ou s'appelle aussi Modèle de Lubachevsky et Stillinger. ([Lubachevsky et Stillinger, 1990](#)) ont développé un nouvel algorithme basé sur la dynamique moléculaire permettant dans un premier temps de disperser

des disques dans une cellule élémentaire 2D. En 1991, les auteurs ([Lubachevsky et al., 1991](#)) ont étendu l'algorithme au cas de sphères dispersées aléatoirement dans un cube élémentaire 3D.

Cet algorithme part du principe qu'au temps zéro toutes les inclusions sont créées et ont un volume nul. Une position et un vecteur vitesse leur sont attribués aléatoirement. Les particules sont ensuite mises en mouvement et leur volume augmente à chaque itération jusqu'à atteindre la fraction volumique souhaitée. A chaque itération deux types d'événements sont vérifiés :

- les collisions binaires ;
- les collisions entre les particules et les faces de la cellule élémentaire.

Dans le cas de collisions binaires, c'est-à-dire de collisions entre particules, leur vecteur vitesse est mis à jour selon le principe de l'énergie cinétique. Par contre, dans le cas où une particule quitte la cellule à travers une face, elle doit rentrer par la face opposée afin d'assurer les conditions aux limites de périodicité.

Les travaux de ([Lubachevsky et Stillinger, 1990](#)) ont été étendus au cas de particules non sphériques par ([Donev et al. 2006](#)) (Figure II.6), par la définition du concept de "proche voisin" permettant de limiter la vérification des collisions entre particules. En effet, ([Donev et al. 2006](#)) ont défini une limite de voisinage pour chaque particule. La collision entre deux particules est vérifiée si leurs limites de voisinage se superposent. Les auteurs ont constaté, cependant, que cet algorithme est plus efficace pour des systèmes de particules ayant un facteur de forme faible et avec des variations de taille des particules faibles.

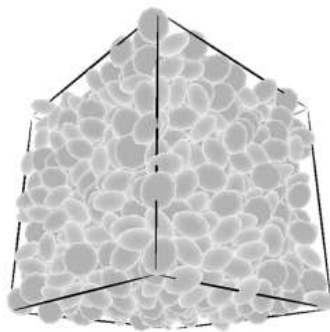


Figure II-6 Packing d'ellipsoïdes aplatis généré en utilisant l'algorithme de dynamique moléculaire proposé par ([Donev et al. 2005a,b](#)). Nombre de l'ellipsoïdales = 1000, fraction volumique = 70% ([Donev, 2006](#)).

Le développement de cet algorithme est plus complexe que la méthode *RSA*. L'objectif final de ce projet étant de développer un matériau hybride constitué d'une matrice chargée de particules dopantes et renforcée par des fibres longues de carbone, la fraction volumique de particules n'excédera pas 20%. La méthode *RSA* devrait donc être suffisante pour développer notre modèle numérique.

Ce processus est bien adapté aux microstructures aléatoires et isotropes, il est la base de la plus part des modèles probabilistes. L'intérêt des modèles aléatoires est de permettre facilement la création de nouveaux matériaux virtuels.

Il existe aussi d'autres méthodes permettant de générer des distributions aléatoires de sphères dures avec une compacité très, parmi ces méthodes on cite :

- La méthode de perturbations aléatoires de la position des particules qui peut être appliquée à un arrangement initialement ordonné et compact (par exemple : cubique à faces centrées). Cette méthode a été largement employée pour dépasser la limite rencontrée en 3D par le modèle *RSA*, on citera, par exemple, ([Rintoul et Torquato, 1997](#) ; [Gusev, 1997](#) ; [Gusev et al., 2000](#) ; [Böhm et Han, 2001](#) ; [Qi, 2006](#)). En pratique, il reste difficile de réaliser des arrangements aléatoires de cette manière pour des fractions volumiques importantes car l'espace entre les particules permettant leur mouvement est réduit ([Qi, 2006](#)). De plus, cette méthode ne permet pas de perturber significativement la structure périodique de manière à créer une structure totalement aléatoire. Par exemple, ([Rintoul et Torquato, 1997](#)) ont observé l'influence de la structure périodique initiale sur des arrangements aléatoires créés par perturbations et indiquent la présence de directions préférentielles résiduelles dans la microstructure finale.
- [Visscher et Bolsterli \(1972\)](#) ont développé une méthode séquentielle consistant à lâcher et laisser rouler les particules dans un cube sous l'action d'une force gravitationnelle et atteignent une fraction volumique maximale d'environ 60 %. Cette méthode introduit une direction préférentielle et impose aux particules d'être en contact les unes avec les autres.
- [Hinrichsen et al. \(1990\)](#) proposent une méthode dite concurrente basée sur un ensemble de particules générées par le modèle *RSA*, puis déplacées dans les directions de la voisine la

plus éloignée. Le diamètre des particules est alors augmenté jusqu'à ce que deux particules entre en contact. Le processus est alors répété.

- [Jordey et Tory \(1985\)](#) proposent une méthode dite concurrente basée, comme le modèle de ([Lubachevsky et Stillinger, 1990](#)), sur un grossissement progressif des particules, associé à un réarrangement des particules les plus proches dans la direction opposée de leurs centres (réarrangements non aléatoires). La fraction volumique maximale atteinte varie entre 64.2 % et 64.9 %.

### II.3 Génération de microstructures aléatoires en 2 et 3 dimensions

Dans cette partie, on introduit le concept lié à la génération des microstructures à deux phases dans le but d'effectuer l'analyse micromécanique. La génération des microstructures se fait à l'aide des scripts programmés à l'aide d'un langage de programmation au sein d'un outil de graphisme 3D. L'idée de ces scripts est basée sur l'algorithme du schéma d'addition séquentielle aléatoire (*RSA*). Dans ce cas deux algorithmes sont utilisés, l'un pour la génération 2D des microstructures (figures II.7), l'autre pour la génération 3D (figures II.8). Ces algorithmes sont utilisés par la suite dans les chapitres suivants.

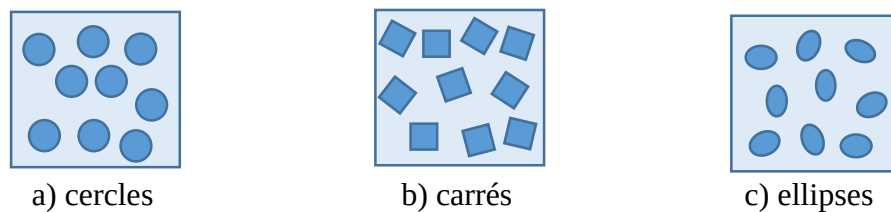


Figure II-7 Génération des particules en 2D dans une cellule carrée

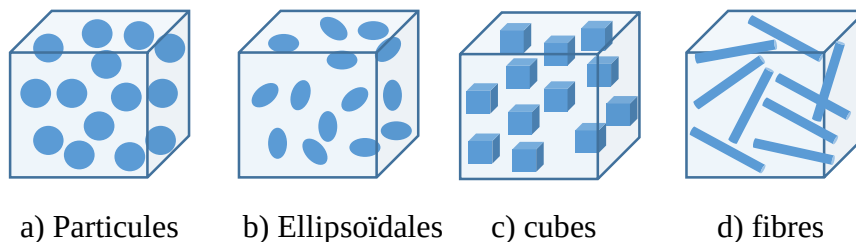


Figure II-8 Génération des particules en 3D dans une cellule cubique

Afin de pouvoir générer un modèle de répartition aléatoire de particules (en 2D ou 3D) dans un cellule élémentaire VE (carrée ou cubique) nous avons développé par la suite les deux algorithmes (Figure II.11 et II.14) permettant un tirage pseudo-aléatoire du centre des particules



en prenant en compte l'utilisation des contraintes de répartition et non collision de ces particules entre elles et entre les parois de cette cellule.

### II.3.1 Génération des particules en 2D dans une cellule carrée - Modèle 2D

La génération de cet algorithme permet de créer des cellules en 2D pour des modèles représentatifs. Le concept de génération de particules dans les cellules qui ont distribuées aléatoirement dans cette cellule, consiste à introduire les contraintes géométriques suivantes :

- Les particules sont de même taille (diamètre) ;
- Les particules ne doivent pas chevaucher entre elles ;
- Les particules ne doivent pas touches les parois de la cellule.

L'algorithme est basé aussi sur le paramètre de la cellule qui est sa taille  $l$ . Le volume de la cellule (surface dans le cas d'une cellule 2D) et le volume des particules sont relié entre eux en fonction de la fraction volumique des particules avec la relation :

$$\text{Cas 2D : } f_{\text{particule (2D)}} = N_{\text{particule}} \times S_{\text{particule}} / S_{\text{cellule}}$$

avec :  $f_{\text{particule}}$  : la fraction volumique (surfacing) des particules

$S_{\text{particule}}$  et  $S_{\text{cellule}}$ : l'aires de particule et de la cellule en 2D (ex : particule circulaire)

Le nombre des particules  $N_p$ , la taille de la particule  $d_p$  et la fraction volumique des particules  $f_p$  dans la cellule, et aussi on a :  $\text{Volume total} = V_{\text{cellule}} + V_{\text{particule}} = 1$ .

Les données initiales de l'algorithme sont : le choix de type de particules, leur nombre, leur fraction volumique dans la cellule élémentaire et le type d'arrangement de ces particules (figure II.9)

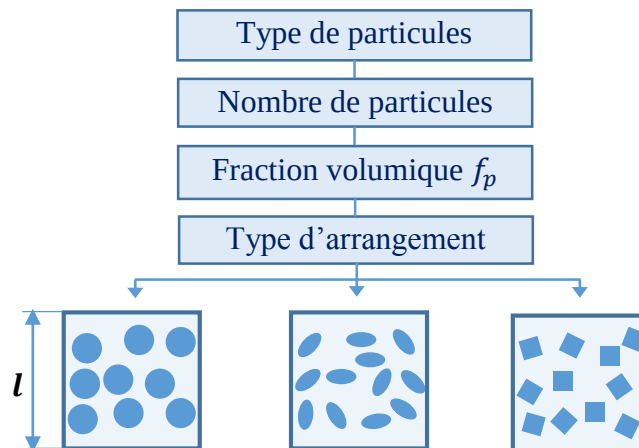


Figure II-9 Propriétés géométriques initial de la cellule carrée



L'algorithme permettant une dispersion aléatoire d'une certaine fraction volumique  $f_p$  de particules en 2D (cercles, carrés ou elliptiques) dans une cellule élémentaire  $VE$ . Dans cet algorithme, on tire aléatoirement et successivement la position de chaque nouvelle particule avec une densité de probabilité uniforme dans tout la cellule, mais en excluant toute possibilité d'intersection, ou de distance minimale aux particules déjà tirées. Si la nouvelle particule en intersecté une autre, celle-ci est rejetée mais on conserve les autres particules. L'algorithme est stoppé lorsqu'on atteint la fraction volumique désirée. La limitation de ce schéma de tirage est la fraction volumique maximale d'inclusions obtenue.

Le tirage aléatoire des coordonnées du centre de cercle s'appuie sur la fonction  $Random(x, y)$  du code script utilisé, pour les deux formes (carrée et ellipse), les paramètres à injecter dans le script sont, l'angle d'orientation de ces particules et les autres contraintes cité précédents (ex, la distance entre les centres de deux particules). Les particules sous forme ellipse ont de dimension  $\mathbf{r}_1 \times \mathbf{r}_2$  (demi grand axe  $\mathbf{r}_1$  et de demi petit axe  $\mathbf{r}_2$ ). Les centres des particules sont donc répartis dans une cellule carrée ( $VE$ ) de côté  $l$  et l'angle d'orientation des particules est compris entre 0 et  $2\pi$  (sauf pour le cas de cercles qui n'ont pas d'angle d'orientation) (figure II.10). Nous définissons ainsi une matrice regroupant les coordonnées des centres des particules et une matrice regroupant les angles d'orientation des particules.

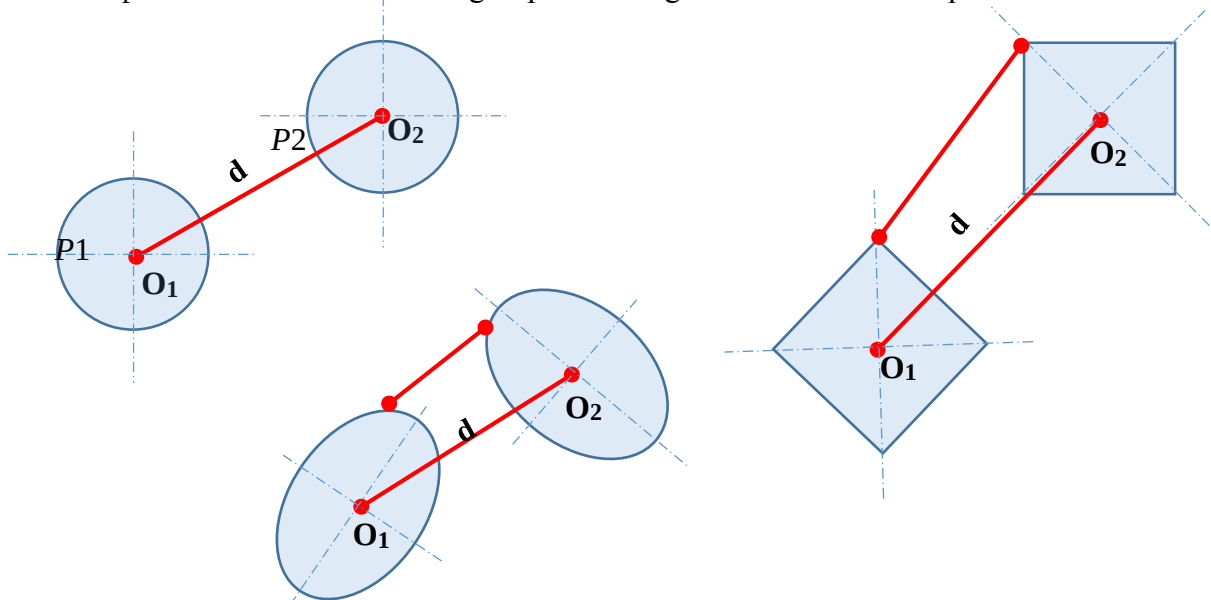


Figure II-10 Définition de la géométrie paramétrage des particules a) cercles, b) carrés c) elliptiques

Par suite, l'algorithme utiliser pour la génération des particules en 2D est représenté dans le schéma suivant (II.11) :

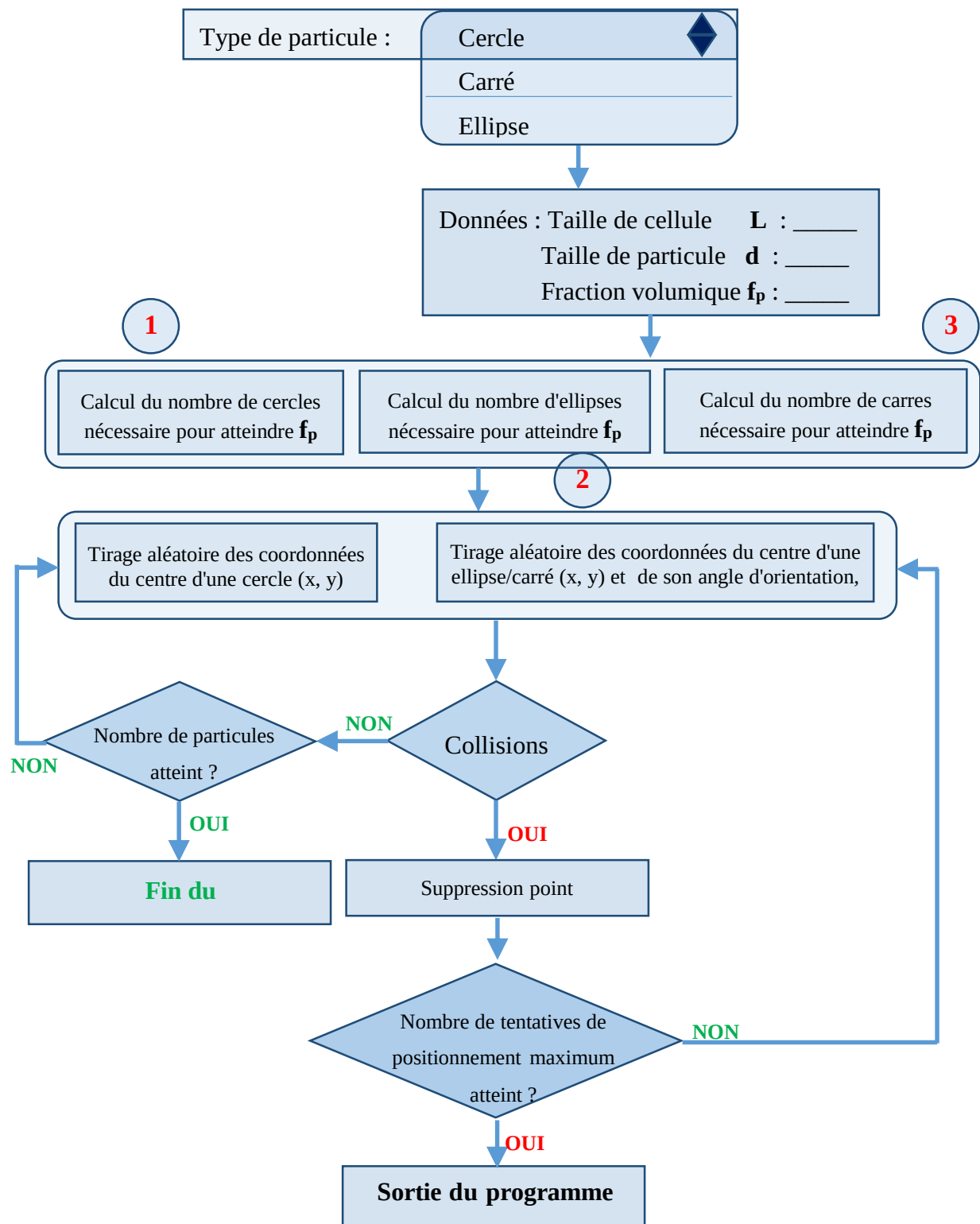


Figure II-11 Algorithme de génération aléatoire de particules en 2D dans un VE.

### II.3.2 Génération des particules en 3D dans un volume cubique - Modèle 3D

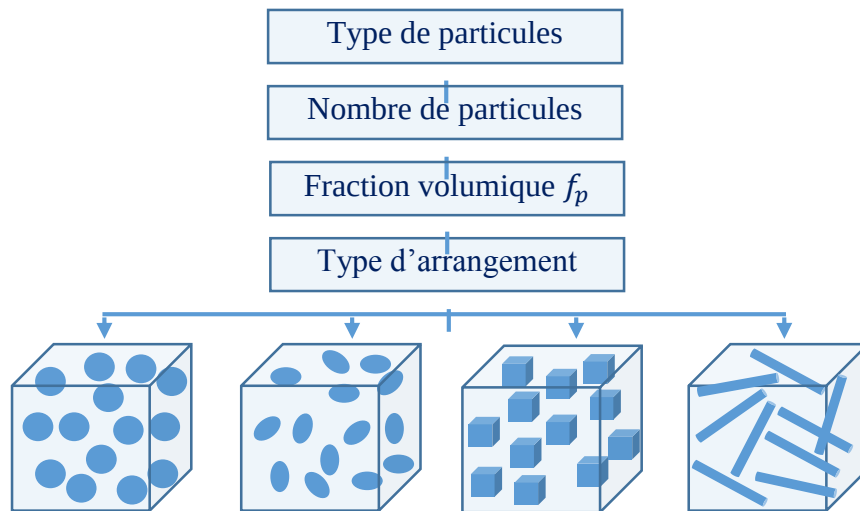


Figure II-12 Propriétés géométriques de la cellule cubique

De la même procédure de génération des particules en 2D, on applique l'algorithme en 2D pour le cas 3D (figure II.12), mais avec des changements comme la troisième coordonnée. Le problème se complexifie un peu plus avec l'ajout de la troisième direction. En effet, nous nous retrouvons avec les paramètres définis aléatoirement pour les trois volumes :

- pour la sphère : défini par son centre et leur dimension (taille) :  $r$
- pour le cube : défini par son centre et leur dimension (taille) :  $r$
- pour l'ellipsoïdale : défini par son centre et leur dimension (taille)  $r_1, r_2$  et  $r_3$

De la même manière que pour le modèle 2D, en nous appuyant sur la figure II.12, nous définissons les modèles à générés.

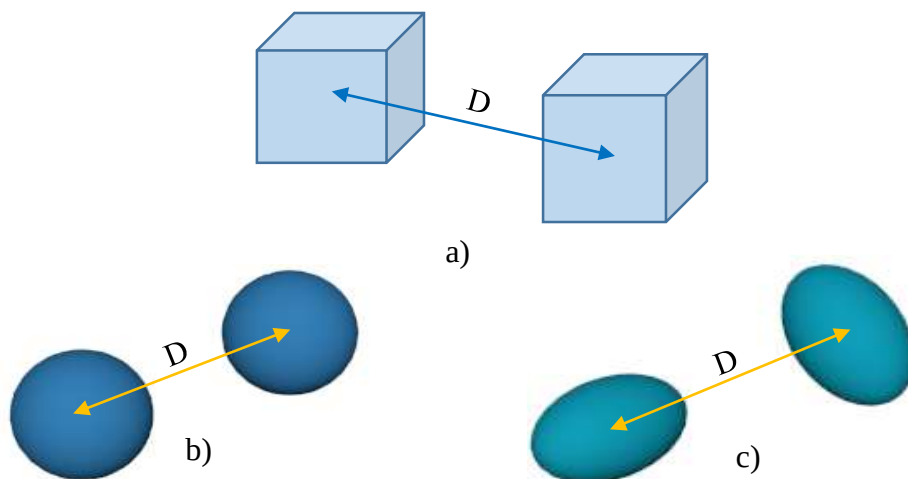


Figure II-13 Définition de la géométrie et du paramétrage des particules, a) cube, b) sphère, c) ellipsoïdale.

La figure II.13 donne un schéma sur les trois particules et la distance entre deux géométries (cercle-cercle, carré-carré et ellipse-ellipse) de chacun de ces trois types. Les coordonnées des centres des particules,  $O_1(x_1, y_1, z_1)$  et  $O_2(x_2, y_2, z_2)$  sont tirées aléatoirement ainsi que leurs orientations,  $\alpha_1$  et  $\alpha_2$  (dans le cas 3D : cube ou ellipsoïdale). Afin de vérifier la condition de non collision des particules, nous recherchons deux points  $p_1$  et  $p_2$  de deux particules.

Pour le cas 3D, la particule 1 de coordonnées  $(x_1, y_1, z_1)$  et la particule 2 de coordonnées  $(x_2, y_2, z_2)$  doivent justifier la condition :

La distance entre les deux centres des particules soit :

$$D = \sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 + (z_2 - z_1)^2}$$

Ainsi la condition de la collision d'une particule avec la paroi de la cellule cubique doit être justifiée, c.à.d. si le paramètre  $D$ , est inférieur au diamètre des sphères il y a collision. Si le paramètre  $D$ , est supérieur au diamètre des sphères il n'y a pas collision.

Pour la génération des modèles de répartition aléatoire de particules (sphères, cubes et ellipsoïdales) dans une cellule cubique nous avons développé un algorithme (figure II.14) permettant un tirage pseudo-aléatoire du centre des sphères en prenant en compte un paramètre de non collision entre les particules afin d'éviter toute interférence des particules entre elles, et la condition de non collision de ces particules avec la cellule. La dispersion de nos particules dans le *VER* étant considérée aléatoire, la création géométrique du *VER* est faite avec le code Python.

La dispersion des particules dans la cellule élémentaire *VE* étant considérée aléatoire, la création géométrique du *VE* qui contient ces particules est basée sur la programmation d'un script comme dans le cas d'une cellule à deux dimensions, mais avec quelques changements dans l'algorithme. Les données initiales de la génération sont ; la taille de la cellule  $L$ , la taille de la particule et leur orientation pour les formes ellipsoïdales et cubiques, et la fraction volumique des particules. L'algorithme présenté dans la figure II-14 a donc été développé grâce à une programmation en base de Python.

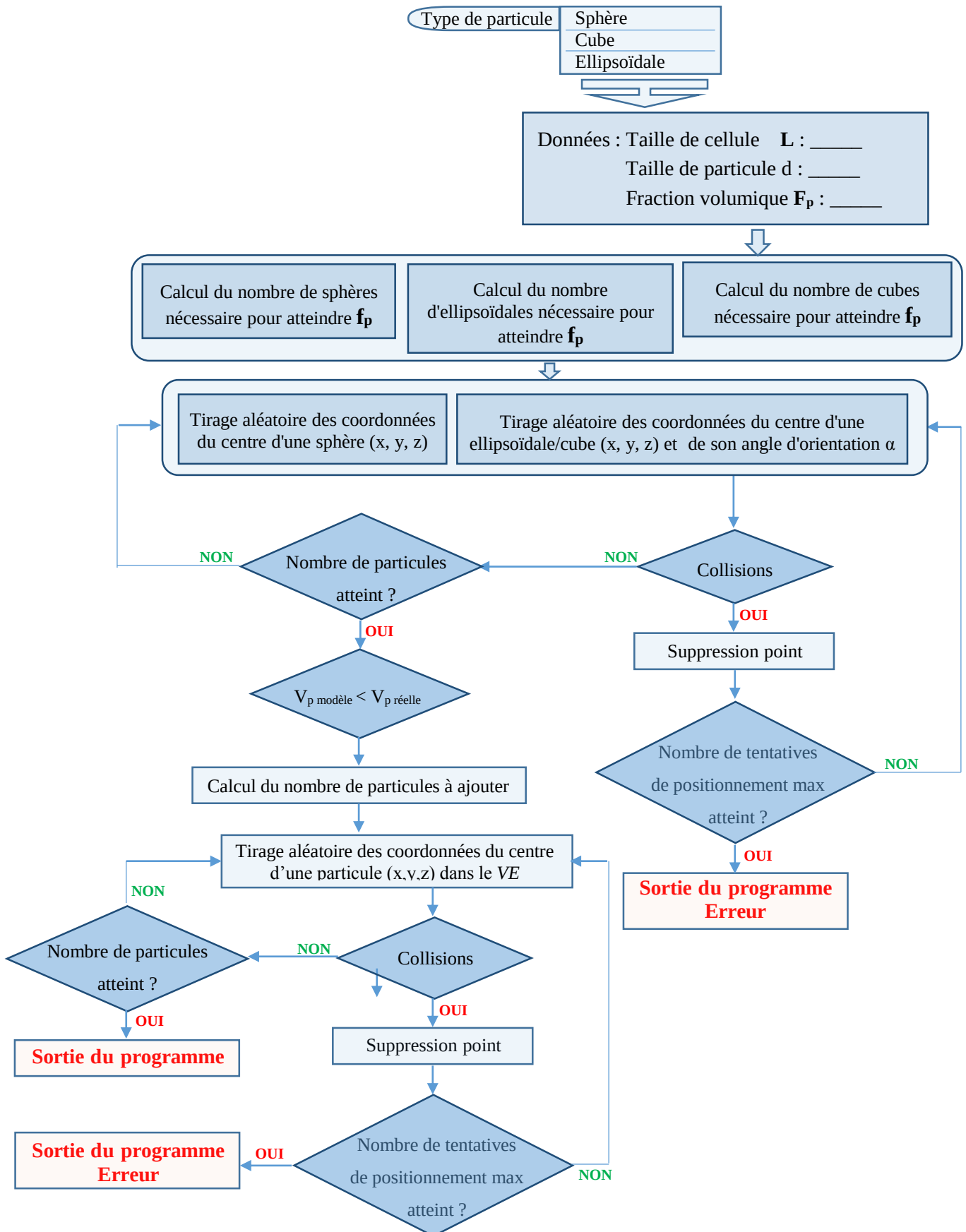


Figure II-14 Algorithme de génération aléatoire de particules en 3D dans un VE.

