



ÉCOLE CENTRALE DES ARTS
ET MANUFACTURES
« ÉCOLE CENTRALE PARIS »

THÈSE
présentée par

M. François DI PAOLA

pour l'obtention du

GRADE DE DOCTEUR

Spécialité : Sciences pour l'ingénieur, mécanique et matériaux

Laboratoire d'accueil : Laboratoire de Mécanique des Sols, Structures et Matériaux (LMSSMat)

Sujet :

**Modélisation multi-échelles du comportement
thermo-élastique de composites à particules sphériques**

Soutenue le : 30 novembre 2010

devant un jury composé de :

M.	Philippe PILVIN	Président (professeur, université de Bretagne-Sud)
M.	Serge KRUCH	Rapporteur (ingénieur de recherche, ONERA)
M.	Samuel FOREST	Rapporteur (directeur de recherche, CNRS)
M.	Renaud MASSON	Examineur (ingénieur de recherche, CEA)
Mme.	Clotilde BERDIN-MÉRIC	Directrice de thèse (professeur, université Paris-Sud 11)
M.	Serge PASCAL	Co-directeur de thèse (ingénieur de recherche, CEA)

2010ECAP0034

Résumé

Ce travail de thèse a porté sur la simulation numérique du comportement thermique et mécanique d'un combustible nucléaire à particules. Il s'agit d'un composite réfractaire constitué d'une matrice de graphite comportant 45 % en fraction volumique de particules sphériques d' UO_2 revêtues de deux couches de pyrocarbone. L'objectif était de développer une modélisation multi-échelles de ce composite afin d'estimer son comportement moyen, ainsi que les hétérogénéités des champs mécaniques au sein des constituants. Nous avons modélisé la microstructure du combustible et généré des échantillons numériques en 3D. Pour cela, des outils de génération de distributions aléatoires de sphères, de maillage et de caractérisation microstructurale, telle la covariance, ont été développés dans le code de calcul CAST3M. Une centaine d'échantillons numériques de différentes tailles ont été réalisés. Le comportement thermo-élastique du combustible a été caractérisé à partir de ces échantillons, à l'aide de calculs de microstructures par éléments finis. Nous avons étudié l'influence de divers paramètres de la modélisation, dont les conditions aux limites. Nous proposons une méthode pour s'affranchir des effets des conditions aux limites sur les résultats, appelée méthode d'érosion. Elle s'appuie sur l'analyse des résultats sur un érodé du volume élémentaire. Nous avons alors déterminé les propriétés effectives du composite (modules d'élasticité, conductivité thermique, dilatation thermique), ainsi que les distributions des champs mécaniques locaux au sein de la matrice. Enfin, nous avons proposé un modèle de changement d'échelles permettant d'obtenir, non seulement les valeurs moyennes des variables mécaniques dans chaque phase, mais également leurs variances et covariances pour tout chargement macroscopique imposé. Cette approche statistique de changement d'échelles permet ainsi d'estimer la distribution des grandeurs mécaniques au sein de chaque phase du composite.

Abstract

The aim of this work was to perform numerical simulations of the thermal and mechanical behavior of a particle-based nuclear fuel. This is a refractory composite material made of UO_2 spherical particles which are coated with two layers of pyrocarbon and embedded in a graphite matrix at a high volume fraction (45 %). The objective was to develop a multi-scale modeling of this composite material which can estimate its mean behavior as well as the heterogeneity of the local mechanical variables. The first part of this work was dedicated to the modeling of the microstructure in 3D. To do this, we developed tools to generate random distributions of spheres, meshes and to characterize the morphology of the microstructure towards the finite element code CAST3M. A hundred of numerical samples of the composite were created. The second part was devoted to the characterization of the thermo-elastic behavior by the finite element modeling of the samples. We studied the influence of different modeling parameters, one of them is the boundary conditions. We proposed a method to vanish the boundary conditions effects from the computed solution by analyzing it on an internal sub-volume of the sample obtained by erosion. Then, we determined the effective properties (elastic moduli, thermal conductivity and thermal expansion) and the stress distribution within the matrix. Finally, in the third part we proposed a multi-scale modeling to determine the mean values and the variance and covariance of the local mechanical variables for any macroscopic load. This statistical approach have been used to estimate the intra-phase distribution of these variables in the composite material.

Remerciements

Je tiens à remercier, tout d'abord, mon encadrant de thèse Serge PASCAL pour tout ce qu'il m'a apporté du point de vue scientifique, professionnel et personnel. Son encadrement quotidien soigneux mais aussi la liberté qu'il m'a laissée dans le travail m'ont fait progresser continuellement sur la voie de l'apprentissage de la recherche scientifique. Je tiens à remercier également ma directrice de thèse Clotilde BERDIN pour ses encouragements, ses qualités pédagogiques, sa sympathie, ainsi que sa rigueur et sa vision éclairée du travail de recherche.

Je remercie les membres du jury, messieurs Philippe PILVIN, Serge KRUCH, Samuel FOREST et Renaud MASSON qui m'ont fait l'honneur d'évaluer ce travail.

Je remercie également les membres du Laboratoire de Mécanique, Systèmes et Simulation (LM2S) du CEA Saclay ainsi que les membres du Laboratoire de Mécanique des Sols, Structures et Matériaux (LMSSMat) de l'ECP pour leur aide et leur soutien tout au long de ces trois années. Mention spéciale à Olivier FANDEUR pour son aide régulière, ses suggestions et ses corrections rigoureuses.

Je remercie les doctorants et stagiaires que j'ai côtoyé durant ces trois années : Saeid REZAEI, Julien SCWARTZ, Huaidong WANG, Julien THÉBAULT, Julien DE JAEGER, Anaëlle CASANOVA, Zakaria HABIBI, Adel GHAMRI, Alexandre HERVÉ et Yassine REGUEI. Merci pour tous ces bons moments passé ensemble.

Merci aussi à mon ami « d'enfance » et camarade de science Étienne AMBLARD.

Je remercie enfin ma famille, au sens large du terme, qui m'a donné la chance d'arriver jusqu'ici. Merci spécialement à toi, Fanny, de m'avoir encouragé quoi qu'il arrive, de partager ma vie et de la rendre plus belle.

Notations

Dans tout le document, nous utilisons la convention de sommation d'EINSTEIN pour les indices répétés. Les différents tenseurs sont notés :

A Tenseurs d'ordre 0 (scalaires)

\underline{A} Tenseurs d'ordre 1 (vecteurs)

$\underline{\underline{A}}$ Tenseurs d'ordre 2

\mathbb{A} Tenseurs d'ordre 4

\mathbb{A} Tenseurs d'ordre 8

Les principaux opérateurs sont notés :

\otimes Produit tensoriel (dyadique)

\cdot Produit tensoriel contracté une fois

$:$ Produit tensoriel contracté deux fois

$\langle A \rangle_V$ Moyenne du champ A sur le volume V

$\|\underline{A}\|$ Norme du vecteur \underline{A}

Les principaux acronymes utilisée dans ce documents sont :