## II.4 Estimation du temps d’affichage de microstructure à N particules

Afin d’évaluer notre scripts pour la génération des différents microstructures à particules simples, on doit tester ce dernier en fonction du temps. Dans ce cas, les moyennes utiliser pour faire ces tests sont : un micro portable de type *Asus V75W* de caractéristique : RAM 16GO, Disque dur de capacité : 750GO, Processeur de type I7. Dans cette étude, plusieurs tests en fonction du nombre de particules, le choix des particules est limité aux sphères. Plusieurs fractions volumiques ( $f_p$ ) pour les particules sont utilisés (5% jusqu’à 50%). Les différentes estimations utilisées pour le nombre de sphères suivants ( $N_p$ ) : 50, 100, 150, 200, 500 et 1000 sphères. Les fractions utilises sont : 32, 35, 40 et 50%.

Nous avons effectué une étude de sensibilité dans le but de regarder l’influence des temps de génération sur les différents paramètres tels que :

- La taille du volume élémentaire  $VE$  caractérisée par la longueur  $l$
- La distribution des particules : aléatoire, périodique ou hexagonale
- La taille des particules  $r$
- La fraction volumique des particules  $f_p$

Les conditions appliquées pour la distribution des particules (figure II-15) sont :

- aucun chevauchement entre les particules.
- les particules ne touchent pas les bords de la cellule cubique

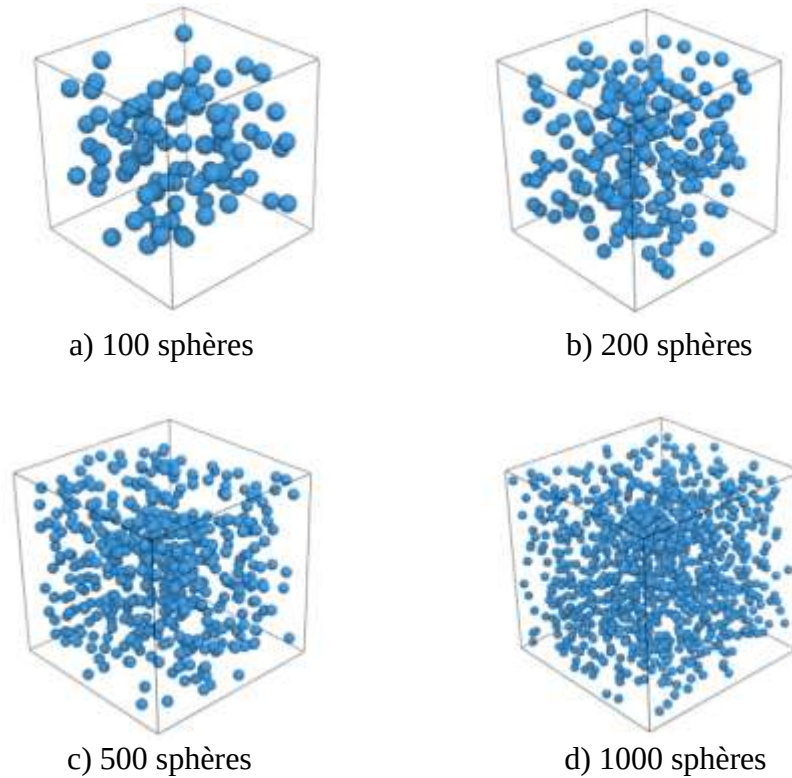


Figure II-15 Génération de différentes cellules contenant des sphères avec une fraction volumique de 5%

La figure II.16 illustre l'organigramme qui regroupe l'ensemble des étapes de génération d'une fraction volumique  $f_p$  souhaitée, pour  $N$  particules. Il faut noter que les paramètres morphologiques principaux d'une microstructure 3D qui pilotent la génération d'une fraction volumique  $f_p$  sont :

- Le volume total du matériau  $V$ .
- Le nombre des particules  $N$  dans la matrice.
- Le rayon des particules  $R$  ou leur volume  $V_p$ .

La relation permettant de lier les différents paramètres morphologiques est donnée par l'équation suivante :

$$f_p = N \frac{V_p}{V} = N \frac{\frac{4}{3}\pi R^3}{l^3}$$

avec  $l$  est la longueur du volume d'unité

Le principe de la génération des particules comme il est cité avant dans ce chapitre, l'évaluation de l'algorithme *RSA* permet de comprendre la performance de cet outil (figure

II.16). Pour cela, la vérification de la condition  $V_p \text{ modèle} < V_p \text{ réelle}$  doit être justifié pour valider cet algorithme.

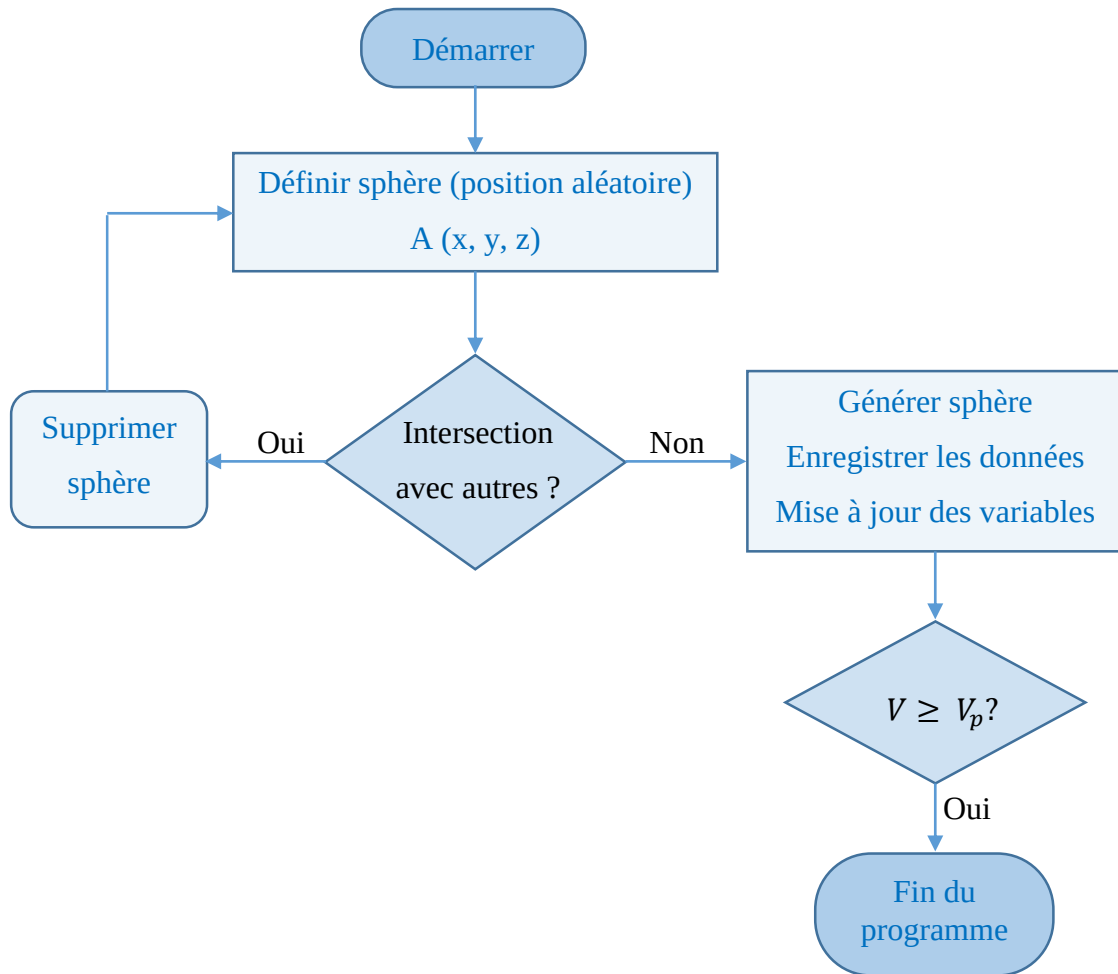


Figure II-16 Procédure RSA pour la génération des sphères aléatoires

Dans les tableaux suivants, le terme "*Maxtry*" représente le nombre d'essai qui est basé sur le choix hasard d'un emplacement du centre de particule, suivi par la vérification de la distance entre le centre des deux particules proches. Le terme "*Sp*" représente le nombre de sphères générés.



| nombre      | Temps         | <i>Maxtry</i> (Sélectionnez un plus grand nombre d'essais) |              |               |                |                 |
|-------------|---------------|------------------------------------------------------------|--------------|---------------|----------------|-----------------|
|             | N° Sp générés | <b>1000</b>                                                | <b>10000</b> | <b>100000</b> | <b>1000000</b> | <b>10000000</b> |
| <b>50</b>   | t (s)         | 3.622                                                      | 4.319        | 6.362         | 15.516         | --              |
|             | Sp            | 39                                                         | 42           | 45            | 45             | --              |
| <b>100</b>  | t (s)         | 17.315                                                     | 20.289       | 30.502        | 59.500         | --              |
|             | Sp            | 83                                                         | 88           | 97            | 98             | --              |
| <b>150</b>  | t (s)         | 35.254                                                     | 41.825       | 59.178        | 145.301        | --              |
|             | Sp            | 116                                                        | 125          | 136           | 145            | --              |
| <b>200</b>  | t (s)         | 61.891                                                     | 85.540       | 99.079        | 188.831        | --              |
|             | Sp            | 152                                                        | 176          | 184           | 192            | --              |
| <b>500</b>  | t (s)         | 485.424                                                    | 656.506      | 781.192       | 850.486        | --              |
|             | Sp            | 397                                                        | 458          | 490           | 500            | --              |
| <b>1000</b> | t (s)         | 2234.692                                                   | 2817.193     | 3145.234      | 3259.044       | --              |
|             | Sp            | 5                                                          | 4            | 9             | 2              | --              |
|             |               | 842                                                        | 945          | 1000          | 1000           | --              |

Tableau II.1 Temps de génération de sphères avec une fraction 32%

| nombre      | Temps         | <i>Maxtry</i> (Sélectionnez un plus grand nombre d'essais) |              |               |                |                 |
|-------------|---------------|------------------------------------------------------------|--------------|---------------|----------------|-----------------|
|             | N° Sp générés | <b>1000</b>                                                | <b>10000</b> | <b>100000</b> | <b>1000000</b> | <b>10000000</b> |
| <b>50</b>   | t (s)         | 2.578                                                      | 3.047        | 4.740         | 20.111         | 100.541         |
|             | Sp            | 31                                                         | 34           | 37            | 40             | 40              |
| <b>100</b>  | t (s)         | 13.257                                                     | 18.375       | 30.131        | 49.592         | --              |
|             | Sp            | 70                                                         | 81           | 87            | 89             | --              |
| <b>150</b>  | t (s)         | 32.291                                                     | 42.918       | 49.854        | 76.773         | --              |
|             | Sp            | 107                                                        | 118          | 127           | 127            | --              |
| <b>200</b>  | t (s)         | 73.994                                                     | 67.558       | 76.702        | 70.110         | --              |
|             | Sp            | 148                                                        | 150          | 150           | 150            | --              |
| <b>500</b>  | t (s)         | 487.480                                                    | 569.99       | 652.888       | 942.876        | --              |
|             | Sp            | 376                                                        | 422          | 458           | 477            | --              |
| <b>1000</b> | t (s)         | --                                                         | --           | --            | 3275.528       | 7513.066        |
|             | Sp            | --                                                         | --           | --            | 4              | 982             |
|             |               | --                                                         | --           | --            | 955            | 982             |

Tableau II.2 Temps de génération de sphères avec une fraction 35%

| nombre      | Temps         | <i>Maxtry</i> (Sélectionnez un plus grand nombre d'essais) |              |               |                |                 |
|-------------|---------------|------------------------------------------------------------|--------------|---------------|----------------|-----------------|
|             | N° Sp générés | <b>1000</b>                                                | <b>10000</b> | <b>100000</b> | <b>1000000</b> | <b>10000000</b> |
| <b>50</b>   | t (s)         | 1.132                                                      | 1.779        | 2.672         | 10.154         | 119.867         |
|             | Sp            | 21                                                         | 26           | 27            | 28             | 31              |
| <b>100</b>  | t (s)         | 7.792                                                      | 10.375       | 13.684        | 40.764         | 2.42.10         |
|             | Sp            | 57                                                         | 65           | 70            | 76             | 76              |
| <b>150</b>  | t (s)         | 19.719                                                     | 28.5444      | 41.962        | 72.509         | 266.78          |
|             | Sp            | 89                                                         | 101          | 112           | 116            | 117             |
| <b>200</b>  | t (s)         | 45.068                                                     | 54.854       | 72.284        | 113.451        | --              |
|             | Sp            | 128                                                        | 141          | 150           | 156            | --              |
| <b>500</b>  | t (s)         | 328.810                                                    | 406.471      | 490.419       | 703.655        | --              |
|             | Sp            | 334                                                        | 370          | 390           | 404            | --              |
| <b>1000</b> | t (s)         | 1303.280                                                   | 1908.642     | 2241.523<br>1 | 2622.206       | --              |
|             | Sp            | 651                                                        | 761          | 805           | 831            | --              |

Tableau II.3 Temps de génération de sphères avec une fraction 40%

| nombre      | Temps         | <i>Maxtry</i> (Sélectionnez un plus grand nombre d'essais) |               |               |                |                 |
|-------------|---------------|------------------------------------------------------------|---------------|---------------|----------------|-----------------|
|             | N° Sp générés | <b>1000</b>                                                | <b>10000</b>  | <b>100000</b> | <b>1000000</b> | <b>10000000</b> |
| <b>50</b>   | t (s)         | 1.062                                                      | 1.453         | 2.364         | 9.397          | --              |
|             | Sp            | 21                                                         | 24            | 25            | 25             | --              |
| <b>100</b>  | t (s)         | 5.469                                                      | 6.439         | 10.915        | 45.952         | --              |
|             | Sp            | 49                                                         | 52            | 58            | 61             | --              |
| <b>150</b>  | t (s)         | 16.688                                                     | 19.204        | 25.907        | 58.743         | --              |
|             | Sp            | 82                                                         | 88            | 93            | 96             | --              |
| <b>200</b>  | t (s)         | 26.407                                                     | 34.926        | 41.769        | 74.123         | --              |
|             | Sp            | 101                                                        | 114           | 120           | 121            | --              |
| <b>500</b>  | t (s)         | 209.048                                                    | 251.400       | 965.464       | 379.333        | --              |
|             | Sp            | 264                                                        | 294           | 311           | 315            | --              |
| <b>1000</b> | t (s)         | 1189.324<br>1                                              | 1203.154<br>2 | 1372.029<br>6 | 1854.946<br>2  | --              |
|             | Sp            | 489                                                        | 596           | 644           | 661            | --              |

Tableau II.4 Temps de génération de sphères avec une fraction 50%

Ce script a donné des résultats acceptables à savoir, dans le cas de fraction 32%, on obtient le même nombre de sphère générés que celui donné (ex. 1000 sphères) dans un temps de 3145s ( $\approx 52$ min et 42s) (Tableau II.1), la même précision a été constaté pour le cas de 500 sphères. Cependant, pour les autres fractions (Tableaux II.2, II.3 et II.4), les résultats obtenus de la génération des particules n'ont pas été satisfaisant et cette constatation a été observée par d'autres chercheurs ([Segurado and Llorca, 2002](#) ; [Kari et al. 2007](#)).

Le temps de générations de tous ces essais de simulation est limité par 5heurs, avec les caractéristiques de l'outil informatique utilisé.

## **II.5 Différentes méthodes de maillage**

Il existe plusieurs types de maillage pour le cas des microstructures, parmi ces type on cite : le maillage régulier et le maillage adaptatif.

### **II.5.1 Maillage régulier**

Il s'agit de construire un maillage simple régulier du surface 2D ou volume 3D de l'échantillon et d'attribuer aux éléments finis les caractéristiques de la phase dans laquelle ils sont situés. Il est également possible d'utiliser des éléments "multiphasés" où l'attribution des propriétés de chaque phase se fait sur les points d'intégration des éléments selon la phase dans laquelle ils sont situés. On trouvera plus de détails sur les éléments multiphasés, ainsi que des exemples d'utilisation dans les références ([Steinkopff et Sautter, 1995a,b](#) ; [Lippmann et al., 1997](#) ; [Kanit et al., 2003](#) ; [Khdir, 2013](#) ; [El moumen 2014](#)).

L'avantage majeur de cette méthode réside dans la simplicité et la rapidité avec laquelle est créé le milieu hétérogène. De plus, la méthode est applicable à tout type de milieu hétérogène.

### **II.5.2 Maillage adaptatif**

Une autre méthode consiste à utiliser un maillage initial quelconque (libre ou régulier), suffisamment fin, et à déplacer certains nœuds du maillage pour les faire coïncider avec les interfaces. La méthode permet de conserver la topologie des interfaces de la microstructure. ([Steinkopff et Sautter, 1995a,b](#)) proposent une méthode d'adaptation du maillage en identifiant les nœuds les plus proches des frontières et en imposant des déplacements de ces nœuds dans les directions normales aux frontières. L'algorithme d'adaptation est détaillé dans la référence ([Steinkopff, 1993](#)).

## II.6 Maillage 2D/3D des microstructures

Afin à étudier le comportement mécanique des microstructures 2D et 3D, la technique présenter le maillage est basée sur la réalisation d'un maillage régulier. Deux cas de microstructure sont considérés, une microstructure 2D a étudié dans le chapitre suivant, et une microstructure 3D dans le dernier chapitre. La géométrie d'un composite à particules simples dans une cellule 2D ou 3D est entièrement déterminé par les données de centres des particules et son diamètre. A partir d'une cellule 2D. La représentation des géométries (figure II-17) se fait en utilisant un outil de simulation (code *Zebulon EF*). Les géométries surfaciques obtenues sont finalement introduites dans le code pour une discrétisation réaliste. La démarche de maillage consiste à construire un maillage des surfaces, La (figure II-18.a) représenté un exemple du maillage surfacique obtenu. Ce maillage contient 200 EF en longueur et 200 EF en largeur. Au total, on a une facette entourée par 400 éléments carrés de type C2D8 (maillage 2D). Pour le cas 3D, cette étape est suivie par remplir ce maillage surfacique (2D) par des éléments volumiques, La figure II-18.b représente les géométries volumiques finales avec une discrétisation. Cette géométrie contient 30x30x30 EF, au total on a 27000 EF quadratique de type C3D27.

Les cellules possèdent des particules avec la contrainte de non chevauchement entre ces particules. La taille des éléments finis doit donc être adaptée si l'on souhaite obtenir une bonne précision du calcul. Une étude de vérification de nombre de éléments en fonction des propriétés mécaniques ( $k$  et  $\mu$ ) dans le cas d'une cellule 2D ont été fait pour justifier le maillage (figure II-19 a,b).

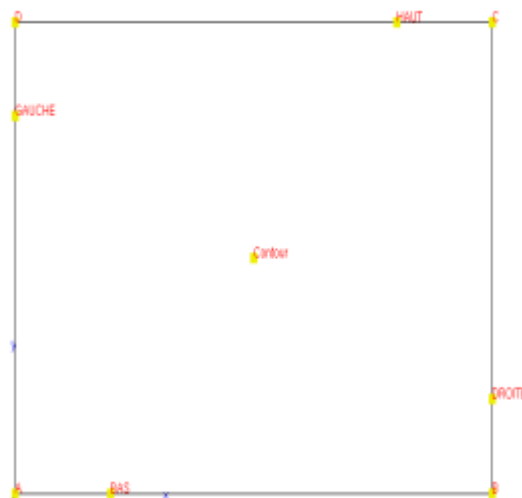
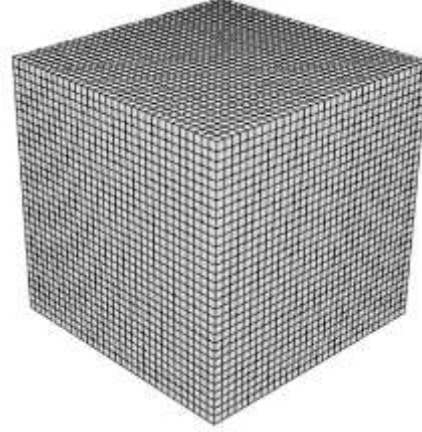
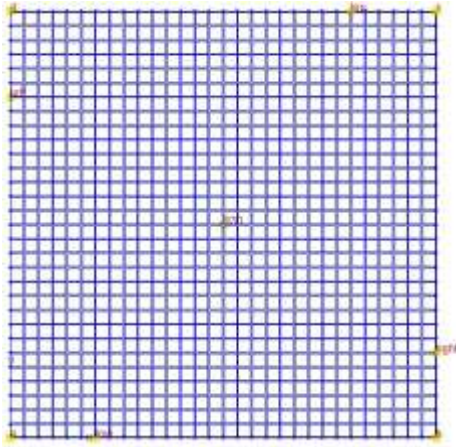
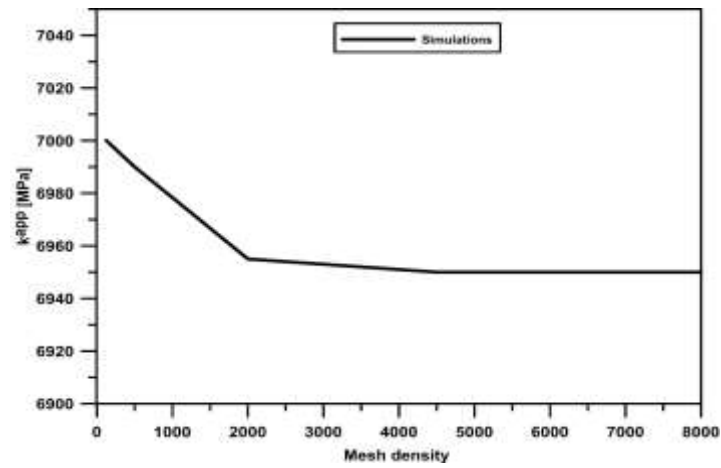


Figure II-17 Représentation de l'interface 2D

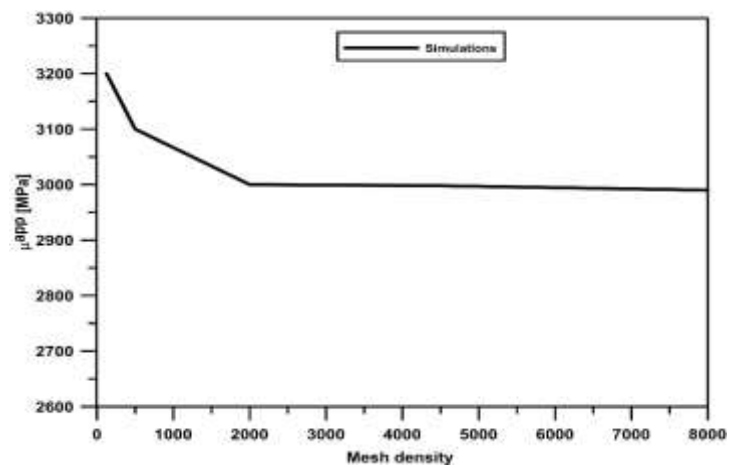


(a) (b)

Figure II-18 Maillage 2D et 3D de la géométrie d'une microstructure



(a)



(b)

Figure II-19 Effet du nombre des éléments sur les valeurs du module de compressibilité apparent  $k^{app}$  et module de cisaillement apparent  $\mu^{app}$ .

L'étape suivante consiste à superposer le maillage 2D sur l'image 2D d'une microstructure dans le cas 2D, par contre pour un maillage 3D, le maillage 3D est superposer sur des images successives d'une microstructure générée comme cité avant avec le processus de poisson, la figure II-20 représente cette technique de superposition.