CL Conditions aux Limites

CLDH Conditions aux Limites de Déformation Homogène sur le contour

CLCH Conditions aux Limites de Contrainte Homogène sur le contour

CLGH Conditions aux Limites de Gradient de température Homogène sur le contour

CLFH Conditions aux Limites de Flux de chaleur Homogène sur le contour

CLP Conditions aux Limites Périodiques

MHE Milieu Homogène Équivalent

PHE Particule Homogène Équivalente

VE Volume Élémentaire

VER Volume Élémentaire Représentatif

Table des matières

Résumé	iii
Abstract	iv
Remerciements	v
Notations	vii
Table des matières	ix
I Introduction générale	1
I.1 Contexte industriel de la thèse	1
I.2 Démarche scientifique	4
I.3 Plan du mémoire	4
II Étude bibliographique	5
II.1 Méthodologie de la modélisation par changement d'échelles	6
II.1.1 Principes et représentation du milieu hétérogène	6
II.1.2 Localisation et homogénéisation	8
II.1.3 Conditions aux limites (CL)	9
II.1.4 Expression du tenseur d'élasticité apparent	10
II.1.5 Analogie en thermique	12
II.1.6 Remarques sur la notion de VER	13
II.2 Présentation de quelques modèles analytiques de changement d'échelles	13
II.2.1 Modèles analytiques en élasticité linéaire	13
II.2.2 Comportement thermo-élastique linéaire apparent	24
II.2.3 Changements d'échelles en mécanique non linéaire	25
II.3 Simulation de microstructures	28
II.3.1 Génération de microstructures aléatoires à inclusions sphériques	28
II.3.2 Différentes méthodes de maillage	31
II.3.3 Outils de caractérisation morphologique pour les composites à inclusions	33
II.4 Étude numérique de composites à inclusions sphériques	36
II.4.1 Influence de la répartition des inclusions	36
II.4.2 Homogénéisation du comportement mécanique	37
II.4.3 Modélisation multi-échelles du combustible à particules	38
III Modélisation de la microstructure du combustible à particules	41
III.1 Le combustible à particules	41
III.1.1 Constituants	41
III.1.2 Propriétés des constituants	42
III.2 Génération des échantillons numériques	43
III.2.1 Génération de nuages de points aléatoires	43
III.2.2 Remarques importantes sur les échantillons numériques réalisés	46

III.2.3	Maillage des échantillons numériques	48
III.2.4	Particules Homogènes Équivalentes (PHE)	53
III.3	Caractéristiques morphologiques des échantillons numériques réalisés	54
III.3.1	Fraction volumique de particules	54
III.3.2	Moments d'inertie	55
III.3.3	Courbes de covariance	56
IV	Caractérisation des échantillons numériques	59
IV.1	Présentation des essais numériques	59
IV.1.1	Calcul des propriétés thermo-élastiques apparentes	59
IV.1.2	Encadrement des propriétés apparentes	61
IV.1.3	Distribution des contraintes	62
IV.2	Étude de sensibilité aux paramètres de la modélisation	62
IV.2.1	Sensibilité des résultats au maillage	62
IV.2.2	Isotropie du comportement thermo-élastique	66
IV.2.3	Comparaison des techniques de maillage	66
IV.2.4	Effets de bords et méthode d'érosion	69
IV.2.5	Validation des particules homogènes équivalentes	79
IV.3	Caractérisation du combustible à particules	82
IV.3.1	Propriétés thermo-élastiques apparentes	82
IV.3.2	Distribution des contraintes dans la matrice	85
IV.4	Conclusions	90
V	Modélisation par changement d'échelles du combustible à particules	95
V.1	Superposition de schémas	95
V.1.1	Principe du modèle	95
V.1.2	Résultats	97
V.2	Identification d'une approche statistique d'ordre 2	99
V.2.1	Tenseurs de localisation moyens par phase	99
V.2.2	Matrice de variance-covariance	101
V.2.3	Localisation de la matrice de variance-covariance	102
V.2.4	Estimation de la distribution des contraintes dans la matrice par une loi normale multivariée	104
V.2.5	Éléments de mise en œuvre dans un calcul de structure	106
V.3	Conclusions et perspectives	107
VI	Conclusions générales et perspectives	109
VI.1	Conclusions	109
VI.2	Perspectives	111
	Bibliographie	113
A	Modèles de changement d'échelles en mécanique non linéaire	121
A.1	Modèle de KRÖNER	121
A.2	Formulation incrémentale de HILL	121
A.3	Formulation sécante	122
A.4	Loi en β	123
A.5	Formulation affine	123

B	Validation de la procédure de calcul de la covariance dans Cast3M	125
C	Application des conditions aux limites périodiques avec Cast3M	127
C.1	Généralités et cas du maillage périodique	127
C.2	Cas du maillage non périodique	128
D	Résultats complémentaires	131
D.1	Courbes de covariance	131
D.2	Méthode d'érosion	135

Chapitre I

Introduction générale

Cette thèse a été réalisée dans le cadre du soutien à la recherche de base du Service d'Études Mécaniques et Thermiques (SEMT) de la Direction de l'Énergie Nucléaire (DEN) du Commissariat à l'Énergie Atomique et aux Énergies Alternatives (CEA), en collaboration avec le Laboratoire de Mécanique des Sols, Structures et Matériaux (LMSSMat) de l'École Centrale Paris. Ce travail s'inscrit dans la continuité des développements menés au Laboratoire de Mécanique, Systèmes et Simulation (LM2S) sur la modélisation par changement d'échelles en thermo-mécanique des milieux continus.

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

L'objectif de cette thèse est de modéliser le comportement thermo-élastique de matériaux composites constitués de particules sphériques en inclusion dans une matrice et en forte proportion volumique par une approche multi-échelles. Les modèles analytiques actuels permettent d'estimer de façon satisfaisante leurs propriétés thermo-élastiques effectives, ainsi que les valeurs moyennes des contraintes et déformations dans chaque constituant. Cependant, les mécanismes non linéaires d'endommagement ou de rupture sont gouvernés par les valeurs extrémales des contraintes qui, dans certains cas, peuvent être nettement plus importantes que les contraintes moyennes estimées. L'objectif de la thèse est d'étudier les moyens de prendre en compte ces hétérogénéités dans une modélisation multi-échelles.

I.1 Contexte industriel de la thèse

Le CEA mène une veille technologique sur les applications spatiales de l'énergie nucléaire au travers d'études de conception de systèmes nucléaires électrogènes ou de propulsion. De 2001 à 2008, le CEA a notamment travaillé à la conception d'un système nucléaire à conversion dyna-

mique d'une puissance de 100 kW électriques. S'appuyant sur la R&D menée sur la filière des réacteurs rapides à gaz de quatrième génération, les choix de conception du réacteur nucléaire se sont orientés sur un réacteur à spectre neutronique rapide, fonctionnant à haute température (autour de 1 000 °C) et à caloporteur gaz. Le cœur du réacteur est de forme orthocylindrique de 50 cm environ et d'une puissance volumique de $5,6 \text{ MW.m}^{-3}$ (cf. figure I.1). Il est constitué d'un ensemble de 233 assemblages combustibles de forme prismatique à base hexagonale, percés en leur centre d'un canal. Ces assemblages sont eux-mêmes constitués de combustible à particules. Il s'agit d'un matériau réfractaire composé de particules combustibles de type « Biso » dispersées aléatoirement dans une matrice de graphite. Ces particules, de taille millimétrique, se composent d'un noyau en dioxyde d'uranium (UO_2), enrichi à 93 % en uranium 235 (^{235}U), et revêtu de deux couches de carbone pyrolytique ou *pyrocarbone* : la première, poreuse, est appelée *Buffer* ; la seconde, dense, est notée *PyC* (cf. figure I.2).

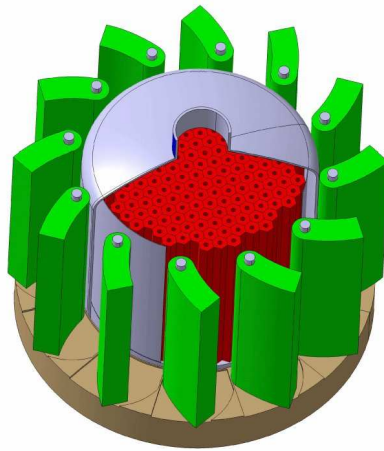


FIG. I.1 – Dessin de conception du réacteur nucléaire spatial.