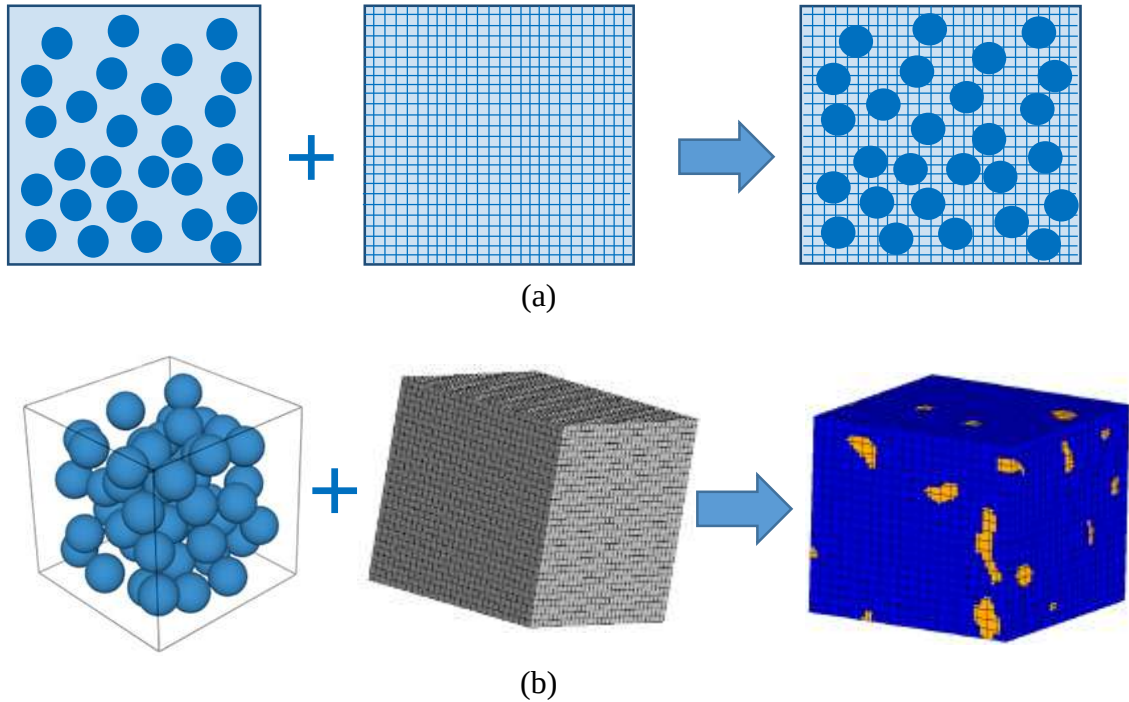


Figure II-20 Superposition entre le maillage et les images (cas 2D & 3D)

Les outils de maillage seront utilisés dans la suite pour les calculs par élément fini afin d'évaluer le comportement mécanique des microstructures à étudier.

## II.7 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons abordé le développement d'outil numérique (2D et 3D) générant des dispersions aléatoires de particules dans un volume élémentaire *VE* prédéfini. Deux types de géométries de particules ont été explorées : le cercle pour le cas 2D et la sphère pour le cas 3d. En effet, nous avons constaté qu'on jouant sur les dimensions des particules (cercle en 2D).

Dans un premier temps, le développement d'un modèle de dispersion aléatoire de particules circulaire (ou sphériques), de rayon constant, dans une cellule carrée *VE* (ou cubique) a été programmé sous *Python*. Le modèle repose sur les hypothèses suivantes :

- aucune périodicité dans le volume élémentaire, car nous nous situons dans le cas d'une dispersion aléatoire de particules sans motif répétitif ;
- toutes les particules (cercles, sphères, ...) ont le même rayon.

Nous avons fait une étude de sensibilité sur ce modèle pour voir l'influence de temps de génération sur la fraction volumique des particules et leur taille.

En ce sens, dans un second temps, pour étudier le comportement des matériaux hétérogènes, on a défini une méthode de génération de maillage des microstructures obtenues par les scripts, on applique ensuite la superposition entre le maillage et l'image obtenue avec la technique de coupe transversale pour le cas de 3D, et pour le cas 2D, la superposition directe des images obtenus avec le maillage adapté. La convergence du maillage a été justifiée dans cette partie.

## ***Chapitre III.***

# **Etude des matériaux poreux à deux phases**



### III. Etude des matériaux poreux à deux phases

Dans cette partie, une étude sur le comportement élastique d'un matériau biphasique est menée dont le but de déterminer le volume élémentaire représentatif *VER* de ce matériau. Cette étude est basé sur la simulation à l'aide du code *ZeBuLon* et le calcul des propriétés effectives d'un matériau poreux en 2D contenant des pores forme circulaire. Les résultats obtenus sont comparés avec les bornes de Hashin-Strikman (*HS*) ([Hashin & Shtrikman, 1963](#)) et le modèle autocohérent de Christensen-Lo ([Christensen & Lo, 1979](#)). Une attention particulière est portée sur la détermination de la taille du volume élémentaire représentatif *VER*

### III.1 Introduction

La détermination des propriétés élastiques des matériaux hétérogènes (ex. milieu poreux) nécessite la prise en compte de la microstructure en utilisant les techniques d'homogénéisation numériques. Ces techniques sont basées sur la détermination d'un volume élémentaire représentatif *VER* avec leurs propriétés effectives. La détermination du *VER* et ses propriétés effectives pour le cas d'un matériau hétérogène dépendent de la connaissance des propriétés des deux phases et la morphologie de la phase d'inclusion. La technique appliquée dans cette partie pour la détermination du *VER* et l'évaluation du comportement du matériau étudié est la même utilisée dans les travaux de ([Kanit et al. 2003](#) ; [El Moumen et al. 2014](#)). Cette technique consiste à calculer les propriétés élastiques effectives pour plusieurs réalisations qui ont différentes microstructures (sous forme d'images réelles) en utilisant la simulation numérique et statistique. Ces images sont de forme de cellules carrées de dimension 3000 x 3000 par unité et contiennent des particules sous forme d'inclusions. Le but de ce chapitre est de trouver le volume élémentaire représentatif *VER* pour une microstructure d'un matériau poreux avec différents fractions volumiques, ainsi l'évaluation de ce volume avec une quantité qui s'appelle "la portée intégrale  $A_2$ ", cette dernière permet d'établir la morphologie équivalente pour notre matériau. La figure III.1 représente la morphologie équivalente de la microstructure étudiée.

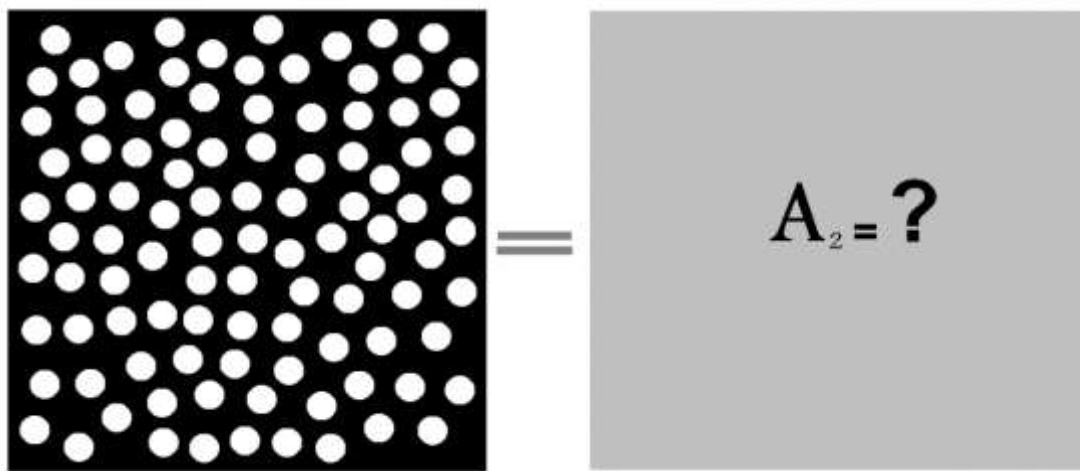


Figure III-1 Modèle équivalent du matériau à deux phases

### III.2 Description et génération de la microstructure en 2D

La simulation numérique de différentes réalisations de la microstructure étudiée passe par deux étapes, l'étape de description de la microstructure et l'étape des calculs numériques par la méthode des éléments finis.

L'étape de description de la microstructure nécessite la caractérisation de la morphologie de cette dernière, c.à.d. la forme des particules (cas 2D) et leurs arrangements aléatoires dans la cellule. Par la suite, on passe à la détermination du comportement mécanique de différentes structures générées.

#### III.2.1 Description de la microstructure

Dans cette partie, la microstructure biphasée poreuse en deux dimensions est considérée. La phase 1 représente les inclusions et la phase 2 représente la matrice, avec :

$$P = 1 - P_1$$

$P_1$  et  $P$  représentent respectivement les fractions volumiques de la phase 1 (inclusions) et la phase 2 (la matrice).

La microstructure contient des particules de forme circulaire en 2D, le processus de génération de ces cellules a été expliqué dans le chapitre II. Les inclusions (pores) se distribuent aléatoirement dans la cellule (Figures III.2, III.3 et III.4). Pour évaluer le comportement élastique de ce matériau, trois fractions volumiques d'inclusion sont utilisés : 0,10, 0,30 et 0,50. En plus, plusieurs réalisations sont étudiés ( $N = 1, 5, 10, 20, 50, 100, 150, 200$  et  $250$  particules) avec une distribution aléatoire des particules pour chaque volume (Tableau III.1). Le rayon de la particule dépend de la fraction volumique (fraction surfacique pour le cas 2D) où on a :

$$P_1 = N * S_{\text{particule}} / S_{\text{cellule}}$$

avec:

$$S_{\text{particule}} = (P_1 * S_{\text{cellule}}) / N,$$

où :  $S_{\text{particule}}$  : l'aire de particule ( $S_{\text{particule}} = \pi.r^2$ )

$S_{\text{cellule}}$  : l'aire de la cellule

$r$  : rayon de particule

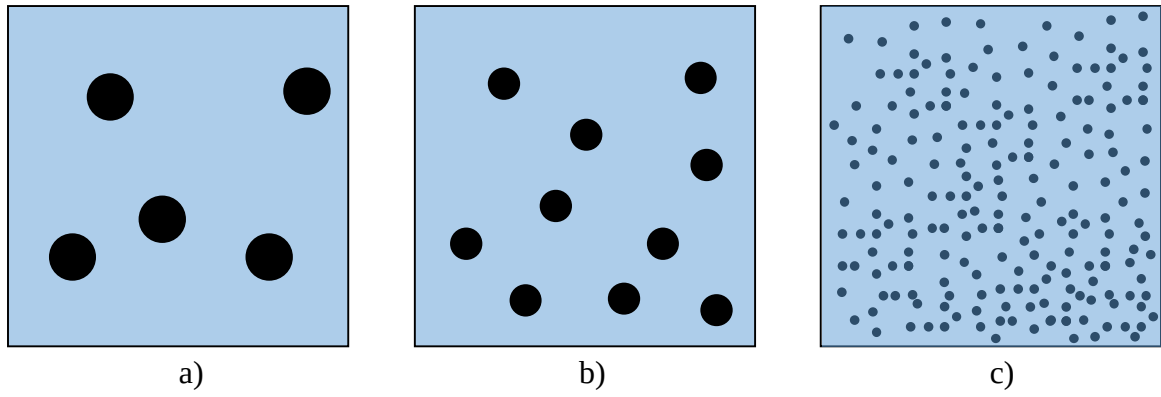


Figure III-2 Fraction volumique 0.10 d'inclusions, a) 5 inclusions, b) 10 inclusions, c) 200 inclusions.

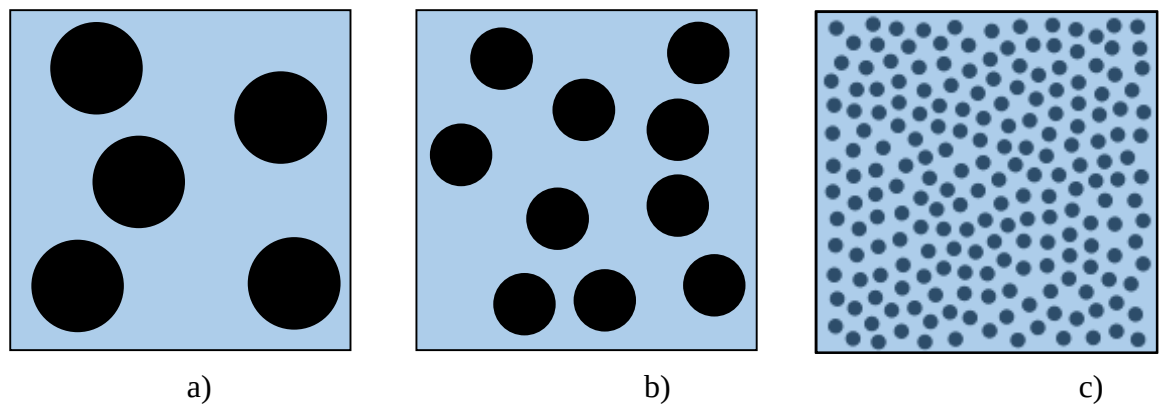


Figure III-3 Fraction volumique 0.30 d'inclusions, a) 5 inclusions, b) 10 inclusions, c) 200 inclusions

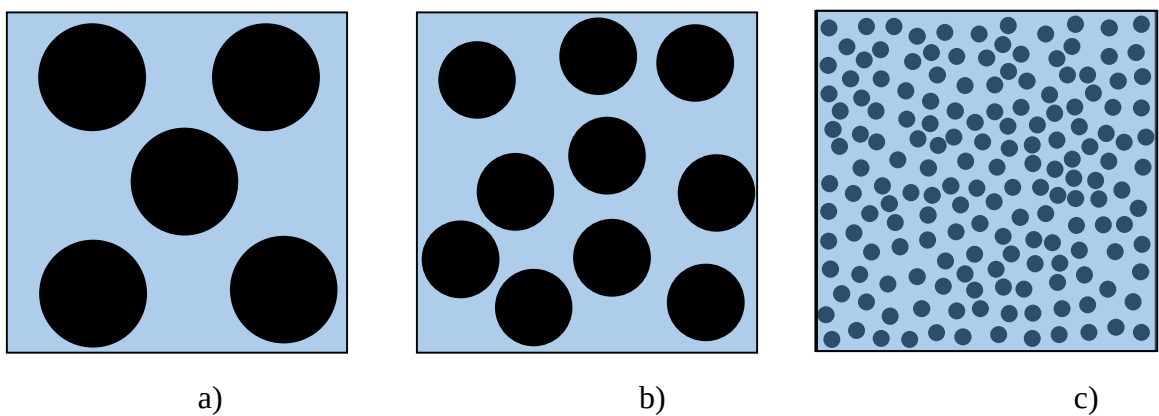


Figure III-4 Fraction volumique 0.50 d'inclusions, a) 5 inclusions, b) 10 inclusions, c) 200 inclusions.

### III.2.2 Propriétés élastiques des composants

Les cellules représentent la microstructure d'un matériau poreux à étudier. Chaque phase est caractérisée par ces propriétés mécaniques (le module de Young ( $E$ ) et le coefficient de Poisson ( $\nu$ )) qui seront utilisées dans les simulations numériques. Les propriétés élastiques du matériau étudié sont indiquées dans le Tableau III.1.

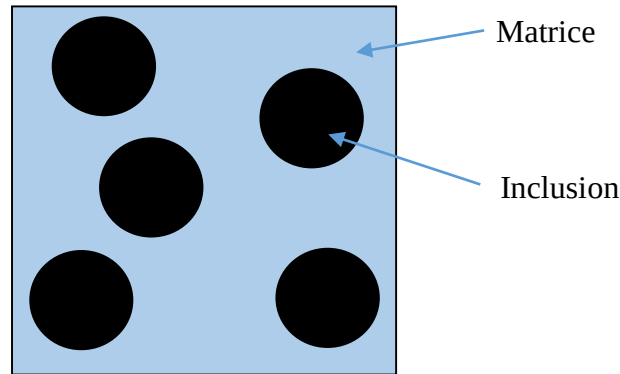


Figure III-5 Microstructure étudiée en 2D

| <i>Constitution</i> | $E$ [MPa] | $\nu$ | $k$ [MPa] | $\mu$ [MPa]        |
|---------------------|-----------|-------|-----------|--------------------|
| <b>Matrice</b>      | 10000     | 0.3   | 8333      | 3846               |
| <b>Inclusion</b>    | $10^{-8}$ | 0.49  | 1,667E-07 | $3 \times 10^{-9}$ |

Tableau III. 1 Propriétés élastiques des composants

Pour la prédiction du comportement de ce matériau, deux propriétés macroscopiques sont étudiées ( $k$  et  $\mu$ ) pour différentes tailles de surface  $S$  (ici  $S = N$ , où  $N$  est le nombre de particules) et un nombre de réalisations  $n$  de la microstructure. Le tableau (III.2) représente les différentes réalisations  $n$  en fonction du nombre de particules circulaire  $N$  (ou la taille du volume  $N$  qui varie entre 1 et 350 particules).

| <b>N</b> | <b>1</b> | <b>5</b> | <b>20</b> | <b>50</b> | <b>80</b> | <b>100</b> | <b>150</b> | <b>200</b> | <b>300</b> | <b>350</b> |
|----------|----------|----------|-----------|-----------|-----------|------------|------------|------------|------------|------------|
| <b>n</b> | 100      | 60       | 30        | 20        | 15        | 10         | 5          | 5          | 5          | 5          |

Tableau III.2 Le nombre de réalisations  $n$ , considéré pour chaque nombre d'inclusions  $N$ .

### III.3 Procédure de calcul de la microstructure

#### III.3.1 Processus de génération et maillage de la microstructure en 2D

Le processus de génération des microstructures de différents fractions (Figures III.2, III.3 et III.4) a été obtenu à l'aide de l'algorithme *RSA* comme cité dans le chapitre précédent, cet algorithme reste encore utilisé à ce jour ([Moussaddy et al., 2013](#) ; [Pahlavan et al., 2013](#) ; [Ghossein E. et Lévesque M., 2014](#) ; [El Moumen et al., 2014](#)). La distribution aléatoire des inclusions dans la cellule carrée est générée avec le script Python (Figure II.6). Les deux contraintes utilisés pour les distributions des inclusions sont : (i) ces inclusions ne chevauchent pas entre elles, (ii) ces inclusions ne doivent pas touchés les bords (parois) de la cellule.

Dans le but de déterminer le volume élémentaire représentatif *VER*, la méthodologie consiste à déterminer les deux propriétés macroscopiques apparentes (le coefficient de compression  $k^{app}$ , le coefficient de cisaillement  $\mu^{app}$ ) de matériau étudié.

Cette méthodologie comporte les étapes suivantes :

- Génération d'un ensemble de cellules carrées en 2D de dimension 3000x3000 pixels avec une résolution de 1000 pixels/cm, ces cellules contiennent différentes particules circulaires, et pour chaque fraction volumique,
- Pour chaque taille, différentes réalisations  $n$  sont considérées. Ces réalisations, qui ont le même volume, sont différenciées au niveau de la distribution aléatoire des inclusions dans l'espace.
- La superposition de chaque cellule élémentaire *VE* avec le maillage,
- Application des conditions aux limites *CL*
- Calcul par la méthode des éléments finis *MEF* des propriétés apparentes  $k$  et  $\mu$  pour les différentes cellules,
- Traçage des courbes correspondantes aux propriétés apparentes  $k$  et  $\mu$  en fonction de nombre d'inclusions  $V = N$ ,
- Détermination des propriétés effectives du *VER*.

Le schéma de la figure III.5 montre en général la méthodologie à suivre pour calcul des propriétés :  $K$ ,  $\mu$  &  $E$ .

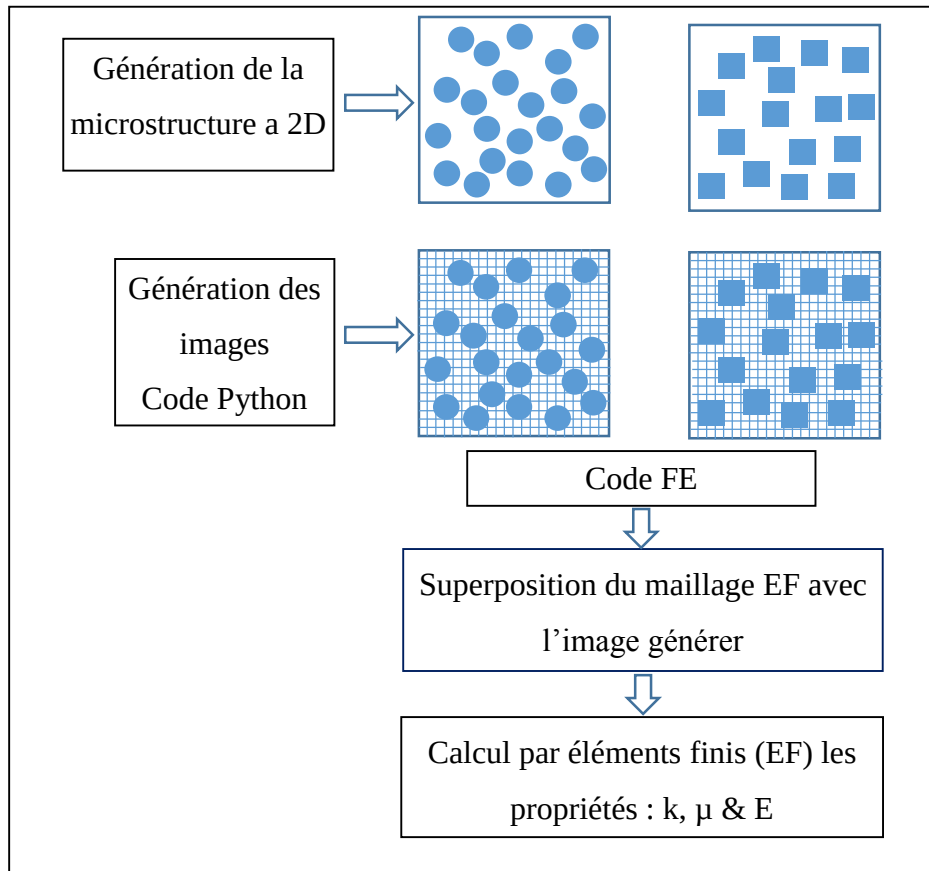


Figure III-6 Processus de génération, maillage de la microstructure en 2D et calcul des propriétés  $k$ ,  $\mu$  &  $E$

### III.3.2 Maillage de la microstructure

Le maillage par éléments finis associée à l'image de la microstructure est obtenue en utilisant la méthode des *éléments multi-phases* (Figure III.6), un maillage de type éléments finis carré régulier en 2D est superposé à l'image du matériau comme représenté dans la figure (III.6). Le nombre d'éléments est de 40000 et l'élément de maillage est un quadratique avec 4 nœuds et une intégration complète.

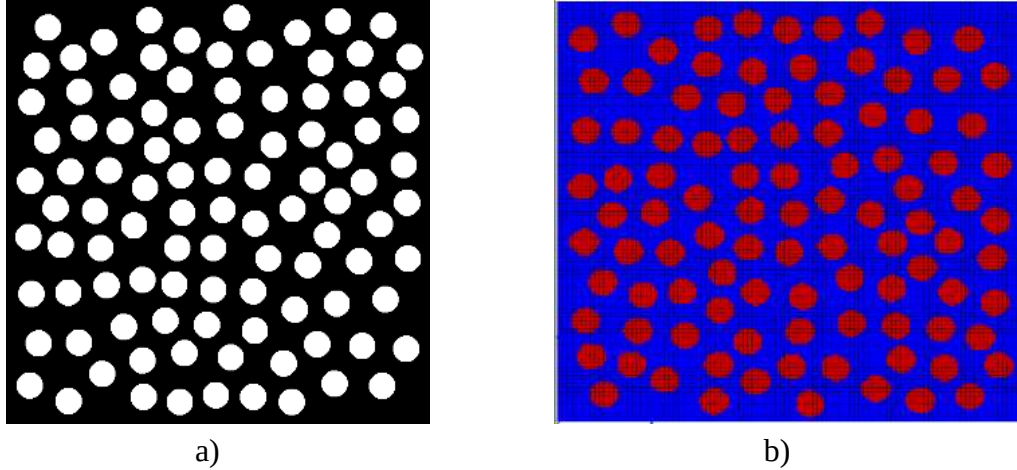


Figure III-7 Volume élémentaire représentatif *VER* associé au composite anisotrope :  
(a) La géométrie ; (b) Maillage par *éléments multi-phases*.

L'utilisation du code éléments finis *Zebulon* permet de faire des simulations sur des images réelles. Le maillage a été fait avec le module *Zmesh* du code *EF Zebulon*, ce module est conçu pour la superposition d'une image avec un maillage correspondant. L'évaluation des propriétés apparentes dépend du choix des conditions aux limites appliquées.

### III.3.3 Conditions aux limites

Pour déterminer les propriétés effectives d'un volume élémentaire, Il existe deux types de conditions aux limites que l'on peut appliquer sur sa frontière notée  $\partial V$ . Ces deux conditions aux limites sont :

- **Déformations uniformes aux frontières (*KUBC*)**

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

$$\begin{cases} \underline{u} = \underline{\underline{E}} \cdot \underline{x} & \forall \underline{x} \in \partial V \\ \langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle = \frac{1}{V} \int_V \underline{\underline{\varepsilon}} dV \end{cases} \quad (\text{III.1})$$

Le tenseur de contrainte macroscopique est définie par la moyenne spatiale.

$$\underline{\underline{\Sigma}} = \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle = \frac{1}{V} \int_V \underline{\underline{\sigma}} dV \quad (\text{III.2})$$



- **Conditions périodiques (*PERIODIC*) (*PBC*)**

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

$$\begin{cases} \underline{u} = \underline{\underline{E}} \cdot \underline{x} + \underline{v} & \forall \underline{x} \in \partial V \\ \underline{\underline{E}} = \langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle = \frac{1}{V} \int_V \underline{\underline{\varepsilon}} dV \end{cases} \quad (\text{III.3})$$

Où la fluctuation  $\underline{v}$  est périodique. Elle prend la même valeur pour deux points homologues sur les faces opposées du volume  $V$ .