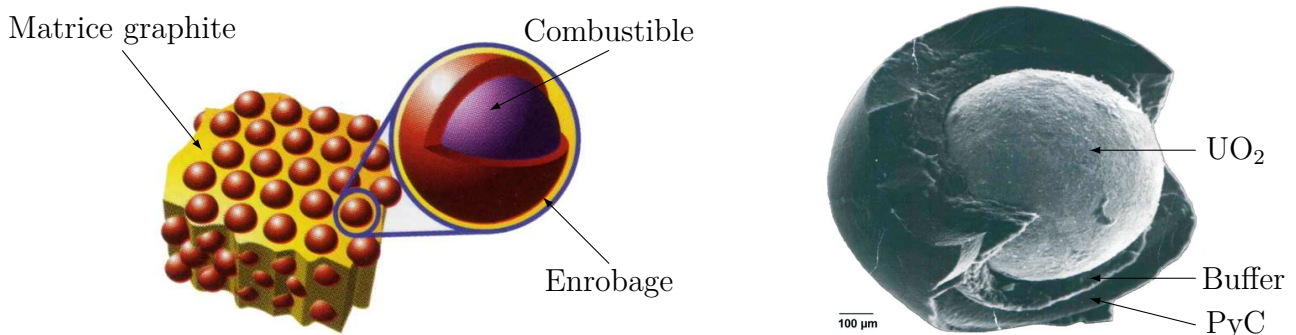


FIG. I.2 – Illustration d'un combustible nucléaire à particules et détail d'une particule combustible.

La conception du réacteur passe par l'étude de la tenue mécanique des assemblages combustibles en service. Le combustible à particules est à la fois la source d'énergie du système et le matériau de structure des assemblages du cœur. Afin de réduire sa masse, la conception neutronique nécessite une fraction volumique de particules relativement élevée de 45 %, ce qui n'a jamais été réalisé pour ce type de combustible. Étant donnée la nature de ce matériau et la confidentialité de ces études, il est impossible d'envisager la réalisation de quelques échantillons

afin de le caractériser expérimentalement : la tenue mécanique de ce combustible doit donc être estimée par le calcul à partir de celle de ses constituants. Par ailleurs, étant données ses dimensions ($30 \times 30 \times 500 \text{ mm}^3$), chaque assemblage contient plusieurs centaines de milliers de particules combustibles. Cette différence d'échelles entre assemblage et particule, ainsi que le caractère aléatoire de la microstructure (répartition spatiale aléatoire des particules), ne permettent pas de représenter explicitement la géométrie de ce milieu hétérogène dans un calcul par éléments finis à l'échelle du cœur.

La modélisation par changement d'échelles permet de répondre à cette problématique car elle fournit une estimation du comportement effectif de la structure en tenant compte des phénomènes intervenant à l'échelle microscopique sans avoir à la représenter explicitement. Elle fournit également la possibilité de post-traiter les champs mécaniques induits au sein de chaque constituant afin d'analyser leur tenue mécanique. Ainsi, ce type de modélisation permet de simplifier la représentation du milieu hétérogène considéré en lui substituant un milieu homogène équivalent, *i.e.* possédant ses propriétés effectives. Un modèle de changement d'échelles du combustible à particules a déjà été mis en œuvre au LM2S pour simuler le comportement thermo-élastique du réacteur (PASCAL, 2005, 2006, 2007). Le modèle utilisé, basé sur un modèle analytique de la littérature (HERVÉ et ZAOUI, 1993; HERVÉ, 2002), décrit correctement le comportement effectif du combustible, ainsi que les contraintes et déformations moyennes dans chaque phase. Cependant, il ne fournit aucune information sur la variation des champs locaux autour de leur valeur moyenne, qui peut être importante au sein d'une même phase, notamment la matrice. Or, les comportements non linéaires (fluage, plasticité, endommagement . . .) ne sont pas conditionnés par la valeur moyenne des contraintes locales mais par leurs valeurs extrémales. L'objectif de la thèse est de développer une modélisation par changement d'échelles permettant d'estimer l'hétérogénéité de ces champs et d'obtenir cette hétérogénéité à partir d'un calcul macroscopique.

Remarque : L'intérêt d'utiliser l'énergie nucléaire dans le cadre de la propulsion d'engins spatiaux est motivée par la faible autonomie énergétique des engins spatiaux actuels, dont la propulsion est basée : soit sur la chimie des ergols solides ou liquides, soit sur l'effet photovoltaïque des panneaux solaires. Or, si ces deux sources d'énergie répondent aux besoins des missions actuelles, elles ne permettraient pas la réalisation d'objectifs plus ambitieux, tels des vols habités à destination de Mars ou l'exploration robotisée du sol de systèmes planétaires lointains. En effet, l'énergie spécifique de ces deux sources n'est pas suffisante pour lancer des masses conséquentes à des vitesses permettant des temps de parcours compatibles avec la vie humaine dans l'espace. L'intérêt de l'énergie nucléaire apparaît clairement si l'on considère que la fission d'un gramme de plutonium libre environ la même énergie que la combustion d'une tonne de pétrole. Si les combustibles chimiques utilisés pour la propulsion aérospatiale sont nettement plus performants que le pétrole, le rapport de l'énergie spécifique de ces derniers avec les combustibles nucléaires reste du même ordre de grandeur. Si l'on savait parfaitement transformer l'énergie nucléaire en énergie cinétique, celle-ci permettrait donc d'atteindre des vitesses environ mille fois supérieures aux vitesses accessibles aujourd'hui. Si cette comparaison permet d'apprécier tout le potentiel offert par l'énergie nucléaire, elle n'est cependant pas significative de la réalité actuelle, son exploitation étant loin d'être optimale.

I.2 Démarche scientifique

La démarche scientifique adoptée dans ce travail de thèse se décompose en trois étapes :

Générer des échantillons numériques du milieu hétérogène considéré. Tout d'abord, il s'agit de développer une méthode permettant de générer des échantillons numériques de microstructures aléatoires constituées d'inclusions multi-couches dans une matrice, distribuées aléatoirement et présentant une forte fraction volumique. Plusieurs échantillons seront générés afin de caractériser statistiquement la morphologie du milieu réalisé. Il s'agit, enfin, de mailler ces microstructures afin de caractériser leur comportement thermo-mécanique par simulation par éléments finis.

Analyser le comportement thermo-mécanique de ces échantillons. Les échantillons numériques seront soumis à diverses sollicitations mécaniques et thermiques afin d'analyser leur comportement apparent, ainsi que la distribution des contraintes locales. Cette analyse permettra d'orienter le choix d'une méthode de changement d'échelles. Dans ce travail, les particules en tant que sources de chaleur ne seront pas prise en compte.

Proposer une modélisation par changement d'échelles du comportement thermique et mécanique de ce milieu. Cette modélisation devra fournir une estimation des propriétés effectives du combustible, ainsi que de l'hétérogénéité des contraintes locales pour un chargement macroscopique donné.