Le vecteur de traction  $\underline{t} = \underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{n}$  prend des valeurs opposées à deux points homologues sur des faces opposées de  $V$ . En appliquant soit la contrainte ou la déformation macroscopique, L'objectif de cette section est la mise en place d'un problème linéaire élastique isotrope. Le comportement élastique linéaire isotrope selon la loi de Hooke est décrit par le tenseur élasticité de quatrième ordre  $\underline{\underline{c}}$ :

$$\underline{\underline{\sigma}}(\underline{x}) = \underline{\underline{c}}(\underline{x}) : \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{x}) \quad (\text{III.4})$$

La simulation d'un tel comportement nécessite la connaissance de  $E$  et de  $\nu$ . Le coefficient  $\nu$  détermine le niveau de compressibilité dans le matériau,  $\lambda$  et  $\mu$  étant les coefficients de Lamé qui peuvent être exprimés en fonction du module de Young  $E$  et du coefficient de poisson  $\nu$  du matériau :

$$\mu = \frac{E}{2(1+\nu)}; k = \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)} \quad (\text{III.5})$$

Pour le cas des modèles à deux dimensions (2D), le matériau a été homogénéisée par les modules apparentes de compressibilité ( $k^{app}$ ) et le module de cisaillement ( $\mu^{app}$ ):

$$k^{app} = \langle \sigma \rangle : E_k = \frac{1}{2} \text{trace} \langle \sigma \rangle = \frac{1}{2} \langle \sigma_{11} + \sigma_{22} \rangle \quad (\text{III.6})$$

$$\mu^{app} = \langle \sigma \rangle : E_\mu = 2 \langle \sigma_{12} \rangle \quad (\text{III.7})$$

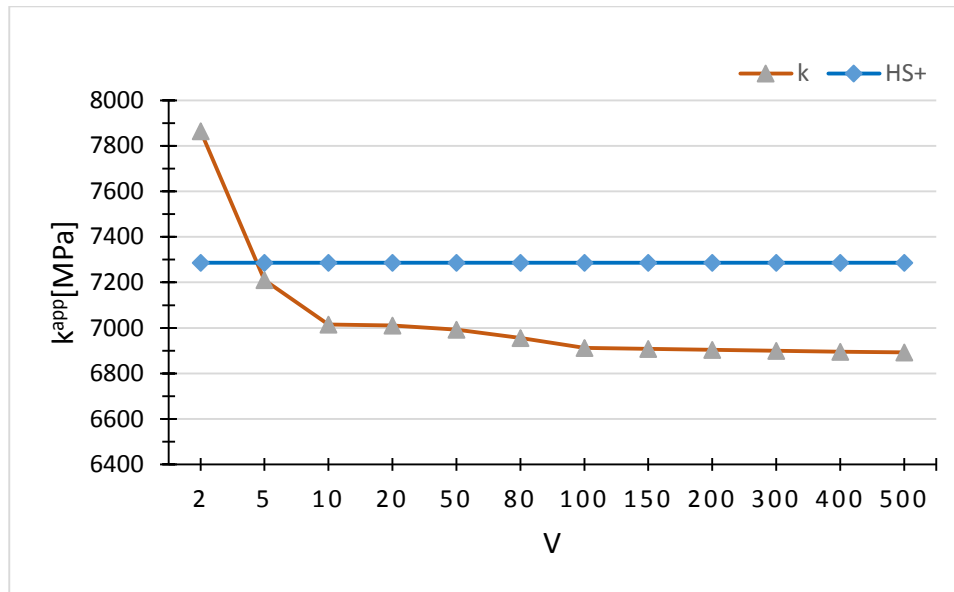
Les tenseurs de contrainte imposés macroscopiques  $\check{E}$  utilisée pour calculer les modules macroscopiques de compressibilité et de cisaillement dans le plan sont donnés par :

$$\begin{aligned}\check{E}_k &= \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix} \\ \check{E}_\mu &= \begin{pmatrix} 0 & 1/2 \\ 1/2 & 0 \end{pmatrix}\end{aligned}\tag{III.8}$$

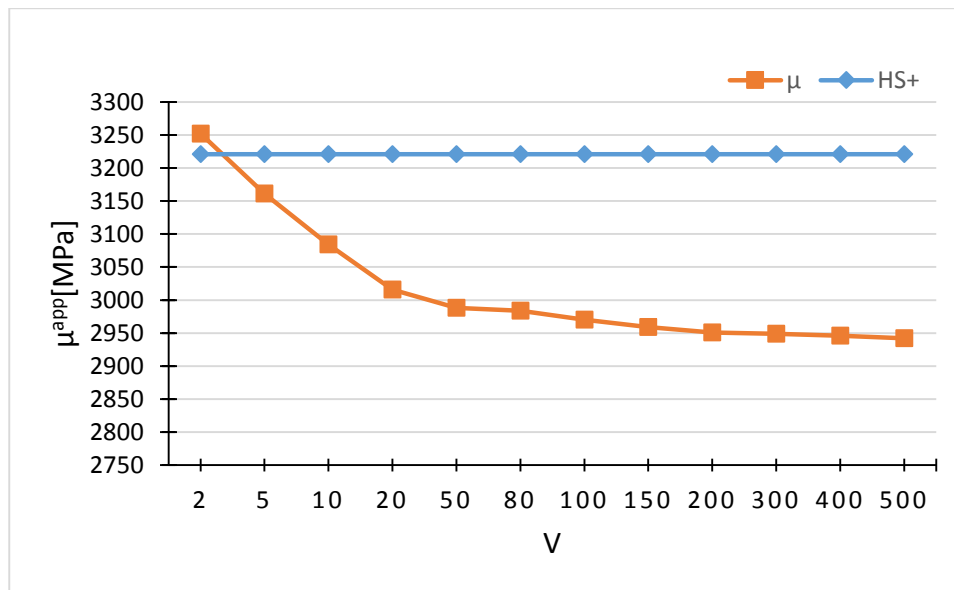
### III.4 Estimation des Propriétés élastiques apparentes et effectives

L'estimation des propriétés pour différentes réalisations du matériau avec les trois fractions volumiques considérés permet d'obtenir les volumes  $V < V_{\text{VER}}$  pour le cas des propriétés apparents, et dans le cas de convergence des résultats ou  $V \geq V_{\text{VER}}$  on obtient les propriétés effectives.

Les résultats des différentes simulations numériques pour les différentes réalisations avec des conditions aux limites cinématiques uniformes (*KUBC*), sont représentés sur les figures (III.7, III.8 et III.9). Ces résultats sont comparés aux bornes de Hashin-Shtrikman (HS+).



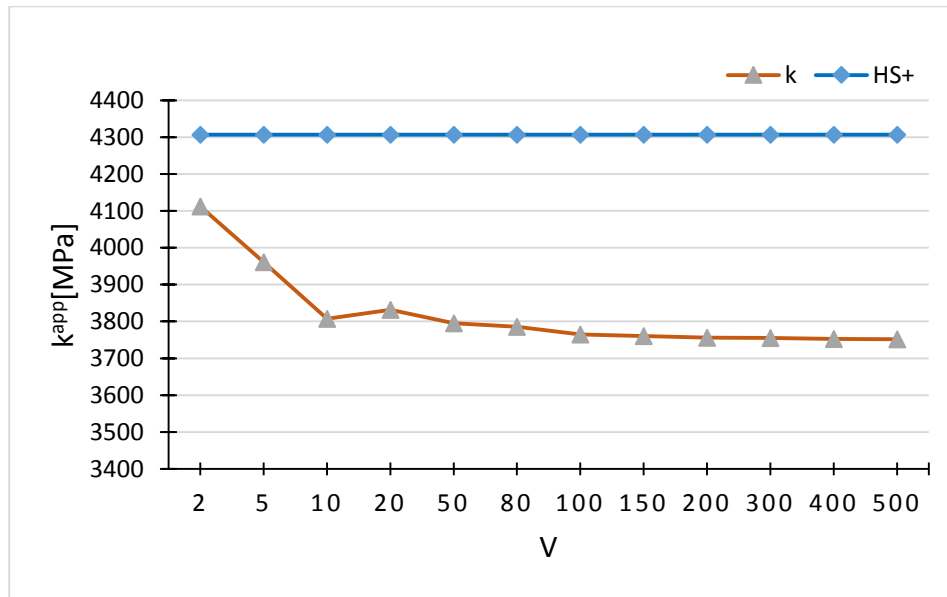
a)



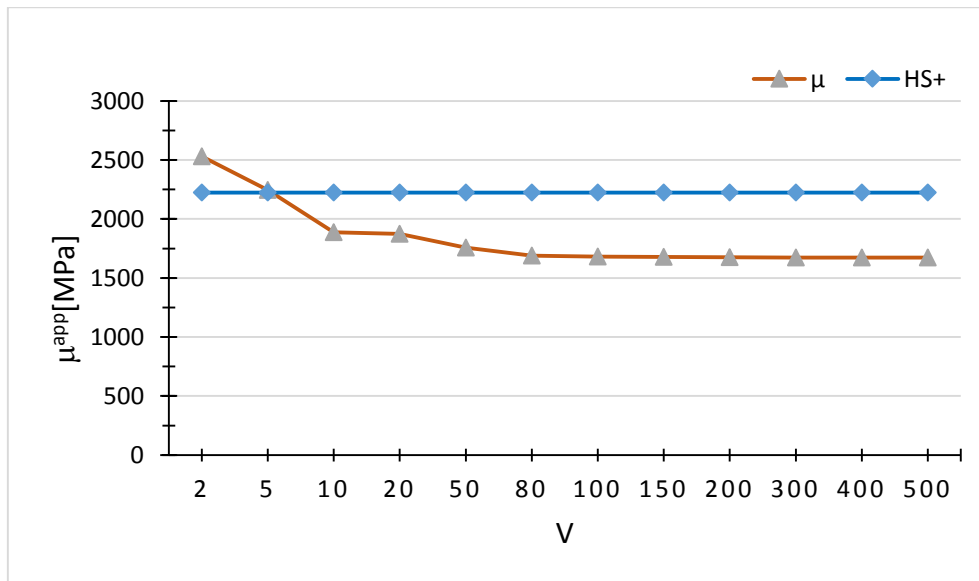
b)

Figure III-8 Courbes de convergence des propriétés élastiques apparentes en fonction de la taille du domaine  $V$  avec des conditions aux limites  $KUBC$  pour  $P = 0,10$  :

a) évolution de  $k^{app}$ , b) évolution de  $\mu^{app}$ .



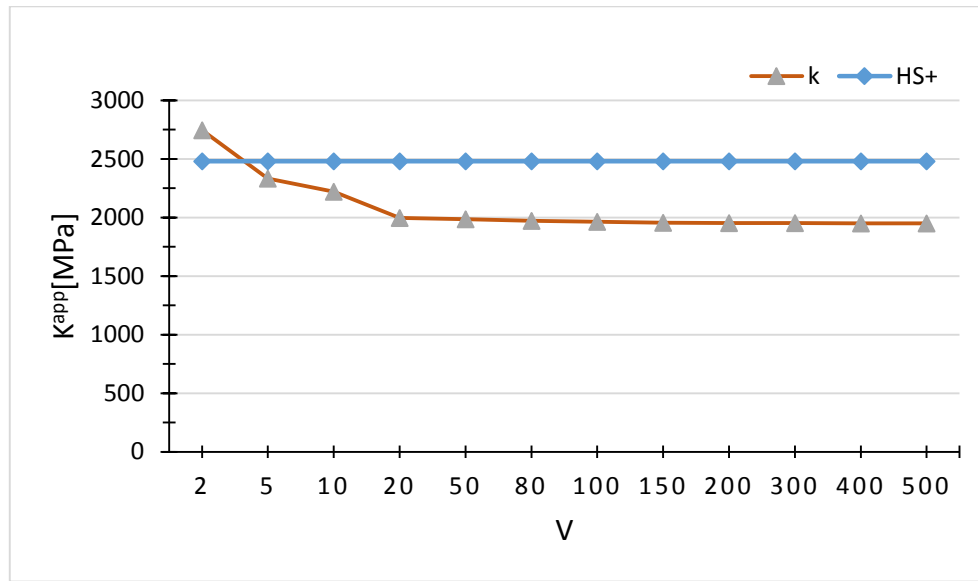
a)



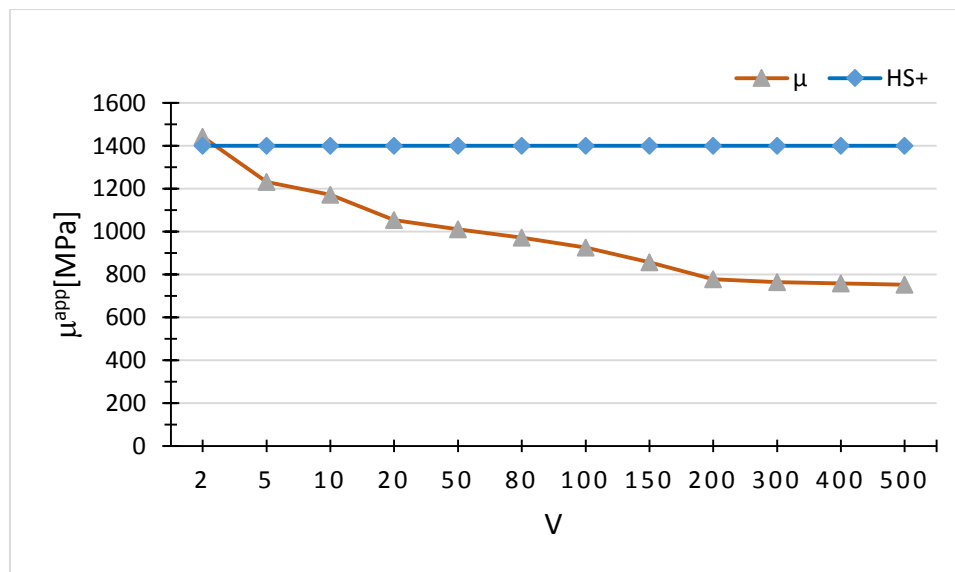
b)

Figure III-9 Courbes de convergence des propriétés élastiques apparentes en fonction de la taille du domaine  $V$  avec des conditions aux limites  $KUBC$  pour  $P = 0,30$  :

a) évolution de  $k^{app}$ , b) évolution de  $\mu^{app}$ .



a)



b)

Figure III-10 Courbes de convergence des propriétés élastiques apparentes en fonction de la taille du domaine  $V$  avec des conditions aux limites  $KUBC$  pour  $P = 0,50$  :

a) évolution de  $k^{app}$ , b) évolution de  $\mu^{app}$ .

## III.5 Fluctuation des propriétés effectives et détermination de la portée intégrale

### III.5.1 Notion de la portée intégrale

Nous considérons les fluctuations pour les valeurs moyennes sur les différentes réalisations d'un milieu aléatoire à l'intérieur du domaine  $V$ . En géostatistique, il est bien connu que pour une fonction aléatoire ergodique et stationnaire  $Z(x)$ , on peut calculer la variance  $D_Z^2(V)$  de la valeur moyenne  $Z(x)$  par rapport au volume  $V$  en fonction de la fonction de covariance centrale  $Q(h)$  de  $Z(x)$  par:

$$D_Z^2(V) = \frac{1}{V^2} \int_V \int_V Q(x - y) dx dy \quad (\text{III.10})$$

Pour un grand échantillon (avec  $V \gg A_2$ ), l'équation (III.10) peut être exprimé au premier ordre en  $1/V$  en fonction de la portée intégrale  $A_2$  dans l'espace  $R^2$ , par ([Matheron, 1971](#)) et ([Lantuejoul, 1991](#)):

$$D_Z^2(V) = D_Z^2 \frac{A_2}{V} \quad (\text{III.11})$$

avec:

$$A_2 = \frac{1}{D_Z^2} \int_{R^2} Q(h) dh \quad (\text{III.12})$$

où  $D_Z^2$  est le point variance de  $Z(x)$  et  $A_2$  est la portée intégrale de la fonction aléatoire  $Z(x)$ .

L'équation (III.11) est valide pour une combinaison d'additifs de la variable  $Z$  au-dessus de la région  $V$ , lorsque sa taille est telle que  $V > A_2$  et quand  $A_2$  est fini. Pour une portée intégrale infinie, peut être remplacé dans de nombreux cas par  $V^\alpha$  (avec  $\alpha \neq 1$ ) en relation (IV.11) ([Lantuejoul, 1991](#)).

La composition des modules d'élasticité dans le changement d'échelle ne sont pas d'additif, en général, la relation (III.11) ne peut pas être appliquée. Au lieu de cela, nous proposons, comme, pour tester la loi de puissance selon la relation ([Caillaud et al., 2003](#)):

$$D_Z^2(V) = D_Z^2 \left( \frac{A_2}{V} \right)^\alpha \quad (\text{III.13})$$

Une relation similaire a été proposée et testée par ([Cailletaud et al., 1994](#) ; [Kanit et al., 2003](#)). Dans le cas d'un matériau à deux phases avec la propriété élastique  $Z_1$  pour la phase 1 et  $Z_2$  pour la phase 2, le point de variance  $D_Z^2$  de la variable aléatoire  $Z$  est donnée par:

$$D_Z^2 = P(1 - P)(Z_1 - Z_2)^2 \quad (\text{III.14})$$

avec:

- $P$  et  $(1 - P)$  sont la fraction volumique des inclusions et la matrice respectivement
- $Z_1$  et  $Z_2$  sont les propriétés élastiques ( $k$  ou  $\mu$ ) pour l'inclusion et la matrice respectivement

La relation (10) devient:

$$D_Z^2(V) = P(1 - P)(Z_1 - Z_2)^2 \cdot \frac{A_2}{V} \quad (\text{III.15})$$

### III.5.2 Les dispersions des propriétés élastiques

Les simulations numériques basées sur la méthode des éléments finis sont effectués pour les deux conditions aux limites: les conditions aux limites uniformes cinématiques (*KUBC*) et les conditions aux limites périodiques (*PBC*). La fraction volumique de la phase d'inclusions est ( $P = 0.10$  ;  $P = 0.30$  ;  $P = 0.50$ ) et le nombre de réalisations pour chaque volume est une seule réalisation.

On peut noter que la valeur moyenne donnée par les conditions aux limites périodiques varie légèrement en fonction de la taille du domaine par rapport aux d'autres conditions aux limites. Les figures III.10, III.11 et III.12 donnent les intervalles de confiance correspondants  $[\bar{Z} - 2D_Z, \bar{Z} + 2D_Z]$ , où  $Z$  est l'un des modules apparents,  $\bar{Z}$  sa valeur moyenne et  $D_Z^2(V)$  sa variance. Ces courbes de convergence des propriétés effectives  $k$  et  $\mu$  pour les cas des conditions aux limites périodiques avec le modèle Auto-cohérent *SCM*.

Les valeurs moyennes obtenues dépendent généralement de la taille du volume, et aussi du type de conditions aux limites. Pour chaque module, les valeurs convergent vers la même limite pour les grands volumes  $V$  ( $V$  est le nombre d'inclusions), qui représente le module effectif voulu. Les valeurs  $k^{\text{eff}}$ ,  $\mu^{\text{eff}}$  trouvées pour les grandes tailles de volume sont rapportées dans le Tableau. III.3 et par rapport aux limites de Voigt-Reuss (borne supérieure et inférieure), limites de Hashin-Shtrikman (*HS+* et *HS-*) et estimation de Auto-cohérent (*SCM*) ([Christensen, 1979a](#)).

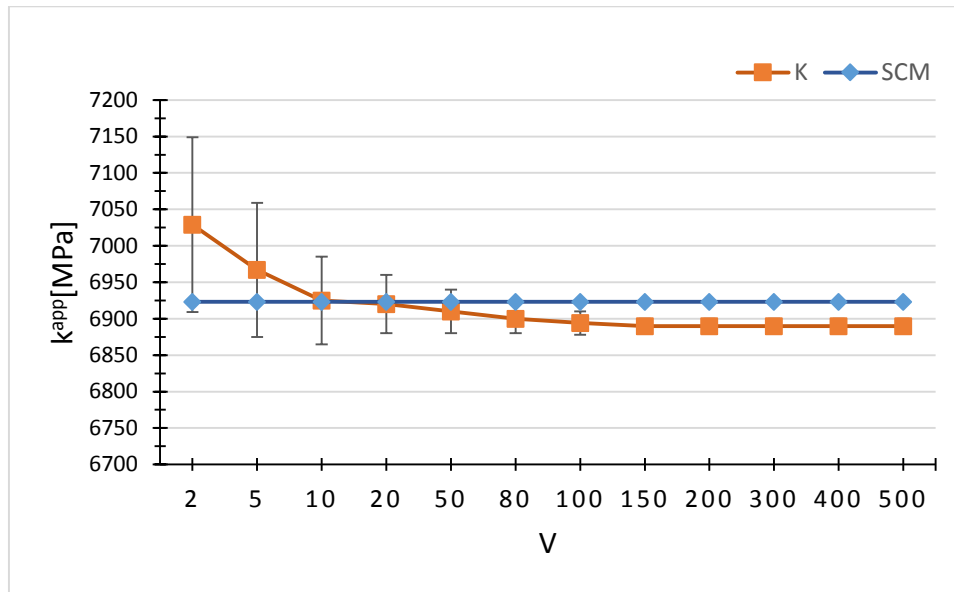
|               | <i>Simulation</i> | <i>Voigt</i> | <i>Reuss</i> | <i>HS+</i> | <i>HS-</i> | <i>SCM</i> |
|---------------|-------------------|--------------|--------------|------------|------------|------------|
| $k(P=0.10)$   | 2822              | 8653         | 0.0          | 7287       | 0.0        | 7287       |
| $\mu(P=0.10)$ | 2917              | 3461         | 0.0          | 3221       | 0.0        | 3221       |
| $k(P=0.30)$   | 3725              | 6730         | 0.0          | 4307       | 0.0        | 4307       |
| $\mu(P=0.30)$ | 1633              | 2692         | 0.0          | 2223       | 0.0        | 2223       |
| $k(P=0.50)$   | 2822              | 8653         | 0.0          | 2481       | 0.0        | 2481       |
| $\mu(P=0.50)$ | 526               | 1923         | 0.0          | 1401       | 0.0        | 1401       |

Tableau III.3. Les valeurs de résultats numériques, Bornes *VR*, Bornes *HS* et *SCM* pour des propriétés élastiques effectives d'un matériau poreux hétérogène à deux phases.

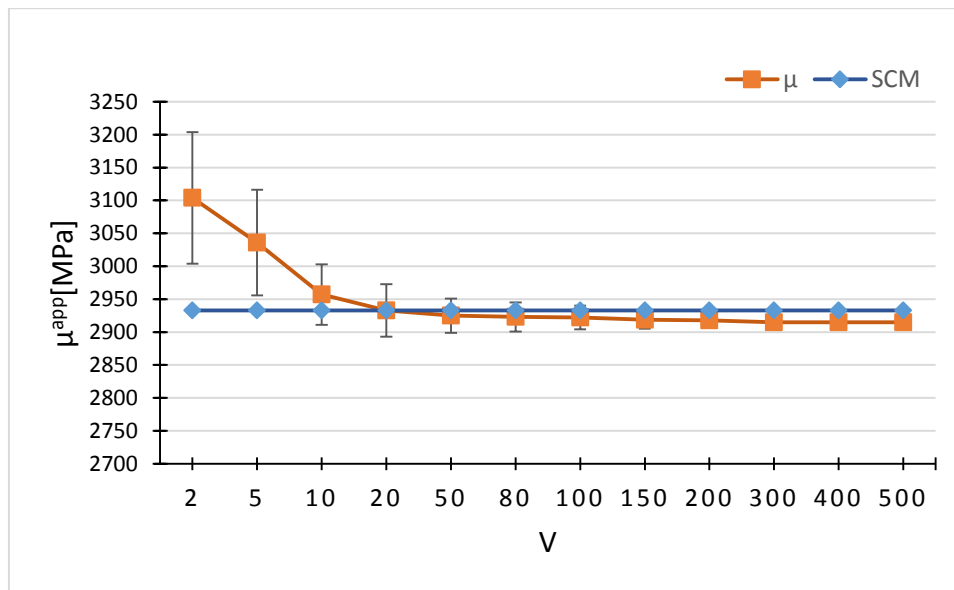
Les figures III.10, III.11 et III.12 donnent les valeurs moyennes et les dispersions obtenues pour les deux modules de compressibilité  $K^{app}$  et de cisaillement  $\mu^{app}$  en fonction de la taille du volume  $N$  (nombre de particules). Nous observons ainsi que la dispersion des résultats décroît quand la taille du volume augmente. La méthode précédente est reprise pour estimer la taille du *VER* pour les deux modules de compressibilité  $K$  et de cisaillement  $\mu$ . Il vient  $k_{10\%}^{VER} = 20$ ,  $k_{30\%}^{VER} = 100$ , et  $k_{50\%}^{VER} = 200$  correspondant à  $\epsilon_{rel} = 1\%$ . Il est notable aussi sur les figures III.10, III.11 et III.12 que les deux modules de compressibilité apparent  $K^{app}$  et de cisaillement  $\mu^{app}$  convergent vers une valeur asymptotique lorsque la taille du volume  $V$  ( $V = N$ ) augmente ; cette valeur coïncide avec le module de compressibilité effectif  $K^{eff}$  où le module de cisaillement effectif  $\mu^{eff}$  recherchés. Les valeurs de  $K^{eff}$  et  $\mu^{app}$  pour les trois fractions volumiques sont reportées dans le tableau III.3 et comparée avec les bornes de Voigt, Reuss, Hashin-Shtrikman *HSM* ([Hashin and Shtrikman, 1963](#)) et l'estimation Self-Consistent *SCM* (Auto-Cohérent).

Il est important de noter que cette étude de *VER* a été réalisée seulement pour des conditions aux limites périodiques. En effet, comme illustré dans ([Kanit et al., 2003](#) ; [Lachihab and Sab, 2005](#) ; [Kanit et al., 2006](#) ; [El moumen et al., 2014](#)), les valeurs moyennes des deux propriétés étudiées (module de compressibilité et module de cisaillement) dépends du volume mais aussi des conditions aux limites ; les conditions aux limites périodiques sont moins sensibles à la taille du volume  $V$  que les autres. Il aurait aussi été intéressant de pouvoir observer la convergence des deux modules de compressibilité et cisaillement apparents vers une valeur asymptotique coïncidant avec la valeur effective cherché en fonction des conditions aux limites.





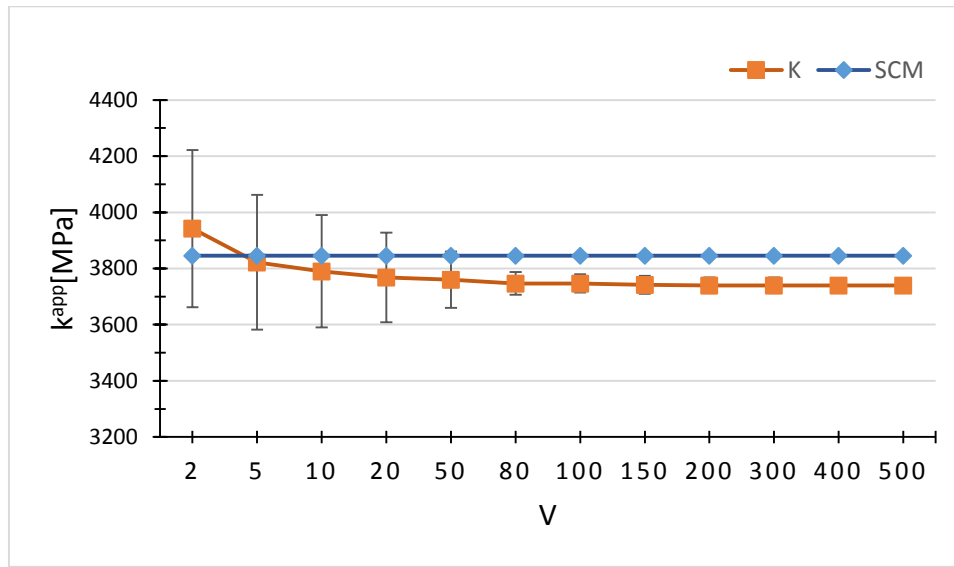
a)



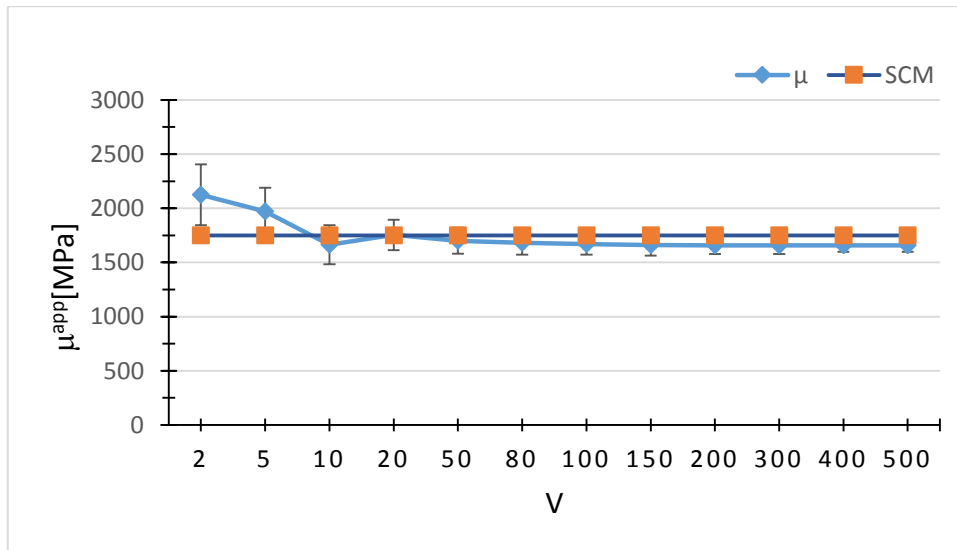
b)

Figure III-11 Courbes de convergence des propriétés élastiques apparentes en fonction de la taille du domaine  $V$  avec des conditions aux limites  $PBC$  pour  $P = 0,10$  :

a) évolution de  $k^{app}$ , b) évolution de  $\mu^{app}$ .

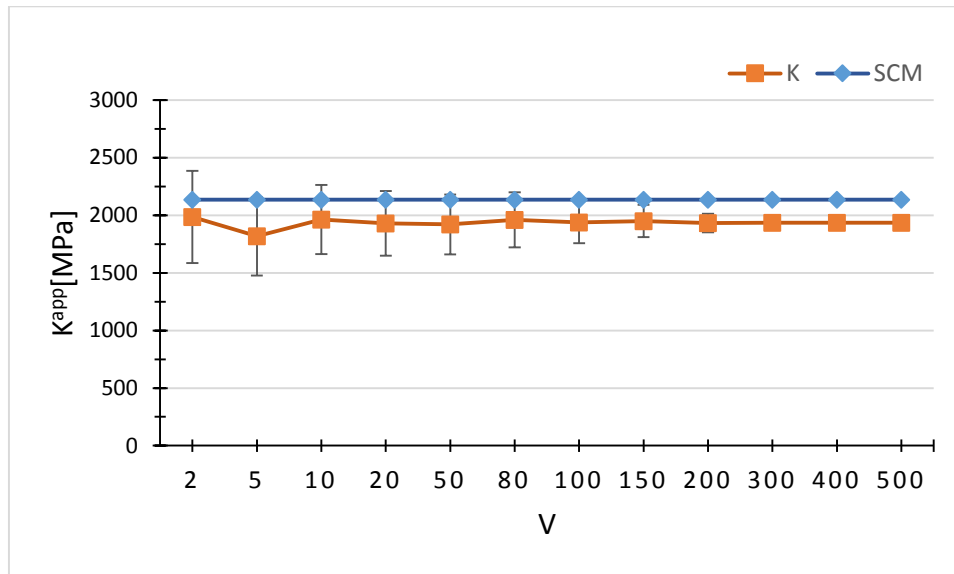


a)

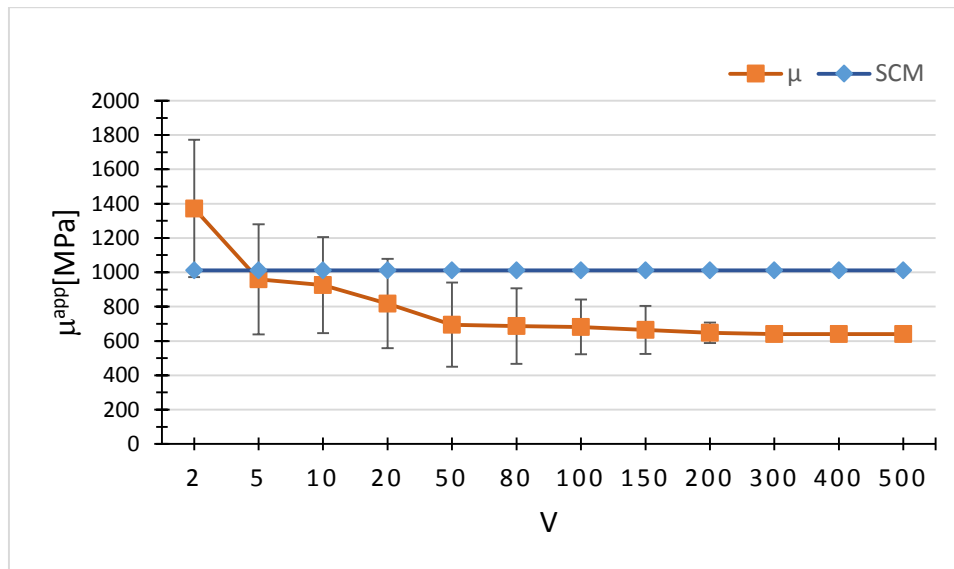


b)

Figure III-12 Courbes de convergence des propriétés élastiques apparentes en fonction de la taille du domaine  $V$  avec des conditions aux limites  $PBC$  pour ( $P = 0,30$  :  
a) évolution de  $k^{app}$ , b) évolution de  $\mu^{app}$ .



a)



b)

Figure III-13 Courbes de convergence des propriétés élastiques apparentes en fonction de la taille du domaine  $V$  avec des conditions aux limites  $PBC$  pour  $P = 0,50$  :

a) évolution de  $k^{app}$ , b) évolution de  $\mu^{app}$ .

Les champs des contraintes  $\sigma_{11}$ ,  $\sigma_{22}$  et  $\sigma_{12}$  sont présentés pour ces trois fraction (Figures III.13, III.14 et III.15). Ces résultats montre les cas pour contraintes planes  $\sigma_{11}$ ,  $\sigma_{22}$ , et les cas de cisaillement  $\sigma_{12}$ .

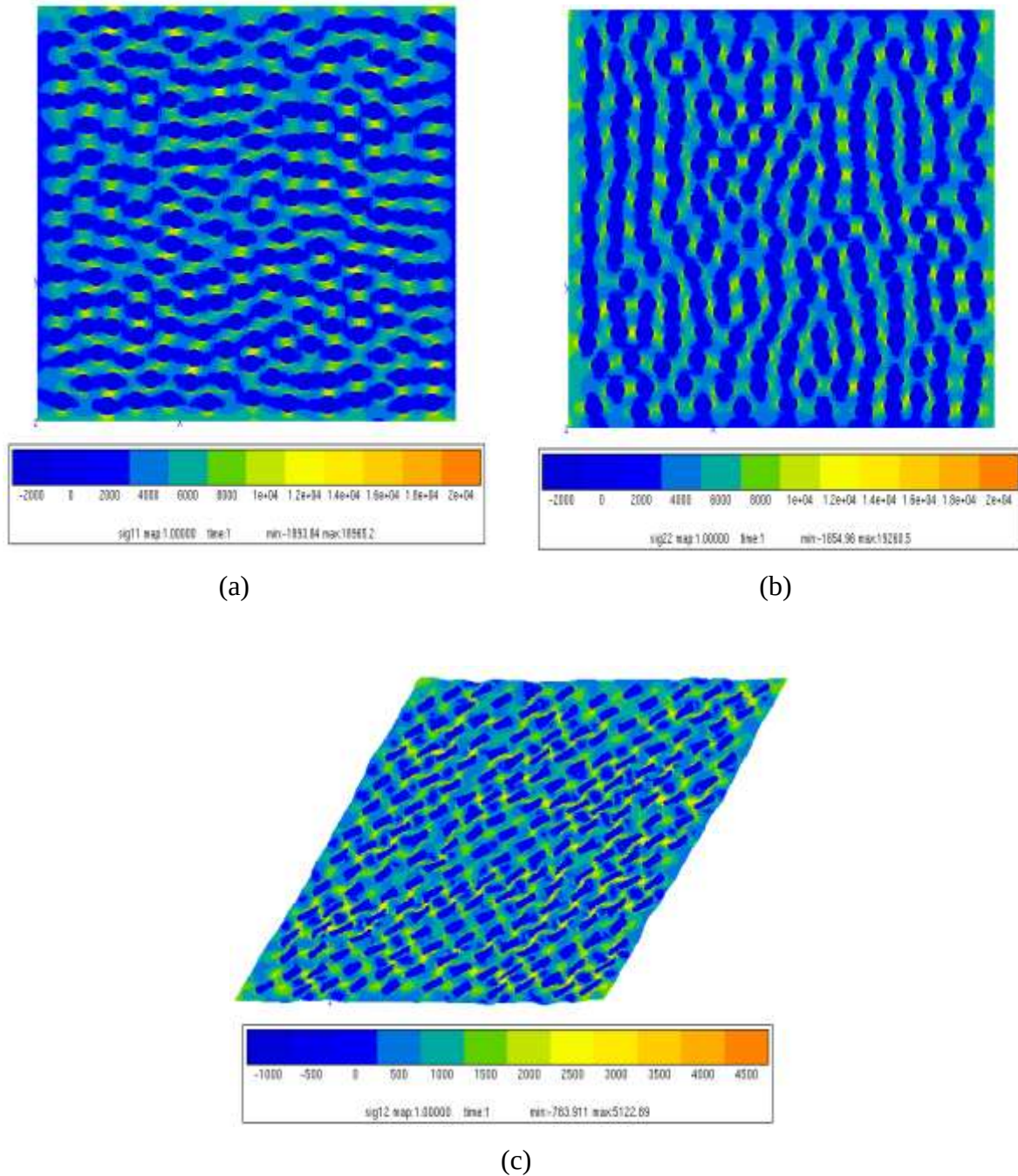


Figure III-14 Cartographie des contraintes effectives pour une cellule à 200 cercles et de fraction 10%, a) contrainte  $\sigma_{11}$ , b) contrainte  $\sigma_{22}$ , c) contrainte  $\sigma_{12}$

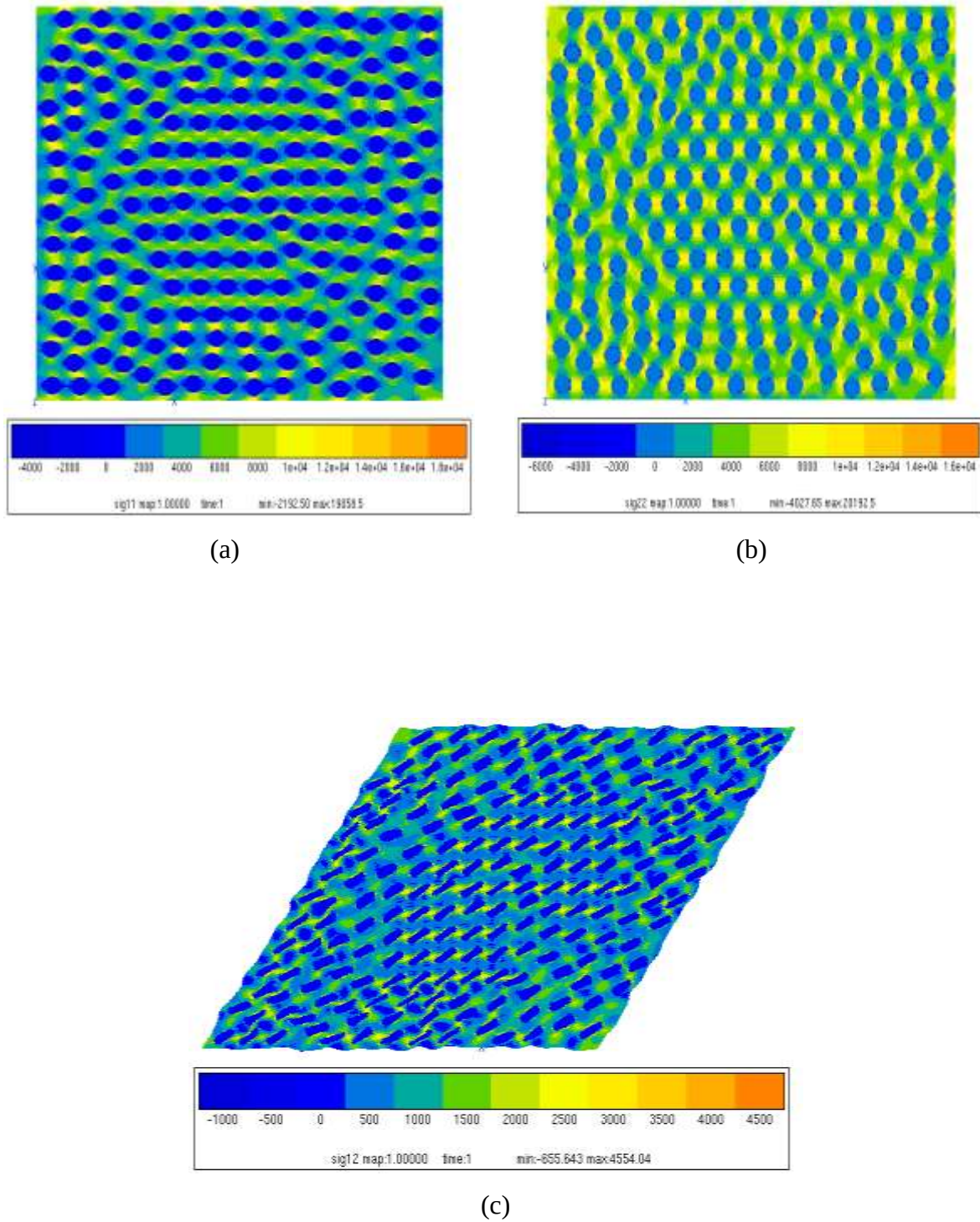


Figure III-15 Cartographie des contraintes effectives pour une cellule à 200 cercles et de fraction 30%, a) contrainte  $\sigma_{11}$ , b) contrainte  $\sigma_{22}$ , c) contrainte  $\sigma_{12}$



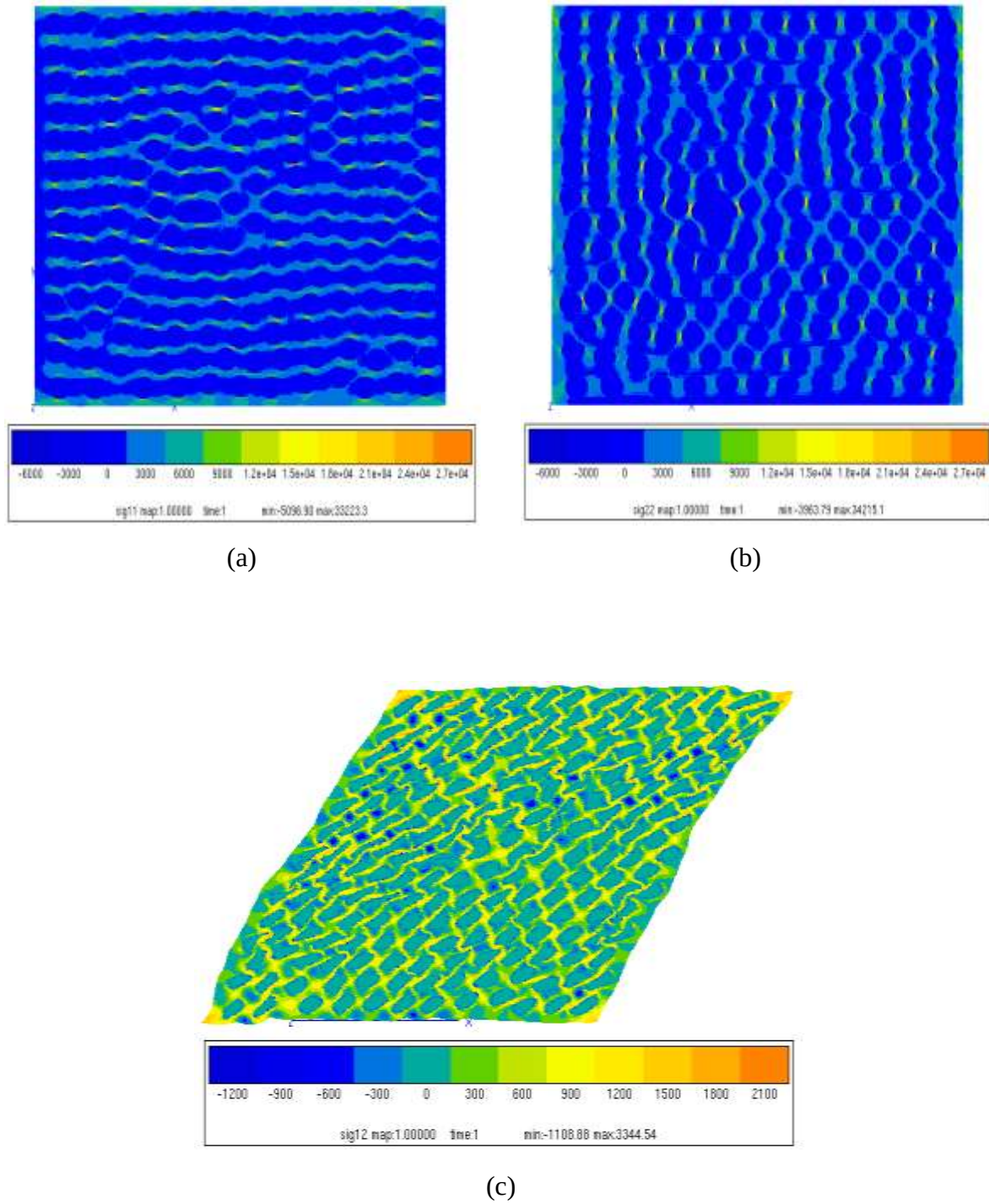


Figure III-16 Cartographie des contraintes effectives pour une cellule à 200 cercles et de fraction 50%, a) contrainte  $\sigma_{11}$ , b) contrainte  $\sigma_{22}$ , c) contrainte  $\sigma_{12}$

### III.6 Détermination du volume élémentaire représentative VER

La taille d'un *VER* par rapport à une propriété estimée  $Z$  peut être directement reliée à la précision de la valeur moyenne résultant de différentes réalisations pour chaque volume  $V$  ( $V = N$ ). Ainsi, théoriquement, si le volume  $V$  est un *VER* pour la propriété  $Z$ , la dispersion doit être nulle. En pratique, la taille d'un *VER* est déterminée pour une erreur donnée. Nous pouvons définir l'erreur relative  $\epsilon_{rel}$  telle que :

$$\epsilon_{rel} = \frac{2D_k\sqrt{A_2}}{Z^{eff}.\sqrt{V}}$$

à partir de l'intervalle de confiance pour  $n = 1$  réalisation permettant d'estimer la propriété moyenne  $Z$  avec une erreur relative par exemple inférieure à 1%. Cette méthode est appliquée à la fraction volumique : nous obtenons ainsi  $k_{10\%}^{VER} = 2822$ , pour une fraction volumique de 10 % correspondant à  $\epsilon_{rel} = 1\%$ . Pour une fraction volumique de 30%,  $k_{30\%}^{VER} = 3725$ ; et pour la fraction volumique de 50%,  $k_{50\%}^{VER} = 2822$ , comme on montre dans le tableau III. Notons que quelle que soit l'erreur relative étudiée, les volumes trouvés pour une fraction volumique de 10 % sont plus petits que ceux pour 30% et 50%. Les résultats pour l'évaluation des propriétés effectives sont obtenus on utilise un "fittage" sur les points obtenus par simulation numérique a été réalisé on utilisant la méthode du fittage des deux équations :

$$k^{eff} = \frac{2D_k\sqrt{A_2}}{\epsilon_{rel}.\sqrt{V}} \quad (III.16)$$

ou  $D_z$  est la variation du module  $k$  :  $D_z = D_k$  et ;

$$\mu^{eff} = \frac{2D_\mu\sqrt{A_2}}{\epsilon_{rel}.\sqrt{V}} \quad (III.17)$$

où  $D_z$  est la variance du module  $\mu$  :  $D_z = D_\mu$ . Les résultats numériques de simulation de propriétés physiques correspondent au modèle mathématique (III.16) et (III.17) donne le Tableau précédent.

La taille du *VER* peut être maintenant définie comme étant le volume pour lequel, par exemple,  $n = 1$  réalisation est nécessaire pour estimer la propriété moyenne  $Z$  avec une erreur relative d'un  $\epsilon = 1\%$ , à condition que nous maintenant la fonction  $D_z(V)$  :

$$k^{eff} = \frac{2D_k\sqrt{A_2}}{0.1\sqrt{V}} \quad \text{et} \quad \mu^{eff} = \frac{2D_\mu\sqrt{A_2}}{0.1\sqrt{V}}$$

Le tableau III. Présente les valeurs des portées intégrales  $A_2$  pour les trois fractions volumiques et pour les deux propriétés étudiées présenté et ce après fittage.

| <b>La portée intégrale</b> | <b><math>A(k)</math></b> | <b><math>A(\mu)</math></b> |
|----------------------------|--------------------------|----------------------------|
| <b>Fraction volumique</b>  |                          |                            |
| <b><math>P=0.10</math></b> | 0.0039                   | 0.0045                     |
| <b><math>P=0.30</math></b> | 0.0017                   | 0.0021                     |
| <b><math>P=0.50</math></b> | 0.00027                  | 0.00018                    |

Tableau III.4. Portée intégrale pour les modules  $k$  et  $\mu$  dans le cas des trois fractions utilisées.

Les résultats trouvés pour chaque fraction sont plus proches pour les deux propriétés. Donc, la portée intégrale  $A_2$  ne dépend que de la fraction volumique de l'inclusion. Nous avons vu dans toutes les cas étudiés que les autres paramètres n'ont aucune influence sur la portée intégrale. Donc la portée intégrale  $A_2$  peut être exprimée en utilisant la relation proposée:

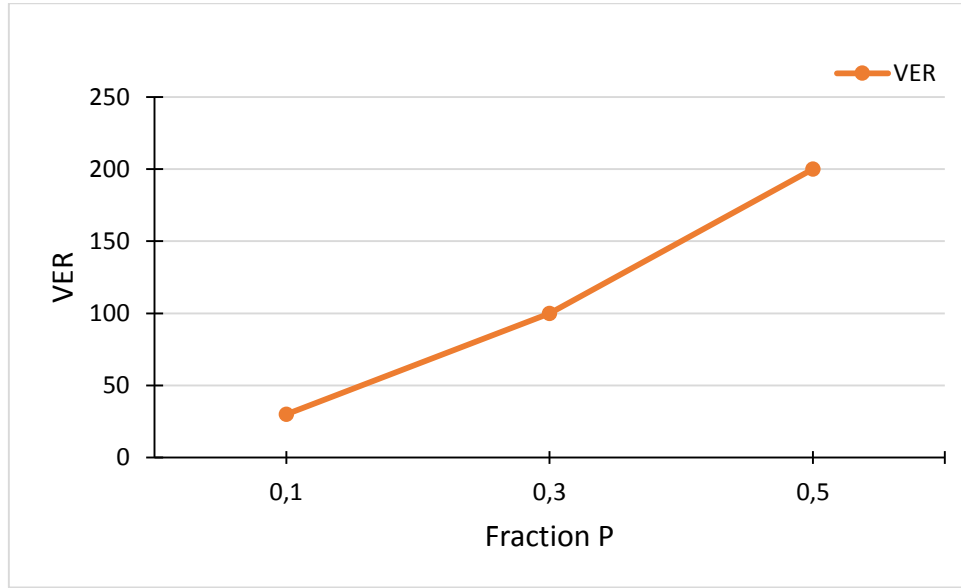
$$A_2 = \frac{P}{VER} \quad (\text{III.18})$$

Pour les trois cas de fraction volumique traités, nous avons:

- $P=0.10$ , implique que le  $VER = 20$  inclusions
- $P=0.30$ , implique que le  $VER = 100$  inclusions
- $P=0.50$ , implique que le  $VER = 200$  inclusions

La figure III.16 résume l'évolution de volume élémentaire représentatif  $VER$  avec les fractions volumiques de l'inclusion.