I.3 Plan du mémoire

Le second chapitre propose une synthèse bibliographique sur la modélisation par changement d'échelles, que ce soit sur les modèles analytiques classiques développés dans ce cadre ou sur un certain nombre de résultats sur le comportement thermo-mécanique de milieux de type inclusions-matrice, ainsi que sur la génération de milieux aléatoires à particules, leur caractérisation morphologique et thermo-mécanique. Le troisième chapitre est consacré à la modélisation de la microstructure. Il présente les techniques utilisées pour la génération des échantillons numériques du combustible à particules, en particulier l'algorithme de génération d'un nuage de points correspondant aux centres des particules, et la méthode de maillage d'une telle géométrie. Cette modélisation est réalisée grâce au code de calcul CAST3M. Le quatrième chapitre traite de la caractérisation du comportement thermo-mécanique des échantillons numériques. Nous présentons les essais numériques réalisés. Puis, nous étudions l'influence de différents paramètres de la modélisation (maillage, conditions aux limites, etc.) sur les résultats de la caractérisation, ainsi que la validité de certaines hypothèses, notamment celle qui consiste à représenter les particules de façon homogène. Nous proposons également une méthode originale pour réduire les effets des conditions aux limites sur les champs solutions obtenus par la simulation. Enfin, nous présentons les propriétés thermo-mécaniques effectives obtenues à partir d'un groupe d'échantillons de plusieurs tailles et les distributions de contraintes dans la matrice pour différents chargements élémentaires. Le quatrième chapitre présente la modélisation par changement d'échelles développée pour le combustible à particules afin d'estimer les hétérogénéités des contraintes dans ses constituants. Deux voies ont été explorées : la superposition de schémas d'homogénéisation, d'une part, et l'identification des paramètres d'une approche statistique de changement d'échelles, d'autre part. Le dernier chapitre fait la synthèse de ces résultats et présente les perspectives de la thèse.

Chapitre II

Étude bibliographique

Ce chapitre propose une revue bibliographique des connaissances et des travaux portant sur les matériaux composites, en particulier ceux à inclusions sphériques en forte proportion volumique. Nous nous intéressons à la modélisation de leur comportement thermo-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 thermo-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 de changement d'échelles formulés dans le cadre de la mécanique linéaire et non linéaire. La troisième partie est consacrée à la modélisation géométrique de ce type de microstructure et à leur caractérisation morphologique. Par « génération de microstructures », on entend deux choses :

- d'une part, générer un échantillon d'une microstructure de type inclusions/matrice, constituée d'un ensemble d'inclusions sphériques réparties aléatoirement dans l'espace. Il s'agit de tirer aléatoirement les coordonnées des centres des sphères en imposant une condition de non interpénétration, on parle également de *sphères dures*. Cette étape aboutit à la création d'un nuage de points définissant exactement la géométrie de l'échantillon si on l'accompagne de la valeur du rayon des sphères.
- D'autre part, discrétiser cette géométrie par un maillage éléments finis afin de pouvoir simuler son comportement à l'aide d'un code de calcul par éléments finis. Il s'agit de mailler les deux milieux constituant l'échantillon : les inclusions et la matrice. Plusieurs techniques sont classiquement utilisées pour réaliser de tels maillages.

Nous présentons également dans cette partie quelques outils de caractérisation morphologique permettant de décrire l'arrangement aléatoire des inclusions dans l'espace. Enfin, la quatrième partie propose une synthèse de travaux portant sur la modélisation numérique du comportement thermo-mécanique de composites à inclusions sphériques en général et sur les combustibles nucléaires à particules en particulier.

II.1 Méthodologie de la modélisation par changement d'échelles

II.1.1 Principes et représentation du milieu hétérogène

Afin de construire des modèles de comportement prédictifs, des efforts ont été entrepris depuis plusieurs années pour prendre en compte le caractère hétérogène de la matière à l'échelle microscopique dans la modélisation de son comportement macroscopique. La modélisation par changement d'échelles consiste à substituer un Milieu Homogène Équivalent (MHE) à un milieu hétérogène. Une telle 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.

Les propriétés du MHE sont calculées à partir de celles des constituants du milieu hétérogène et de paramètres relatifs à sa morphologie. Le principe du changement d'échelles est d'établir des relations entre les grandeurs physiques des deux échelles : l'échelle *microscopique* du milieu hétérogène et l'échelle *macroscopique* du milieu homogène. Ces relations permettent, ensuite, d'évaluer les propriétés effectives du milieu hétérogène. En pratique, elles sont établies sur un Volume Élémentaire Représentatif (VER) du milieu hétérogène. Ce VER se définit comme un volume « suffisamment » grand devant la taille des hétérogénéités de la microstructure et « suffisamment » petit devant la taille caractéristique de la structure. En supposant l'existence d'un tel volume, on définit le *comportement effectif* comme la réponse moyenne du VER à un chargement moyen. En pratique, les Volumes Élémentaires (VE) étudiés ne sont pas toujours représentatifs car leur réponse dépend du volume utilisé et du type de conditions aux limites employées pour appliquer les chargements. On parlera alors de *comportement apparent* pour désigner la réponse moyenne d'un VE soumis à un chargement moyen.