 Figure III-17 Evolution de  $VER$  en fonction de la fraction volumique

Les propriétés apparentes et la portée intégrale  $A_2$  obtenues dépendent donc de la fraction volumique des phases et du volume élémentaire représentatif ( $VER$ ). Dans cette section, nous revenons à la variance  $D_Z^2$  du cas du matériau élastique à deux phases, et l'équation (III.15), en deux dimensions, devient :

$$D_Z^2 = P(1 - P)(k_1 - k_2)^2 \frac{A_2}{VER}$$

En remplaçant  $A_2$  par  $P/VER$ , on aura :

$$D_Z^2 = P(1 - P)(k_1 - k_2)^2 \frac{P}{VER^2}$$

Pour les propriétés effectives  $k$  et  $\mu$  étudiés, on aura :

$$D_k^2 = P(1 - P)(k_1 - k_2)^2 \frac{P}{VER^2} \quad (\text{III.19})$$

et :

$$D_\mu^2 = P(1 - P)(\mu_1 - \mu_2)^2 \frac{P}{VER^2} \quad (\text{III.20})$$

Sachant que pour le contraste  $c = k_2 / k_1 \Rightarrow k_2 = c.k_1$  ( $k_1$ : matrice et  $k_2$  : inclusion)

Par exemple :

Si  $k_1 = 1$ , l'équation (III.15) implique que :

$$D_k^2 = P.k_1^2(1 - P)(1 - c)^2 \frac{P}{VER^2} \quad (\text{III.21})$$

Pour que le modèle converge, il est nécessaire que la variance  $D_k^2$  prend la valeur minimale (c.à.d :  $D_k^2 = 1$ ), cela implique :

$$1 = P \cdot k_1^2 (1 - P)(1 - c)^2 \frac{P}{RVE^2}$$

alors :

$$RVE = P \cdot |1 - c| \sqrt{1 - P} \quad (\text{III.22})$$

On obtiendra donc une relation entre le contraste et le VER ( $RVE = f(c)$ )

Cette relation (III.22) est équivalente à:

$$y = f(c) = P |1 - c| \sqrt{1 - P} \quad (\text{III.23})$$

pour les trois cas de contraste étudiés, c.à.d:

- $c < 1$  : implique que la matrice est plus rigide que l'inclusion
- $c = 1$  : implique que la matrice est plus rigide que l'inclusion
- $c > 1$  : implique que l'inclusion est plus rigide que la matrice

alors et pour  $P=0.3$  la courbe  $y = f(c)$  est représentée ci dessous

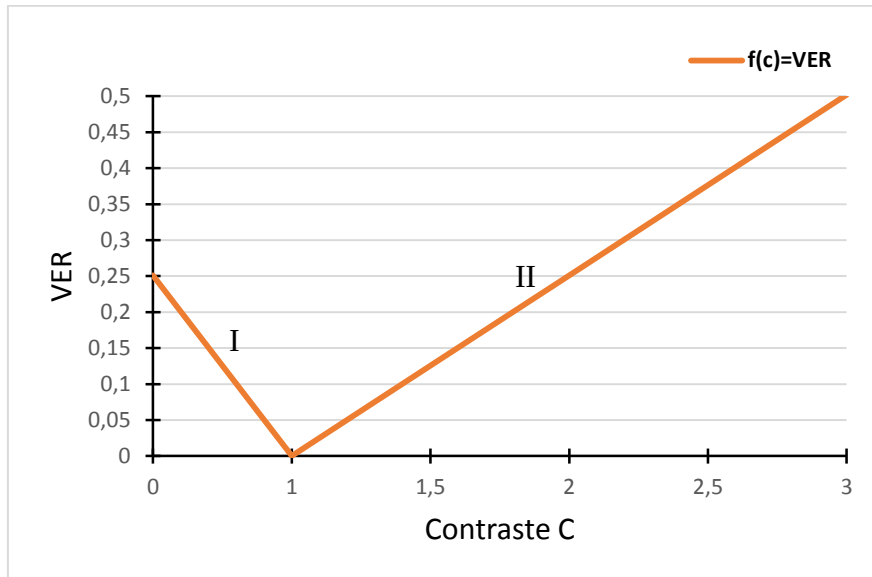


Figure III-18 Relation entre le VER et le contraste

La figure III.18 montre la variation du contraste en fonction du VER, on peut déduire de cette courbe les remarques suivantes :

- lorsque  $c = 0$ , le  $VER$  est égale à la valeur  $P \cdot \sqrt{1 - P} \cdot k_1$  ou le  $VER$  dépend de la fraction volumique et la propriété  $k_1$  de la matrice;
- quand  $c = 1$ , le  $VER = 0$ , cela signifie que les propriétés des deux phases sont égales,  $k_2 = k_1$ ;
- Lorsque le  $VER \in I$ , cela implique que:  $k_2 < k_1$ , lorsque le contraste:  $0 < c < 1$  et  $VER_{mp} < VER < 1$  ( $VER_{mp}$  est le  $VER$  pour les milieux poreux), la matrice est la plus compressible que l'inclusion;
- Lorsque le  $VER \in II$ , implique que  $k_1 < k_2$ , lorsque le contraste  $c > 1$ , le matériau de l'inclusion est plus compressible que la matrice.

### III.7 Conclusion

Les propriétés linéaires effectives des composites à structures aléatoires pour le cas 2D peuvent être déterminées, non seulement par des simulations numériques sur de grands volumes mais aussi par les valeurs moyennes des propriétés apparentes de petits volumes. Cette approche statistique et numérique a été proposée par ([Kanit et al., 2003](#)) et on la utilisée pour l'évaluation de la taille du  $VER$  et les propriétés élastiques effectives des différentes microstructures aléatoires étudiées.

Les résultats numériques obtenus pour les calculs des microstructures 2D à 2 phases ont permis la détermination de  $VER$  et ses propriétés effectives avec les deux conditions aux limites (KUBC) et (PBC) pour différentes réalisations. Ces résultats de simulation sont identifiés par les écarts moyens des courbes de convergences des propriétés apparentes  $k$  et  $\mu$  de chaque réalisation. La quantité de portée intégrale donne un sens dans le cas des approches pour la détermination du  $VER$ , cette quantité à une relation entre le  $VER$  et la morphologie, et permet l'étude de l'effet de la morphologie des inclusions sur le comportement élastique des microstructures aléatoires.

Les résultats numériques obtenus pour des différentes réalisations en utilisant les deux conditions aux limites (KUBC) et (PBC) sur différentes réalisations, ont permis la détermination des fluctuations des propriétés élastiques apparentes. Les courbes des moyennes des fluctuations ont conduit à la détermination des différentes tailles des  $VER$  et des propriétés

effectives pour les différentes formes et les différentes fractions volumiques. Etant donné que la portée intégrale est le seul paramètre, dans cette approche statistique, lié à la morphologie des inclusions, son évaluation s'avère l'une des clés permettant l'étude de l'effet de la morphologie des inclusions sur le comportement élastique des microstructures aléatoires. La portée intégrale est un paramètre purement morphologique égal au volume d'une inclusion dans le *VER* déterministe.

## ***Chapitre IV.***

# **Comportement équivalent d'un matériau à structure complexe en 3D**

## **IV. Comportement équivalent d'un matériau à structure complexe en 3D**

Cette partie est une étude comparative du comportement de deux microstructures biphasées à morphologies aléatoires. L'une chargée de particules sous forme sphériques, et l'autre de forme plus complexes et ceci en 3D.

## IV.1 Introduction

Les matériaux hétérogènes sont constitués d'un mélange entre la phase d'inclusions et la matrice. Comme résultat d'un mélange non uniforme, lors de la dispersion des inclusions dans la matrice, nous obtenons des microstructures de forme complexe. C'est le cas, par exemple, des microstructures de béton, des mosaïques de Voronoï et du cas des microstructures de matériaux composites à agrégats. Plusieurs techniques d'homogénéisation numérique, basées sur la notion de volume élémentaire représentatif (VER), sont utilisées pour estimer les propriétés élastiques linéaires effectives de microstructures tridimensionnelles (3D).

Dans la littérature, pour décrire le comportement élastique des composites, de nombreux modèles existent ([Kari, 2007](#) ; [Kanit et al., 2003](#)). La prédiction des propriétés élastiques effectives des matériaux hétérogènes est basée sur la connaissance des relations entre la microstructure et la réponse macroscopique.

Ceci a été réalisé en utilisant des modèles micromécaniques qui ne considèrent que les propriétés de matrice et de renforcement et leurs fractions volumiques. La majorité des modèles analytiques et les bornes d'estimation ne tiennent pas compte de l'influence de la forme des particules sur les propriétés effectives. Cela ne peut être obtenu qu'en résolvant numériquement le problème mécanique pour un volume élémentaire représentatif (VER) du matériau. Plusieurs chercheurs ont utilisé la méthode des éléments finis (MEF) pour comprendre l'effet des fractions volumiques des particules sur le comportement mécanique des composites ([El Moumen., 2013a,b](#) ; [Khdir, 2013](#)).

Dans cette partie, l'effet de la forme de la phase sur les propriétés élastiques linéaires effectives et sur la taille VER est étudié en utilisant la méthode des éléments finis (MEF). Une technique d'homogénéisation numérique, basée sur des simulations par éléments finis, a été utilisée en appliquant des conditions aux limites périodiques (PBC). On considère deux matériaux différents, l'un avec des formes complexes pour la seconde phase et le second avec des particules sphériques noyées dans la matrice. Le concept de morphologie équivalente est proposé ici pour remplacer le matériau à deux phases de forme complexe par un composite biphasé simple composé d'inclusions sphériques intégrées dans la matrice.

## IV.2 Description et génération de la microstructure en 3D

L'évaluation des propriétés effectives d'une microstructure à structure complexe devient difficile à déterminer à cause de la morphologie complexe de la structure. Pour cela une comparaison entre deux microstructure différentes, la première est la microstructure complexe et la deuxième une microstructure qui contient les inclusions de forme sphériques. Ce travail est basé sur la méthode citée au chapitre précédent qui permet la détermination de volume élémentaire pour différentes réalisation de microstructure et le calcul de leurs propriétés effectives.

Pour le cas des deux structures, les modules de compressibilité ( $k_m$ ,  $k_i$ ) et de cisaillement ( $\mu_m$ ,  $\mu_i$ ) de la matrice et des inclusions d'un matériau biphasé à trois dimensions (3D) sont exprimés en fonction des modules d'Young  $E$  et du coefficient de Poisson  $\nu$  des deux phases par :

$$k_i = \frac{E_i}{3(1-2\nu_i)} \quad ; \quad \mu_i = \frac{E_i}{2(1+\nu_i)} \quad , \quad i = m, p$$

Les propriétés mécaniques : le module de Young  $E$ , le coefficient de poisson  $\nu$ , le module de compressibilité  $k$  et le module de cisaillement  $\mu$  des deux phases (matrice et inclusions) utilisées pour les deux microstructures sont représentées dans le tableau IV.1

|         | $E$ [MPa] | $\nu$ [MPa] | $K$   | $\mu$ |
|---------|-----------|-------------|-------|-------|
| Phase 1 | 100       | 0.3         | 83.33 | 38.46 |
| Phase 2 | 10        | 0.3         | 8.33  | 3.84  |

Tableau IV.1 Propriétés mécaniques des deux microstructures

| Matériau                      | Cas   | Fraction volumique (matrice/inclusions) |
|-------------------------------|-------|-----------------------------------------|
| Matériau a structure complexe | Cas 1 | $\phi=95\%$ , $\phi_1 = 05\%$           |
|                               | Cas 2 | $\phi=90\%$ , $\phi_1 = 10\%$           |
|                               | Cas 3 | $\phi=80\%$ , $\phi_1 = 20\%$           |
|                               | Cas 4 | $\phi=70\%$ , $\phi_1 = 30\%$           |

Tableau IV.2 Fractions des phases dans le cas du matériau a structure complexe



### IV.3 Génération des deux microstructures

Dans le but de faire une comparaison entre ces deux microstructures, ou l'une est de type complexe (que l'on suppose réelle), et l'autre une microstructure à particules sphériques distribués aléatoirement, Nous allons prendre quatre fractions volumiques, ce qui nécessite de générer plusieurs microstructures des deux cas en plus du grand nombre de réalisation pour chaque fraction volumique.

#### IV.3.1 Génération d'une microstructure réelle

La méthode utilisée pour la génération des images virtuelles équivalentes à une microstructure réelle est divisé en trois étapes (Figure IV.1). La 1<sup>er</sup> étape consiste à créer une microstructure virtuelle en 3D, dont on applique la technique des *Nœuds* (Nodes) (Figure IV.1.a) utilisée dans les outils graphismes en 3D comme 3D Studio Max, Maya,...etc.

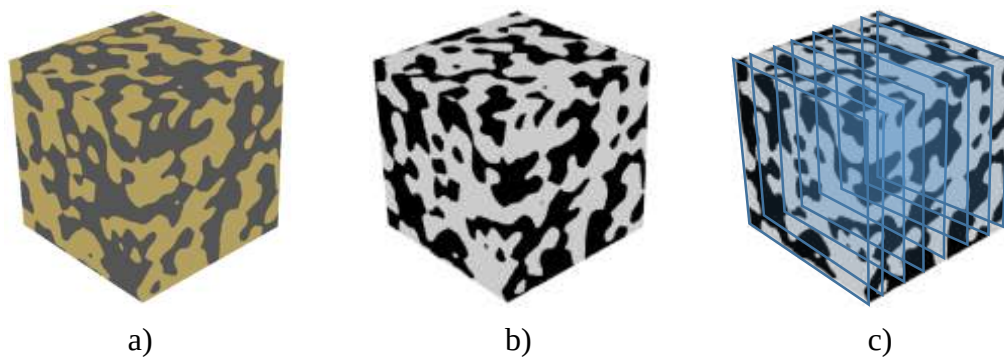


Figure IV-1 . Procédé d'obtention des images successives à partir d'une microstructure réelle, a) Microstructure réelle, b) segmentation de la microstructure, c) coupe transversale

La deuxième étape, est la digitalisation ou filtration de ces images en mode de grayscale (2 couleur noir et blanc) (Figure IV.1.b).

La dernière étape, consiste à générer des images successives à partir de cette microstructure, cette technique s'appelle technique des coupes transversales (Cross-section) (Figure IV.1.c).

### IV.3.2 Génération d'une microstructure à particules

La génération de la microstructure qui contient des particules sous forme de sphère est obtenue à l'aide d'un script *Python* (Figure. IV.2), les deux contraintes appliquées pour la distribution des sphères sont :

- Les sphères ne chevauchent pas entre elles (pas de percolation)
- Les sphères ne se collent pas avec les parois de la cellule (cube)

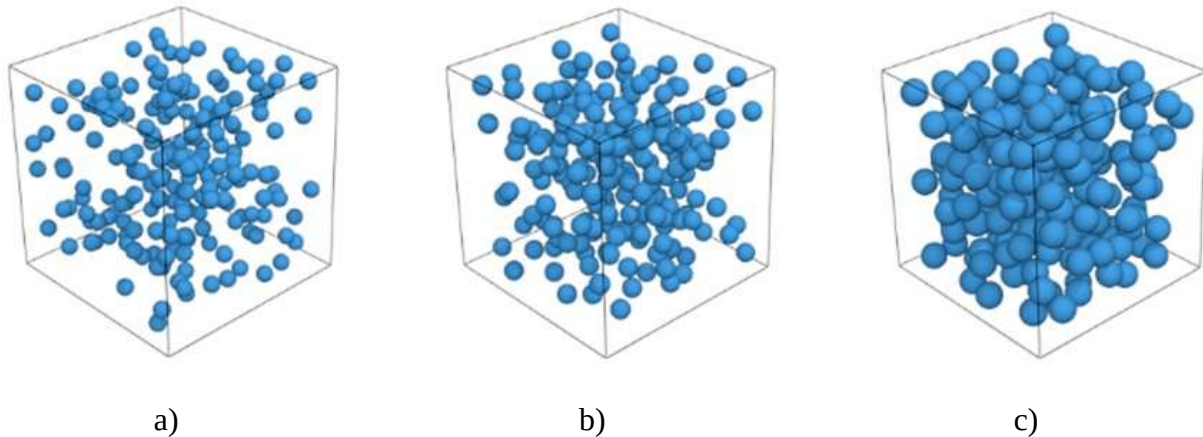


Figure IV-2 Exemples de microstructures de différentes fractions volumiques, a) 5%, b) 10%, c) 20%,

La technique de génération des microstructures contenant des sphères aléatoires a été utilisée par différents auteurs ([Moussaddy et al., 2013](#) ; [Pahlavan, M 2013](#) ; [Reine, 2014](#) ; [Ghossein E 2014](#)).

### IV.4 Méthode de calcul des propriétés élastiques

Les simulations sont effectuées en utilisant la méthode des éléments finis couplée à une méthode d'homogénéisation. L'algorithme de génération de matériel complexe est développé avec un code Python, voir figure IV-3. Pour simplifier les calculs, des simulations ont été effectuées pour un *VER*. L'algorithme génère des composites complexes 3D pour une fraction de volume spécifiée, dans une région cubique. Le processus de génération automatique ne s'arrêtera pas tant que la fraction volumique n'est pas satisfaite. La morphologie et la technique de la génération des microstructures 3D sont présentées dans cette section. Pour chaque microstructure étudiée, de nombreuses configurations avec différentes formes de la deuxième phase sont étudiées. Chaque microstructure contient une population de seconde phase, répartie aléatoirement dans une matrice continue. Différentes propriétés élastiques sont attribuées aux deux phases, afin de prédire les propriétés élastiques effectives des composites. Le tableau IV.1 représente les propriétés mécaniques de chaque phase utilisée pour les calculs numériques. Le

tableau IV.2 représente les cas de composite où  $\Phi_1$  est la fraction volumique de la seconde phase et  $\phi$  la fraction volumique de la matrice.

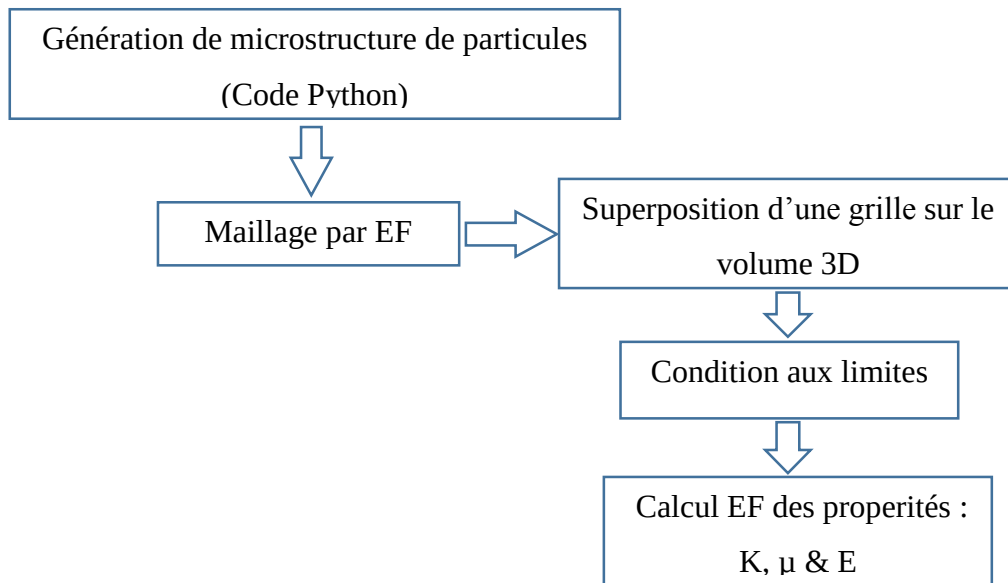


Figure IV-3 Processus de calcul numérique

#### IV.4.1 Génération de maillage et densité de maille

Les calculs par EF sur des volumes de différentes tailles extraites du volume entier  $V$  ont été effectués. Le principal avantage de cette stratégie est qu'elle nous permet de travailler sur un volume suffisamment important pour un faible coût de calcul. La figure IV-4 présente un exemple de VER de microstructure complexe et une subdivision de cette microstructure entière en images.

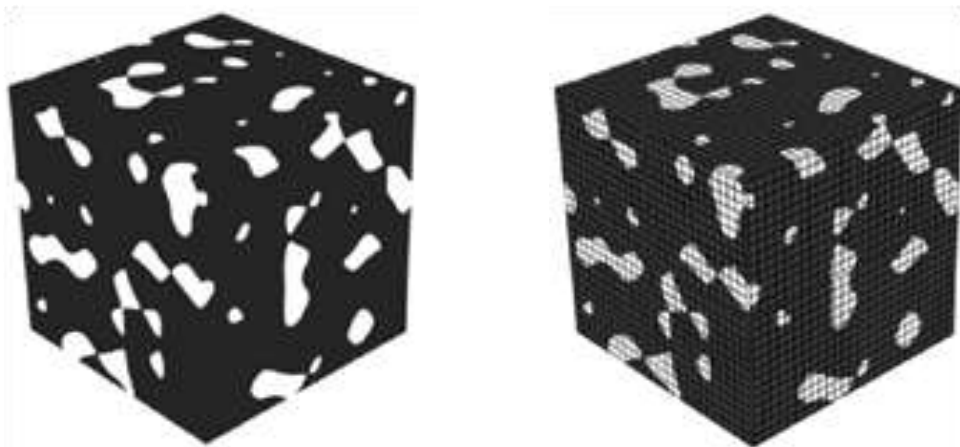


Figure IV-4 . Exemple de matériau a structure complexe à deux phases : a) structure complexe à 30%, b) maillage 3D

Un maillage d'éléments finis 3D réguliers est superposé sur la microstructure en utilisant la technique dite d'élément multi-phase. Cette technique a été développée dans ([Kanit et al., 2003](#)) et utilisée pour l'homogénéisation des matériaux virtuelles ou réelles par plusieurs auteurs comme ([Lippmann, 1997](#) ; [Forest , 2006](#) ; [El Moumen , 2013](#) ; [Fedoui, 2016](#)). A la suite de la convergence, une bonne densité de maillage des éléments quadratiques de 20 nœuds et 27 points d'intégration par *EF* a été adoptée dans toute cette étude pour toutes les simulations.

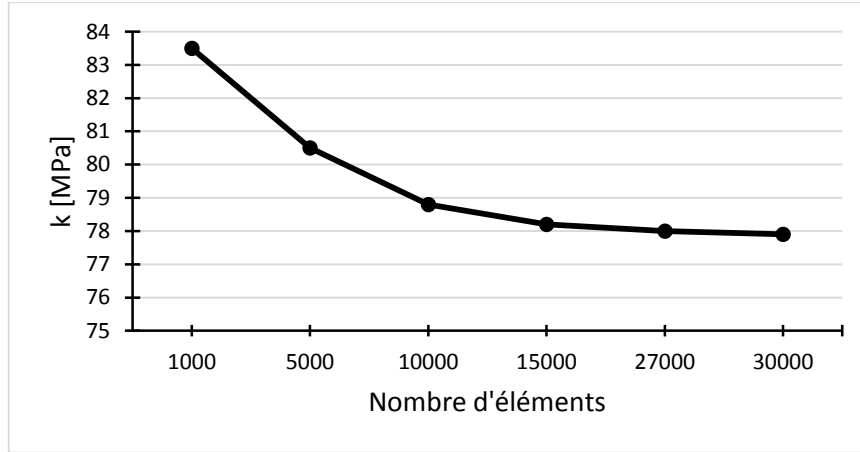


Figure IV-5 Evaluation du module de compression k en fonction du nombre d'éléments

#### IV.4.2 Conditions aux limites

La théorie d'homogénéisation est utilisée pour la détermination numérique des propriétés d'élasticité linéaire effectives. Un élément de volume d'un matériau hétérogène est considéré. Des conditions sont prescrites à sa limite afin d'estimer les propriétés globales. Les conditions aux limites périodiques doivent être prescrites sur chaque élément de volume. Ces conditions aux limites ont été utilisées avec les valeurs prescrites du tenseur de déformation  $\underline{\underline{E}}$  sur l'élément de volume individuel. Ces conditions sont définies par un champ de déplacement sur le contour extérieur comme suit :

$$\underline{u} = \underline{\underline{E}} \cdot \underline{x} + \underline{v} \quad \forall \underline{x} \in \partial V \quad (\text{IV.1})$$

$\underline{v}$  est la fluctuation périodique, elle prend les mêmes valeurs à deux points homologues sur des faces opposées.  $\underline{\underline{E}}$  représente la déformation macroscopique et le vecteur de position. Pour les conditions de périodicités *PBC*, pour calculer les modules de compressibilité et de cisaillement macroscopiques nous prenons :

$$\varepsilon_k = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \& \varepsilon_\mu = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{IV.2})$$

Où  $\varepsilon_k$  et  $\varepsilon_\mu$  sont les tenseurs de déformation macroscopiques utilisés pour calculer respectivement  $k^{app}$  et  $\mu^{app}$ .

On définit les modules apparents "module de compressibilité  $k^{app}$  et module de cisaillement  $\mu^{app}$ " :

$$k^{app} = \langle \sigma \rangle : \varepsilon_k = \frac{1}{3} trace \langle \sigma \rangle = \frac{1}{3} \langle \sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33} \rangle \quad (IV.3)$$

$$\mu^{app} = \langle \sigma \rangle : \varepsilon_\mu = \langle \sigma_{12} \rangle \quad (IV.4)$$

où  $\langle . \rangle$  est la valeur moyenne de  $\underline{x}$ ,

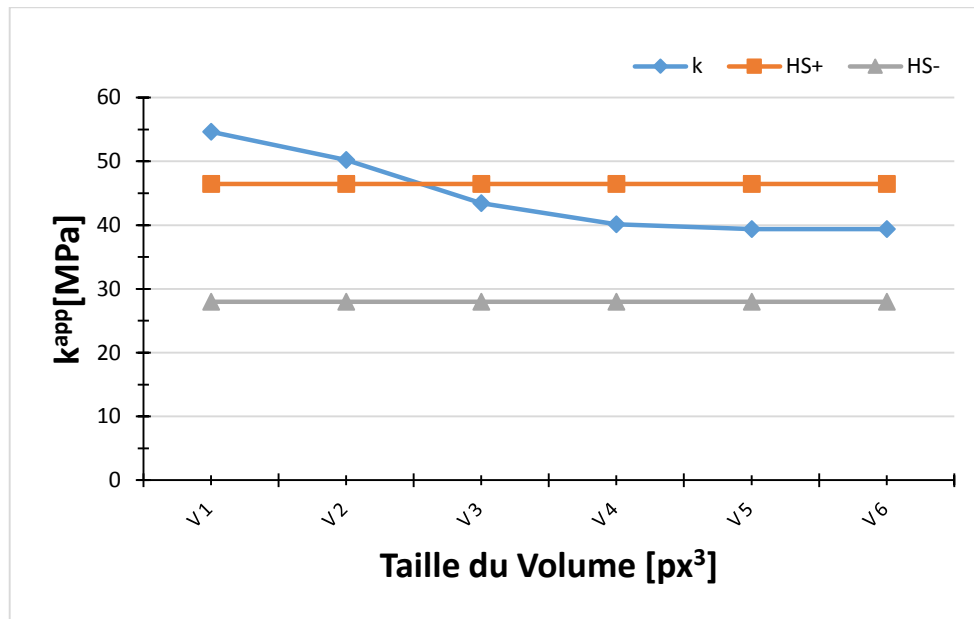
$\sigma_{11}$ ,  $\sigma_{22}$  et  $\sigma_{33}$  représentent les contraintes principales et  $\sigma_{12}$  la contrainte de cisaillement.

## IV.5 Résultats et discussion

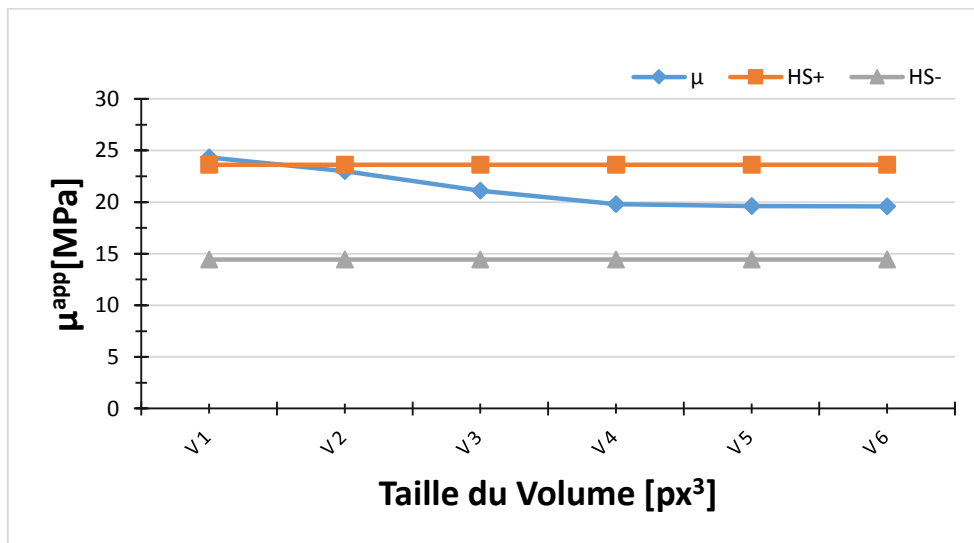
Dans cette partie, et pour la détermination du module de compressibilité et du module de cisaillement des matériaux hétérogènes, on utilise ainsi la même technique numérique avec la notion du *VER* développée dans le chapitre III. Elle consiste à envisager différentes réalisations de microstructures aléatoires et complexes pour obtenir les propriétés effectives. Le *VER* est le volume qui permet d'estimer la propriété effective avec une seule réalisation.

La taille du *VER* et la propriété effective sont obtenues par variation de la taille du volume (tableau IV.3). D'après les résultats obtenus, il apparaît que la taille du *VER* dépend de la taille du matériau étudié.

La Figure IV-6 présente les variations du module effectif et du module de cisaillement en termes de fraction volumique pour le cas 1. Les résultats sont comparés aux bornes *HS*. La variation des propriétés élastiques effectives en termes de fraction volumique pour tous les cas de matériau complexe est rapportée à la figure IV-5. Pour les faibles fractions volumiques 5% et 10%, le *VER* est localisé pour une taille de petit volume comparée à l'autre fraction volumique 20 et 30%.

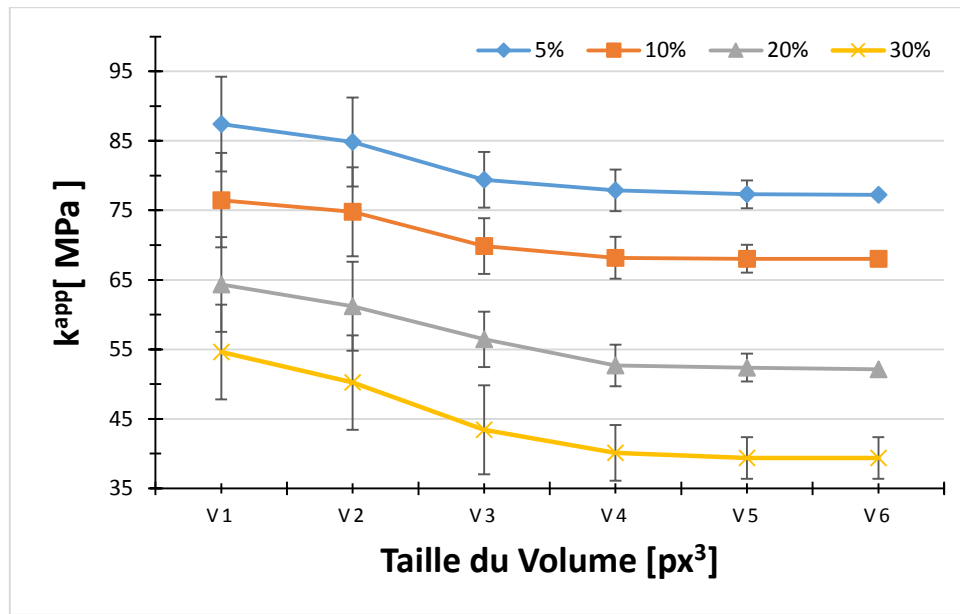


(a)

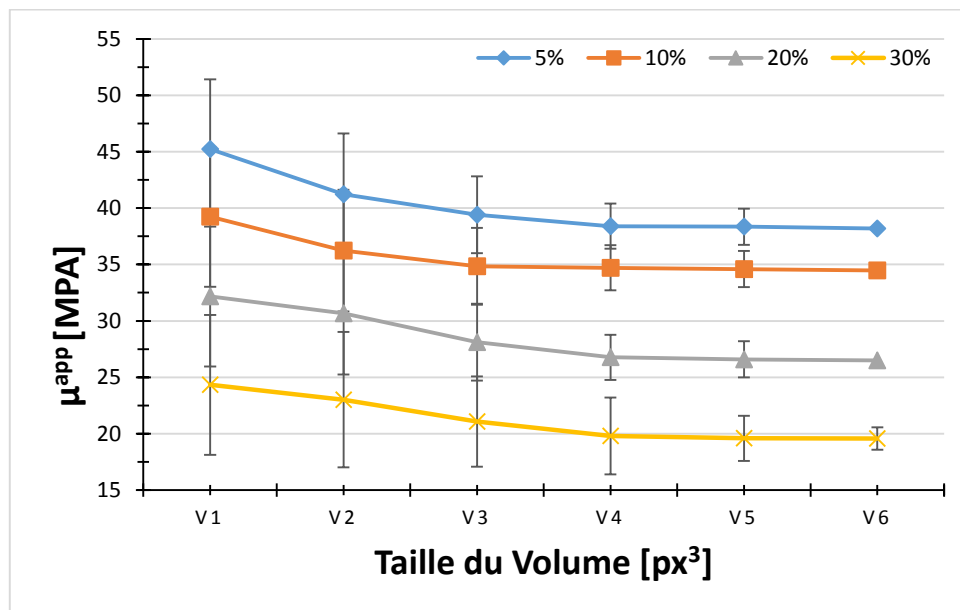


(b)

Figure IV-6 Variation des modules de compressibilité et cisaillement en fonction du volume, avec les limites HS en termes de taille de volume pour le cas 1 de matériau complexe. (a) Variation des modules de compression, (b) Variation des modules de cisaillement



(a)



(b)

Figure IV-7 Variation des modules de compressibilité et cisaillement en fonction du volume, en termes de taille de volume pour le cas de matériau complexe. (a) Variation des modules de compression, (b) Variation des modules de cisaillement

| Matériau             | Cas   | Taille VER [pixel <sup>3</sup> ] |
|----------------------|-------|----------------------------------|
| à structure complexe | Cas 1 | V3                               |
|                      | Cas 2 | V3                               |
|                      | Cas 3 | V4                               |
|                      | Cas 4 | V5                               |

Tableau IV.3 Taille VER à partir de calculs numériques.

Le tableau IV.3 montre la taille du *VER* pour tous les cas étudiés.

#### IV.6 Effet de la fraction volumique sur les propriétés élastiques effectives

Afin d'étudier l'effet de la fraction volumique de la seconde phase sur le module de compressibilité et le module de cisaillement, différentes fractions volumiques ont été prises. Le module de compressibilité et le module de cisaillement diminuent avec l'augmentation de la fraction volumique des inclusions et convergent vers la valeur de la taille du volume *VER*, voir la figure IV.12.

#### IV.7 Concept de la morphologie équivalente

Dans cette section, nous proposons de remplacer un matériau complexe à deux phases par un matériau biphasé simple. Le second matériau est constitué d'inclusions sphériques noyées dans la matrice (figure IV-8). Nous supposons que la fraction volumique est la même dans les deux configurations. La distribution des inclusions est aléatoire. Le script Python utilisé pour générer le matériau complexe est adopté pour générer le matériau avec des particules sphériques.

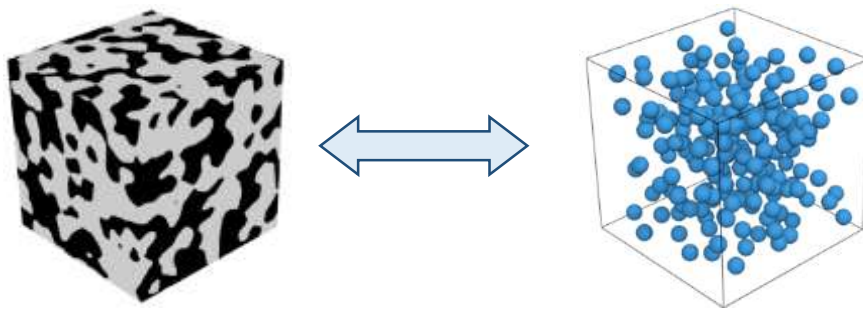
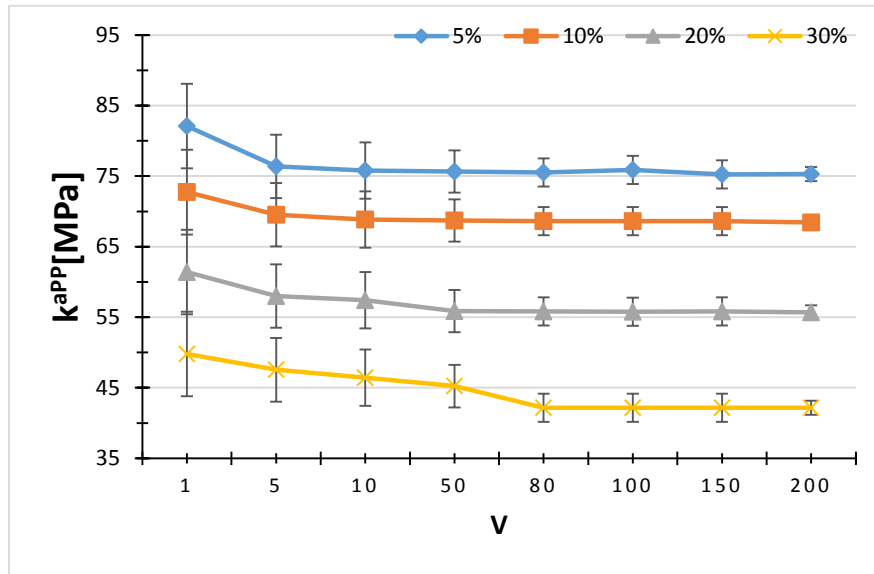


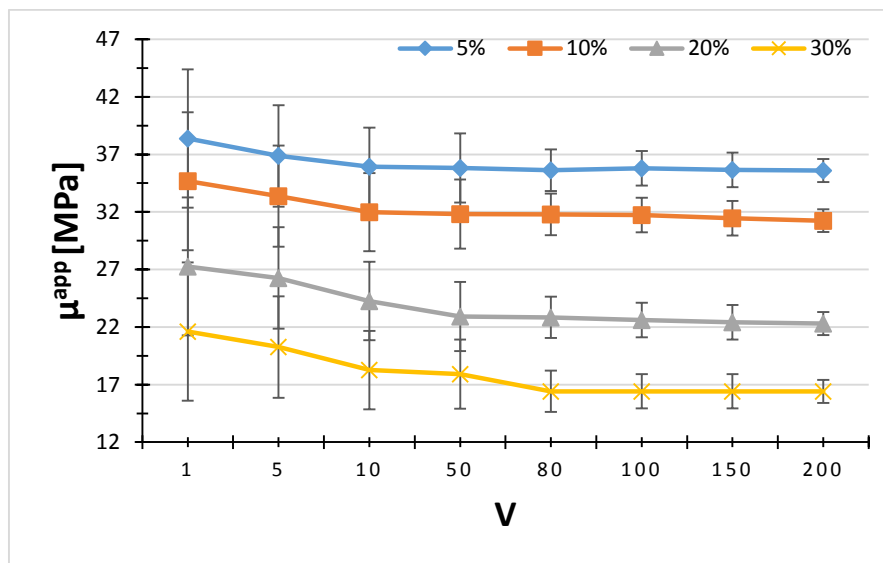
Figure IV-8 Concept de la morphologie équivalente pour un composite complexe



La figure IV-9 présente la variation des propriétés élastiques effectives d'un matériau à inclusions sphériques en fonction de nombre d'inclusions N.



(a)



(b)

Figure IV-9 Variation des module de compressibilité et du cisaillement en fonction de taille de volume pour un composite avec des inclusions sphériques

Les erreurs relatives pour les modules de compressibilité et de cisaillement entre les deux morphologies (complexe et avec inclusions sphériques) sont calculées comme suit :

$$\text{Erreur relative (k)} = (k_{\text{complexe}} - k_{\text{sphérique}}) / k_{\text{complexe}} \quad (\text{IV.7})$$

$$\text{Erreur relative } (\mu) = (\mu_{\text{complexe}} - \mu_{\text{sphérique}}) / \mu_{\text{complexe}} \quad (\text{IV.8})$$

| Fraction volumique de d'inclusions (%) | k [MPa] Str complexe | k [MPa] Str. avec sphères | HS-    | HS+    | Erreur relative (%) |
|----------------------------------------|----------------------|---------------------------|--------|--------|---------------------|
| 5                                      | 74.164               | 74.228                    | 64.052 | 75.366 | 0.086               |
| 10                                     | 70.283               | 67.419                    | 51.672 | 68.290 | 4                   |
| 20                                     | 52.734               | 55.705                    | 36.702 | 56.271 | 5.6                 |
| 30                                     | 51.541               | 46.521                    | 27.978 | 47.233 | 9.7                 |

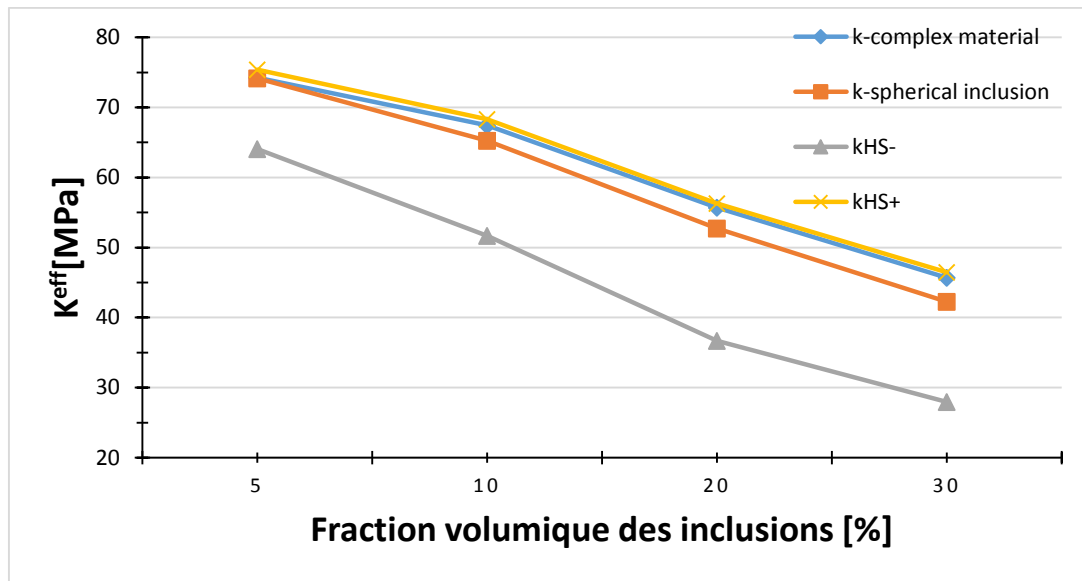
Tableau IV.4 : Résultats numériques pour le module de compressibilité pour les deux matériaux (complexe et sphérique) avec les limites HS

| Fraction volumique de l'inclusion (%) | $\mu$ [MPa] Str complexe | $\mu$ [MPa] Str. avec sphères | HS-    | HS+    | Erreur relative (%) |
|---------------------------------------|--------------------------|-------------------------------|--------|--------|---------------------|
| 5                                     | 35.138                   | 35.220                        | 30.917 | 35.539 | 0.2                 |
| 10                                    | 31.968                   | 33.244                        | 25.640 | 32.823 | 4                   |
| 20                                    | 26.895                   | 27.306                        | 18.742 | 27.922 | 1.5                 |
| 30                                    | 22.351                   | 30.331                        | 14.432 | 25.241 | 35.7                |

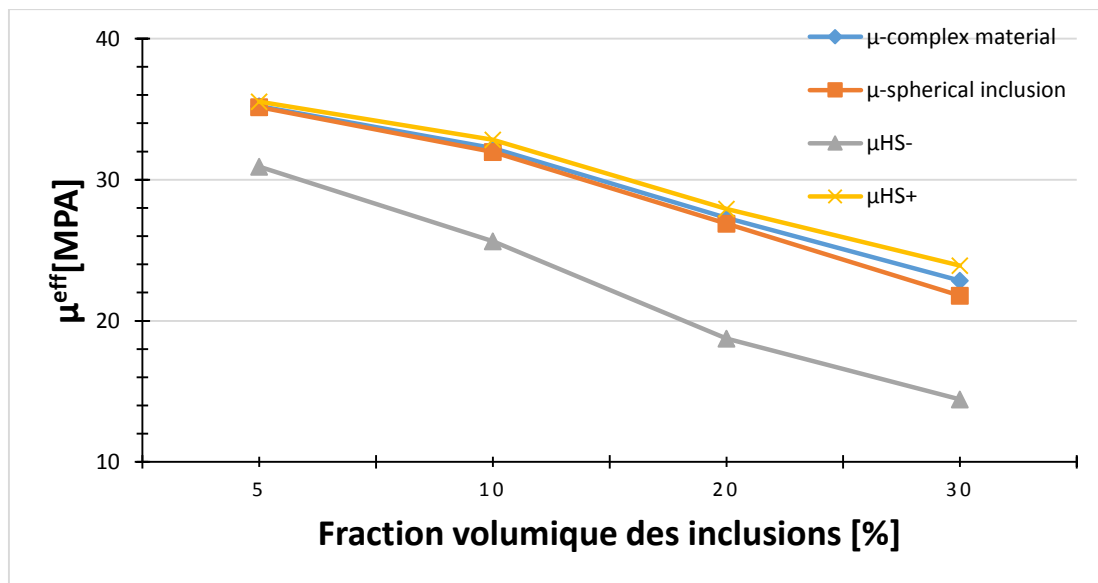
Tableau IV.5 : Résultats numériques pour le module de compressibilité pour les deux matériaux (complexe et sphérique) avec les limites HS

D'après les figures IV-8 et IV-9, les courbes des propriétés élastiques effectives k et  $\mu$  pour les deux morphologies convergent et sont pratiquement égales. L'erreur entre la valeur de k et  $\mu$  dans les deux cas est négligeable pour les fractions volumiques 5, 10 et 20%, voir les tableaux 5 et 6. Pour la fraction volumique 30%, l'origine de la différence 9,7% pour le module de compressibilité et 35% pour le module de cisaillement) est la teneur de l'hétérogénéité dans le matériau dans les deux morphologies. L'erreur en (%) est calculée entre le module effectif de morphologie complexe et la morphologie avec des inclusions sphériques.

En utilisant ces résultats, on peut énoncer le concept de morphologie équivalente qui permet de remplacer la morphologie originale du matériau complexe en deux phases par une autre morphologie nommée morphologie équivalente contenant seulement des sphères, à condition que la fraction volumique de la seconde phase de la morphologie originale soit égale à la fraction volumique des particules sphériques dans sa morphologie équivalente. Ces deux morphologies donnent les mêmes propriétés élastiques effectives (figure IV-8), mais pas nécessairement les mêmes *VER*.

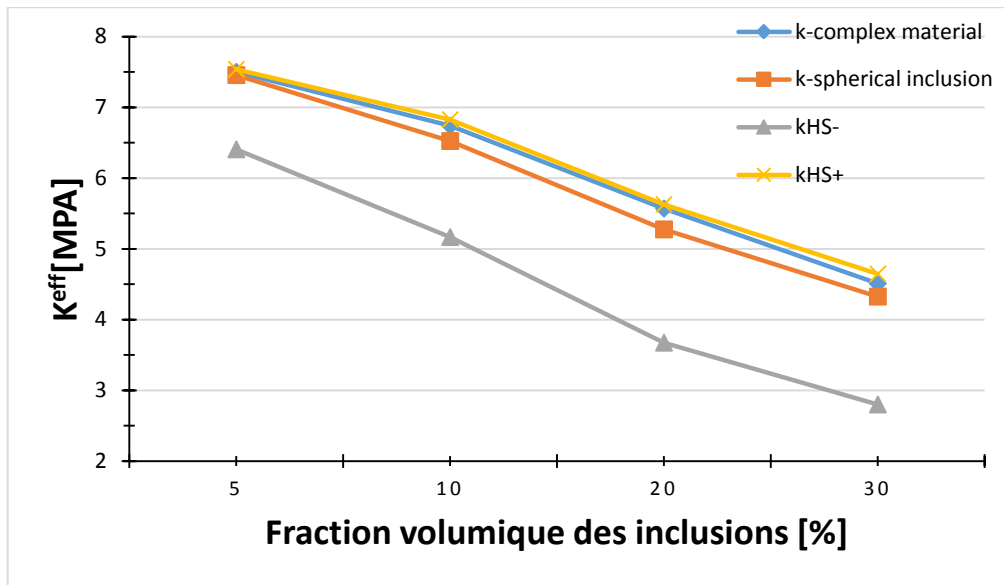


(a)

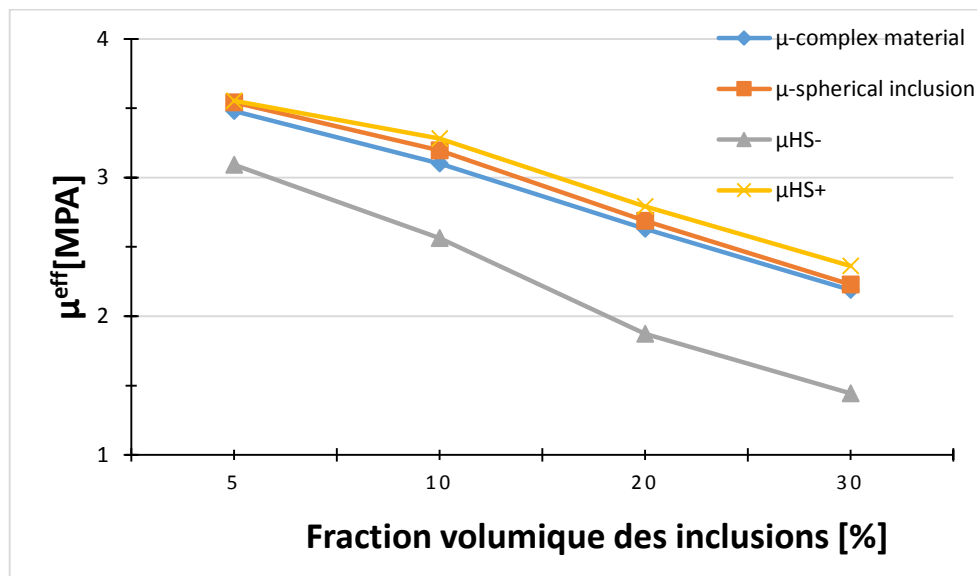


(b)

Figure IV-10 Variation des propriétés effectives pour un matériau complexe en fonction de la fraction volumique et la comparaison avec les modèles analytiques : a), module de compressibilité, b) module de cisaillement.



(a)



(b)

Figure IV-11 Variation des propriétés effectives pour un composite à sphères en fonction de la fraction volumique et la comparaison avec les modèles analytiques : a), module de compressibilité, b) module de cisaillement

Les cartographies des champs de contraintes et cisaillements pour les deux microstructures sont illustrés dans la figure IV-12

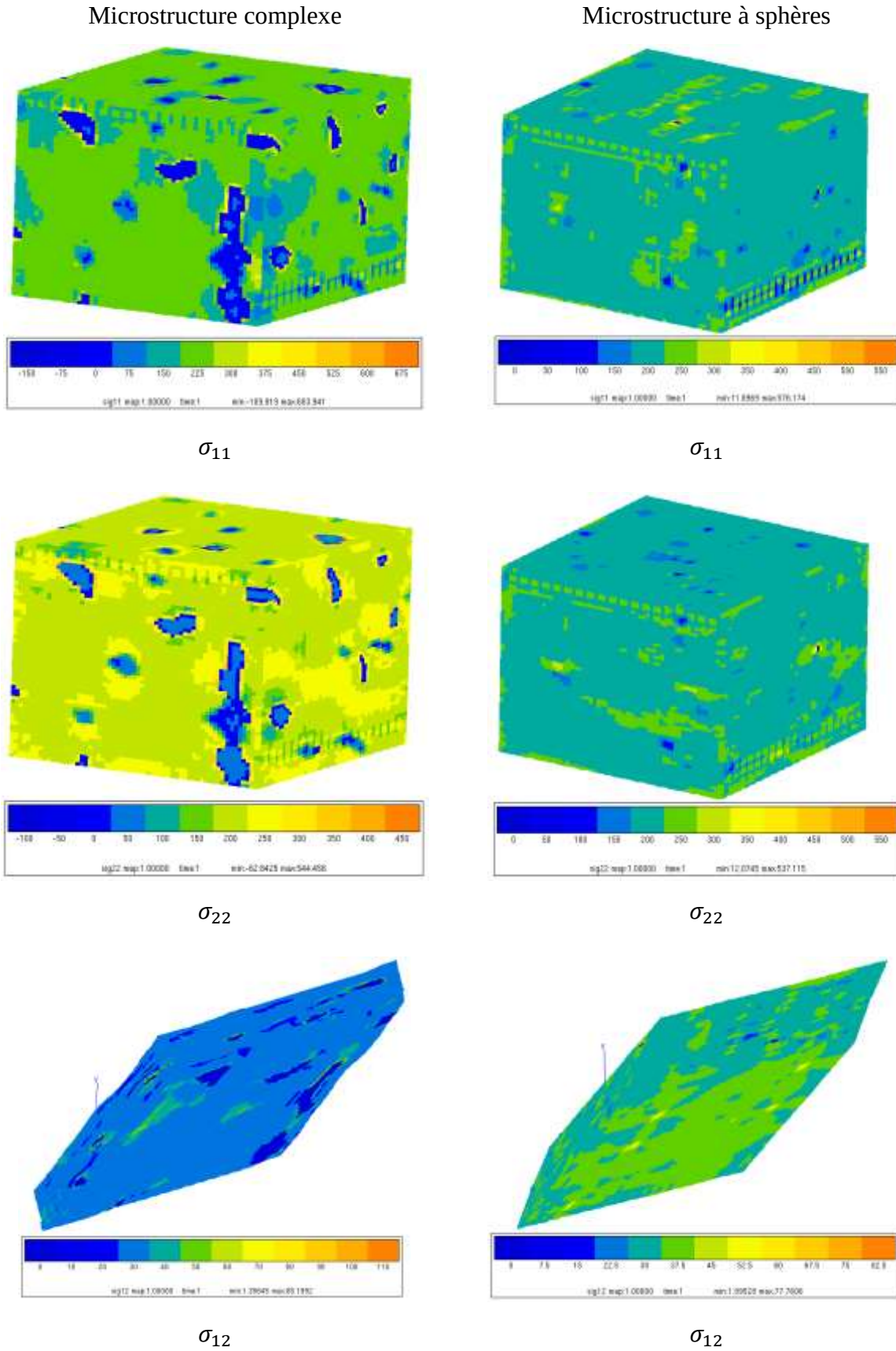


Figure IV-12 Cartographies des contraintes  $\sigma_{11}$ ,  $\sigma_{22}$  et  $\sigma_{12}$

## IV.8 Conclusion

Un modèle de cellule 3D est utilisé pour prédire les propriétés mécaniques effectives d'un matériau complexe biphase en utilisant des techniques d'homogénéisation pour différentes fractions volumiques. L'approche numérique est basée sur la méthode des éléments finis. Les modules effectifs de compressibilité et de cisaillement ont été calculés en utilisant un modèle à éléments finis et comparés aux modèles analytiques de Hashin-Strikman *HS*.

Le concept de morphologie équivalente, qui permet de remplacer la morphologie originale d'un matériau complexe en deux phases par une autre morphologie équivalente contenant uniquement des sphères, est proposé pour le but de réduire le temps de maillage de la microstructure complexe.

Les résultats numériques démontrent que l'approche développée par *EF* est très précise et efficace pour l'analyse de matériaux complexes 3D. Le présent travail a établi une base pour d'autres applications d'analyse micromécanique par éléments finis pour des problèmes tels qu'une étude du champ de contrainte afin de comprendre l'apparition et le développement d'un comportement inélastique tel que la déformation plastique et l'endommagement éventuels. En outre, la fiabilité prouvée de l'approche *EF* introduite, permet de nouvelles possibilités d'explorer des composites avec des types d'inclusions géométriques arbitraires, qui ne peuvent être couverts par la plupart des autres méthodes d'homogénéisation.

# **Conclusion générale & perspectives**



## Conclusion générale et perspectives

Cette thèse a pour objectif l'étude des comportements macroscopiques des microstructures hétérogènes à deux phases dans le cas de 2 et 3 dimensions. Ces microstructures sont à base des modèles aléatoires de la morphologie simple et complexe. Les conclusions suivantes peuvent être tirées :

La détermination des propriétés élastiques de matériaux hétérogènes requiert la prise en compte de la microstructure à l'échelle microscopique en utilisant la technique d'homogénéisation numérique.

Cette étude a mis en évidence l'intérêt de l'utilisation des scripts de génération des structures aléatoires de particules avec des tailles du volume élémentaire représentatif (*VER*) variables, celle-ci doit tenir compte de plusieurs paramètres comme : le nombre de phase, la fraction volumique et la morphologie des particules.

De ce fait, nous avons élaboré un outil de génération de structure 2D et 3D automatique et rapide, capable de faire des composite complexes et aléatoires afin de les exporter vers le code ZéBulon sous forme d'images pour la simulation numérique et la prédiction des propriétés élastiques. Ceci est fait pour le module de compression et pour le module de cisaillement. L'évaluation de la taille du *VER* est basée sur l'utilisation des approches *numériques* et *statistiques*. L'ensemble des résultats numériques obtenus ont été validés par les approches analytiques et statistiques. Nous avons pu également étudier la variation de la taille du *VER* en fonction des fractions volumique et des caractéristiques morphologiques des phases présentes.

Les bornes de Hashin-Strikman et l'estimation Auto-cohérente (Self-Consistent) ont donnés de bonnes résultats dans le cas de comportement linéaire pour l'évaluation des deux propriétés effectives ( $k$  et  $\mu$ ) des matériaux hétérogènes à structure aléatoire.

La détermination du *VER* dépend de la quantité importante  $A_2$  (La portée intégrale) reliée entre eux par une relation mathématique simple (III.18). cette portée qui dépend de la fraction volumique des particules, a un rôle important dans l'évolution du volume élémentaire représentatif (*VER*) pour les matériaux hétérogènes à deux phases ([kanit et al., 2003](#)).

Ce travail a permis aussi de généraliser la nouvelle notion morphologique pour l'étude des microstructures hétérogènes proposée par ([El moumen et al., 2014](#)) à des matériaux complexes à deux phases. Il s'agit du "concept de la morphologie équivalente". En effet, nous pouvons affirmer que dans le cas des propriétés élastiques, il est possible de substituer une microstructure complexe à deux phases par une microstructure à 2-phases à base de schéma de circulaire non interconnecté. Ces deux microstructures conduisent aux mêmes propriétés effectives.

Comme perspectives de ce travail, les scripts générés permettent de regrouper et créer un code de génération de différents modèles représentatifs, ce code permet de générer :

- Des modèles à particules de différentes dimensions ;
- Des modèles complexes à 2 phases de textures complexes ;
- Des mousses de formes complexes.

Aussi, exporter les modèles générés vers différents outils numériques de simulation tel que : Comsol, Abaqus, Ansys, Digimat, Zebulon, ...etc

# Annexe

## A.1 Propriétés physiques pour le cas 3D

Le tenseur d'élasticité est défini par son module de compression  $k$  et son module de cisaillement  $\mu$ , de manière équivalente, par son module d'Young  $E$  et son coefficient de Poisson  $\nu$

$$\begin{cases} 3k = \frac{E}{1-2\nu} \\ 2\mu = \frac{E}{1+\nu} \end{cases}$$

$\Leftrightarrow$

$$\begin{cases} E = 9 \frac{k\mu}{3k + \mu} \\ 2\mu = \frac{3k - 2\mu}{2(3k + \mu)} \end{cases}$$

## A.2 Les limites de Hashin-Shtrikman (cas 3D)

La détermination de ces limites est basée sur des principes variationnels supposée infinie et aucune information géométrique des constituants et considérés. Selon ([Zohdi & Wriggers, 2005](#)), les limites de Hashin-Shtrikman sont les meilleures estimations pour l'obtention de l'analyse des propriétés efficaces de matériau isotrope macroscopique. Les limites pour les propriétés effectives des matériaux isotropes résultant sont établies par les expressions dans le cas 3D :

$$k^{HS\pm} = k_m + \frac{f_i}{(k_i - k_m)^{-1} + f_m \left(k_m + \frac{4}{3}\mu_m\right)^{-1}}$$

$$\mu^{HS\pm} = \mu_m + \frac{f_i}{(\mu_2 - \mu_1) + \frac{2f_m(k_m + 2\mu_m)}{5\mu_m \left(k_m + \frac{4}{3}\mu_m\right)}}$$

avec:  $K_m > K_i$  ;  $\mu_i > \mu_m$  ;  $V_i + V_m = 1$ .

Les équations (I.23) et (I.24) représentent la plage des valeurs extrêmes pour le module d'élasticité volumique.

où  $(k_1, k_2)$  et  $(\mu_1, \mu_2)$  sont respectivement les modules de compressibilités et de cisaillement pour les deux phases ;  $f_1$  et  $f_2$  sont les fractions volumiques pour les deux phases ; les signes  $^+$  et  $^-$  désignent respectivement les bornes supérieures et inférieures

**A3 Modèle auto cohérant :**

$$k = \frac{k_m(\mu_m + k_f) + \mu_m V_f(k_f - k_m)}{(\mu_m + k_f) + V_f(k_m - k_f)}$$

$$\mu = \mu_m \left( 1 + \frac{V_f}{\frac{\mu_m}{\mu_f - \mu_m} + \frac{k_m + 2\mu_m}{2(k_m + \mu_m)}(1 - V_f)} \right)$$

Avec :

$$k_i = \frac{E_i}{2(1+\nu_i)(1-2\nu_i)} , \quad \mu_i = \frac{E_i}{2(1+\nu_i)} , \quad i = m, f$$

# Bibliographie

- Aidun, J.B., Lo, D.C.S., Trucano, T.G., Fye, R.M., (1999). Representative Volume Size: A Comparison of Statistical Continuum Mechanics and Statistical Physics, Sandia National Laboratories Albuquerque, New Mexico.
- Al-Raoush, R., Papadopoulos, A. (2010). Representative elementary volume analysis of porous media using X-ray computed tomography. *Original Research*, 200, 69-77
- Babushka, I. (1976). Solution interface problem by homogenization Parts I, II. *SIAM J Math. Anal.* 7, 603-645.
- Bakhvalov, N.S., Panasenko, G.P., (1984). Homogenization of processes in periodic media, Nauka", Moscow, English transl., Math. Appl. (Soviet. Ser.), vol. 36.
- Berger, H., Kurukuri, S., Kari, S. Gabbert, U., Rodriguez-Ramos, R. , Bravo-Castillero, J. and Guinovart-Diaz, R. (2007). Numerical and Analytical Approaches for Calculating the Effective Thermo-Mechanical Properties of Three-Phase Composites, *Journal of Thermal Stresses*, (30:8)801-817,
- Bornert, M., Bretheau, T., and Gilormini, P. (2001a). Homogénéisation en mécanique des matériaux, volume Tome 1. Hermès Sciences Publications, Paris
- Budiansky, B., (1965). On the elastic moduli of some heterogeneous materials, *J. Mech. Phys. Solids* (13) 223–227.
- Cailletaud, G. (1994). Size effects on elastic properties of random composites. *Engineering Computations*. Vol. 11, p. 99–110.
- Cailletaud, G., Forest, S., Jeulin, D., Feyel, F., Galliet, I., Mounoury, V. S. (2003). Some elements of microstructural mechanics. *Comput. Mater. Sci* Vol. 27, p. 351–374.
- Christensen, R.M. (1979a). *Mechanics of Composite Materials*. New York: Wiley.
- Christensen, R.M. (1979b). Solutions for effective shear properties of three phase sphere and cylinder models. *Journal of the Mechanics and Physics of solids*, Vol. 27, p. 315–330.
- Cooper D.W. (1988). Random-sequential-packing simulations in three dimensions for spheres. *Physical Review A* 38, 522\_524.
- Donev, A., Torquato S., Stillinger F. (2005a). Neighbor list collision-driven molecular dynamics simulation for nonspherical hard particles-I. Algorithmic details. *J. Comput. Phys.* 202:737.

- Donev, A., Torquato, S., Stillinger F. (2005b). Neighbor list collision-driven molecular dynamics simulation for nonspherical hard particles-II. Application to ellipses and ellipsoids. *J. Comput. Phys.* 202:765.
- Donev, A., Connelly, R., Stillinger F. H., Torquato S. (2006). Hypoconstrained Jammed Packings of Nonspherical Hard Particles: Ellipses and Ellipsoids
- Drugan, W.J., Willis, J.R., (1996). A micromechanics-based nonlocal constitutive equation and estimates of representative volume element size for elastic composites. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 44, 497-524.
- El Moumen, A., Kanit, T., Imad, A. and El Minor, H., (2013). Effect of overlapping inclusions on effective elastic properties of composites, *Mechanics Research Communications* (53) 24–30.
- El Moumen, A., Kanit, T., Imad, A. and El Minor, H., (2013). Effet de la forme de l'inclusion sur les propriétés élastiques effectives de composites de type matrice-inclusion A EL 21ème Congrès Français de Mécanique, Bordeaux, France (FR)
- El Moumen, A Imad, T Kanit, E Hilali, H El Minor, (2014). A multiscale approach and microstructure design of the elastic composite behavior reinforced with natural particles, *Composites Part B: Engineering* 66, 247-254
- Feyel, F., (1999). Multiscale FE2 elastoviscoplastic analysis of composite structure. *Computational Materials Science*, 16(1-4), 433–454.
- Fedaoui, K., Madani, S., Kanit, T. (2016). Prediction of effective thermal conductivity of heterogeneous random multi-phase composites.
- Forest, S., (2006). Milieux continus généralisés et matériaux hétérogènes. Mines, Paris
- Ghossein E. and Lévesque M. (2014). A comprehensive validation of analytical homogenization models: The case of ellipsoidal particles reinforced composites, *Mechanics of Materials*, 75, p. 135-150.
- Gitman, I., Askes, H., Sluys. L. (2007). Representative volume: existence and size determination. *Eng. Fracture Mech.*, 74, 2518-2534.
- Hashin, Z.S. (1963). A variational approach to the theory of elastic behavior of multiphase materials. *J. Mech Phys Solids* Vol. 11, p. 127–140.
- Hashin, Z., Shtrikman, S., (1963). A variational approach to the theory of the elastic behaviour of multiphase materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 11, 127-140.
- Hashin, Z., (1988). The differential scheme and its application to cracked materials, *J. Mech. Phys. Solids* (36) 719–736.

- Hazanov, S., Huet, C., (1994). Order relationships for boundary conditions effect in heterogeneous bodies smaller than the representative volume. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 42, 1995-2011.
- Hill, R. (1963). Elastic properties of reinforced solids: some theoretical principles. *J. Mech. Phys. Solids*, 11, 357–372
- Hollister, SJ, Kikuchi, N, (1992). A comparison of homogenization and standard mechanics analyses for periodic porous composites, 10, 73-95
- Huet, C. (1999). Coupled size and boundary condition effects in viscoelastic heterogeneous and composite bodies. *Mechanics of Materials* 31.12, 787-829
- Huet, C. (1990). Application of variational concepts to size effects in elastic heterogeneous bodies. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 38, 813–813
- Hutchinson, J.W., (1970). Elastic-plastic behavior of polycrystalline metals and composites. *Proceedings of the Royal Society of London* 319, 247-272.
- Jeulin, D., (2001). *Caractérisation Morphologique et modèles de Structures Aléatoires, Homogénéisation en mécanique des matériaux (tome1)*. Hermès, France.
- Kanit, T., Forest, S., Galliet, I., Mounoury, V., Jeulin, D. (2003). Determination of the size of the representative volume element for random composites: statistical and numerical approach. *Methods in applied mechanics and engineering*, Vol. 195, p. 3960–3982,
- Kanit, T., N’Guyen, F., Forest, S. Jeulin, D., Reed, M., Singleton, S. (2006). Apparent and effective physical properties of heterogeneous materials: Representativity of samples of two materials from food industry. *Int. Journal of Solids and Structures*. Vol. 40, p. 3647–3679.
- Kari, S., Berger, S., Gabbert, H., (2007). Numerical evaluation of effective material properties of randomly distributed short cylindrical fiber composites. *Computational Materials Science* 39, 198–204.
- Khan, K.A., Muliana, A.H. (2011). Effective thermal properties of viscoelastic composites having field-dependent constituent properties. *Acta Mech.* 209(1-2), 153-178
- Khdir, Y.K., Kanit, T., Zaïri, F., Naït-Abdelaziz, M., (2013). Computational homogenization of elastic-plastic composites. *Int. J. Solids Struct.*
- Klusemann, B., Böhm, H. J. and Svendsen, B., (2012). Homogenization methods for multi-phase elastic composites with non-elliptical reinforcements: comparisons and benchmarks, *European Journal of Mechanics A / Solids* (34) 21-37.
- Kouznetsova, V., Brekelmans, W. A. M., and Baaijens, F. P. T. (2001). An approach to micro-macro modeling of heterogeneous materials. *Comput. Mech.*, 27, 37–48

- Kouznetsova, V., (2002). Computational Homogenization for the Multi-Scale Analysis of Multi-Phase Materials, *Technische Universiteit Eindhoven*.
- Lachihab, A., Sab, K., (2005). Aggregate composites: a contact based modeling. *Computational Materials Science* 33 (4), 467–490.
- Lantuejoul, C. (1991). Ergodicity and integral range. *Journal of Microscopy* 161, p. 387–403.
- Lippmann, N., Steinkopff, T., Schmauder, S. et Gumbsch P. (1997). 3D-finite-element-modelling of microstructures with the method of multiphase elements. *Computational Materials Science* 9, 28\_35.
- Lubachevsky B., Stillinger, F., (1990). Geometric properties of random disk packings, *J. Statistical Physics* 60, 561-583
- Lubachevsky B., Stillinger, F., and Pinson, E. N., (1991). Disks vs Spheres: Constrating Properties of Random Packings. *Journal of Statistical Physics*, 64(3-4):501–524.
- Matheron, G. (1971). The theory of regionalized variables and its applications. Paris school of mines publications.
- Matuana, L. M, Parck, C. B., Balatinecz, J. J., (1998). Cell morphology and property relationships of microcellular foamed Pvc/Wood fibre composites, *Poly. Engng. Sci.*38 (11), 1862-1872.
- Millar DIA., (2012). Energetic Materials at Extreme Conditions. *New York: Springer Ph.D. Thesis*.
- Mori, T., Tanaka, K., (1973). Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions. *Acta Metallurgica* 21, 571-574.
- Moussaddy, H., Therriault, D., Lévesque, M. (2013). Submitted to: “International Journal of Solids and Structures. Assessment of existing and introduction of a new and robust efficient definition of the representative volume element.
- Nemat-Nasser, S., Hori, M., (1993). Micromechanics: overall properties of heterogeneous materials. North-Holland, New York.
- Nguyen, VP., Lloberas-Valls, O., Stroeven, M., Sluys, LJ. (2010). On the existence of representative volumes for softening quasi-brittle materials a failure zone averaging scheme
- Norris, A. N., A differential scheme for the effective moduli of composite, *Mech. Mater.* 199 (45), 3028-3038.
- Ostoja-Starzewski, M. (1998). Random field models of heterogeneous materials." *International Journal of Solids and Structures* 35.19, 2429-2455.



- Ostoja-Starzewski, M. (1999). Scale effects in materials with random distributions of needles and cracks. *Mechanics of Materials* 31.12, 883-893
- Ostoja-Starzewski, M., Jeulin, D. (2001). *Mechanics of Random and Multiscale Microstructures*. Springer.
- Özdemir, I., Brekelmans, W. & Geers, M. (2008). FE2 computational homogenization for the thermo-mechanical analysis of heterogeneous solids. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 198, 602-613.
- Qi B. (2006) Simulation numérique du comportement mécanique de composites à particules. Rapport de stage de master 2, École Centrale Paris, CEA.
- Pahlavan, M., Moussaddy, H., Ghossein, E. (2013). Prediction of Elastic Properties in Polymer-Clay Nanocomposites: Analytical Homogenization Methods and 3D Finite Element Modeling. *Computational Materials Science*.
- Pecullan, S., Gibiansky, L. V., and Torquato, S. (1999). Scale effects on the elastic behavior of periodic and hierarchical two-dimensional composites. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 47.7, 1509-1542
- Pelissou, C., Baccou, J., Monerie, Y., and Perales, F., (2009). Determination of the size of the representative volume element for random quasi-brittle composites, *Int. J. Solids. Struct.* (46) 2542–2855.
- Reine, B., (2014). Étude et simulation de la conductivité thermique de matériaux composites à matrice organique chargée et renforcée de fibres de carbone PITCH, Ph.D. Thèse.
- Reuss, A., (1929). Berechnung der Fließgrenze von Mischkristallen auf Grund der Plastizitätsbedingung für Einkristalle. *Z. angew. Math. Mech.*, 9, 49–58.
- Rintoul, M.D. & Torquato, S. (1997). Reconstruction of structure of dispersions. *J. Colloid Interface Sci.* 186, 467–476.
- Romero, P., Masad, E. (2001). Relationship between the Representative Volume Element and Mechanical Properties of Asphalt Concrete.
- Sab, K., (1992). On the homogenization and the simulation of random materials, *European Journal of Mechanics. A. Solids* (11) 585–607.
- Sahimi, M., (2003). *Heterogeneous Materials I: Linear Transport and Optical Properties, and II: Nonlinear and Breakdown Properties and Atomistic Modeling*. New York: Springer.
- Sanchez Palencia, E., (1980). Non-homogeneous Media and Vibration Theory, *Lecture Notes in Physics*. (127) Springer Verlag, Heidelberg.

- Segurado, J. and Llorca, J., (2006). Computational micromechanics of composites: The effect of particle spatial distribution. *Mechanics of Materials* 38, 873–883
- Steinkopff, T., (1993). Rezoning scheme for the simulation of discrete void formation in coarse two-phase materials. *Computational Materials Science* 1, 289\_296.
- Steinkopff, T., et Sautter M. (1995a). Simulating the elasto-plastic behavior of multiphase materials by advanced finite element techniques. Part I: a rezoning technique and the multiphase element method. *Computational Materials Science* 4, 10\_14.
- Steinkopff, T., et Sautter M. (1995b). Simulating the elasto-plastic behavior of multiphase materials by advanced finite element techniques. Part II: simulation of the deformation behavior of Ag-Ni composites. *Computational Materials Science* 4, 15\_22.
- Suquet, P.M., (1985). Local and global aspects in the mathematical theory of plasticity. In: *Plasticity Today: Modelling, Methods and Applications*. Elsevier Applied Science Publishers, London, 279–310.
- Tanemura, M. (1979). On random complete packing by discs: *Annals of the Institute of Statistical Mathematics*, B31, 351-365.
- Tanemura, M. (1981). On random complete parking of spheres in 2D and 3D spaces: *Proceedings of the International Roundtable Congress. 50-th Anniversary of Japan Statistical Society*, 216-229.
- Tanemura, M. (1988a). Random packing and random tessellation in relation to the dimension of space: *Journal of Microscopy*, 151, 247-255.
- Tanemura, M. (1988b). On the density of strict random, complete parking by discs: *Research Memorandum, The Institute of Statistical Mathematics*, 339, 1-24.
- Terada, K., Hori, M., Kyoya, T. and Kikuchi, N., (2000). Simulation of the multi-scale convergence in computational homogenization approaches, *Int. J. Solids. Struct.* (37) 2285–2133.
- Torquato, S., (1991). Random heterogeneous media: Microstructure and improved bounds on effective properties, *Appl. Mech. Rev* (44) 37–77.
- Torquato, S., (2002). *Random Heterogeneous Materials: Microstructure and Macroscopic Properties*. New York: Springer.
- Trusov, P.V., and Keller, I.E. (1997) Theory of constitutive relation. *Part I. Perm State Technical University, Perm, 1997. in Russian*
- Van Mier, J.G.M. (1997). *Fracture processes of concrete*. CRC Press, Inc., USA,.

Vinh Phu Nguyen, V.P., Lloberas-Valls, O., Stroeven, M. (2010). On the existence of representative volumes for softening quasi-brittle materials-A failure zone averaging scheme *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 199, 3028-3038.

Voigt, W. (1928). Lehrbuch der Kristallphysik, B. G. Teubner Verlag, Leipzig.

Wang J.S. (1998). Random Sequential Adsorption, Series Expansion and Monte Carlo Simulation, *Physics A*, 254, 179–184.

Zohdi, I.I. (2002). An Introduction to Computational Micromechanics

Zohdi, I.I., Wriggers, P., (2005). Introduction to Computational Micromechanics. *Springer, Berlin, Heidelberg, New York.*

**الملخص**

الهدف من هذا العمل هو دراسة وصف سلوك المواد غير المتجانسة، وإيجاد مادة مكافئة لها. تعتبر حساب التقاربات في علم الميكرو ميكانيك عموما المواد غير المتجانسة على أنها عادة ما تتألف من مجموعة من المكونات اين تكون فيها بنية الشكل والتوزيع والحجم مؤثرين على السلوك الكامل لهذه المادة. في هذه الحالة يتم استخدام تقنيات النمذجة على التجانس او ما يعرف بالتغيير المقياسي أو تجانس يسمح لمحاكاة سلوك أحجام عنصرية والتي ستمثل بعدها هذه البنية المجهرية التي شملتها الدراسة. وتسمى هذه الاحجام بالحجم العنصري التمثيلي *VER*. ان البحث عن المجهرية المماثلة لبنية مادة تتكون من صنفين يسمح لنا بتحديد ما يعرف "النطاق الكامل" والذي يسهل لاحقا في حساب هذا النوع من البنى المجهرية. وفي مقارنة أخرى بين هذا النوع من البنى المجهرية مع بنية مجهرية ذات شكل معقد.

**كلمات البحث:**

الخصائص الفعالة، المواد غير المتجانسة، التجانس، النطاق الكامل، المجهرية المعقدة.

**Résumé**

L'objectif de ce travail est de décrire le comportement des matériaux hétérogènes et de trouver l'équivalence de ces matériaux. Les approches micromécaniques consistent généralement à considérer un matériau hétérogène comme un ensemble de constituants dont la morphologie, la répartition et la taille influencent le comportement global. Dans ce cas l'application des techniques de modélisation par changement d'échelles, ou d'homogénéisation, permettent de simuler le comportement de volumes élémentaires de plus en plus représentatifs des microstructures étudiées. Ces volumes s'appellent " Volume élémentaire représentatif VER". La recherche de la microstructure équivalente pour une structure à deux phases permet de déterminer une quantité "la portée intégrale" qui facilite par la suite le calcul de type de microstructure, en autre une comparaison entre ce type de microstructure avec une microstructure réelle.

**Mots-clés :**

Propriétés effectives, matériaux hétérogènes, homogénéisation, portée intégrale, microstructure complexes.

**Summary**

The objective of this work is to describe the behavior of heterogeneous materials and finding the equivalence of them. Micromechanical approaches generally consist of considering a heterogeneous material as a set of components whose morphology, distribution and size influence the overall behavior. In this case, the application modeling techniques by change of scale or homogenization are used to simulate the behavior of elementary volumes of increasingly representative of the studied microstructures. These volumes are called representative volume element RVE. The search for the equivalent microstructure for a two-phase structure allows us determine an amount "full range" that facilitates subsequent to calculate this type of microstructure, in another way a comparison between it and a real of real microstructure.

**Keywords:**

Effective properties, heterogeneous materials, homogenization, integral rang, complex microstructure.