La démarche de modélisation par changement d'échelles se décompose classiquement en trois étapes (ZAOUI, 2000) :

La représentation. Il s'agit de définir le milieu hétérogène étudié (dans notre cas, un composite de type inclusions sphériques/matrice).

La localisation. Cette étape permet de déterminer les champs mécaniques, ou thermiques, induits par un chargement moyen (échelle macroscopique), dans le VE (échelle microscopique). On établit, ainsi, les relations de passage de l'échelle macroscopique à l'échelle microscopique.

L'homogénéisation. Cette dernière étape permet, grâce à l'analyse précédemment réalisée des champs mécaniques ou thermiques au sein du VE, d'en déterminer la réponse moyenne. On établit ainsi, les relations de passage de l'échelle microscopique à l'échelle macroscopique et on en déduit ses propriétés apparentes.

La figure II.1 illustre la démarche de la modélisation par changement d'échelles. Détaillons, maintenant, en quoi consiste chacune de ces étapes. Nous nous placerons dans le cadre de l'élasticité linéaire mais la démarche présentée est transposable à la thermique, ainsi qu'à d'autres domaines de la physique.

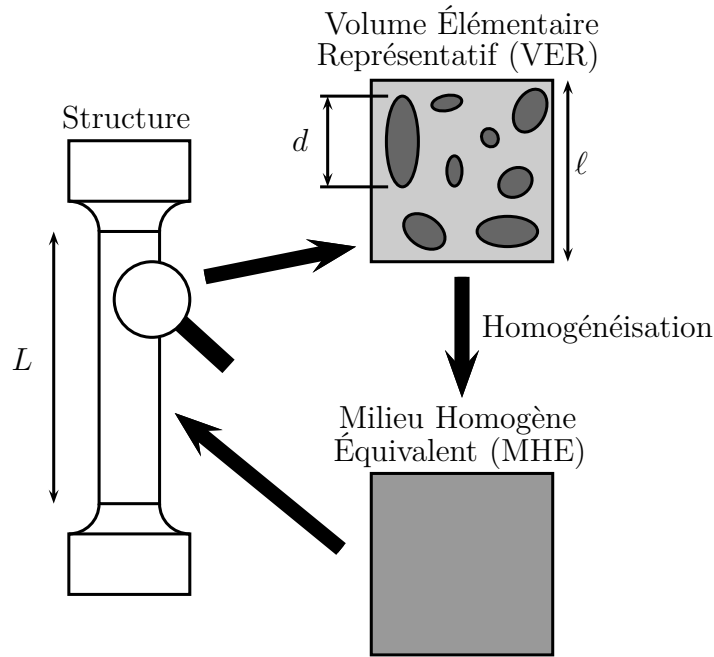


FIG. II.1 – Illustration de la modélisation par changement d'échelles.

L'étape de représentation consiste à définir un VE du milieu hétérogène considéré. Concrètement, il s'agit de définir ses constituants et de préciser leur répartition et leurs propriétés. Cette description achevée, il faut s'assurer que le VE obtenu est un VER du milieu hétérogène. Le VER se définit comme un élément de volume de la structure, ou échelle macroscopique, statistiquement représentatif du milieu hétérogène, ou échelle microscopique. En pratique, on considère les différentes longueurs caractéristiques du problème (ZAOUI, 2000) :

- d : la dimension caractéristique des hétérogénéités. Celle-ci ne doit pas être trop petite afin que l'hypothèse de milieu continu demeure valide.
- L : la dimension caractéristique de l'échelle macroscopique, c'est-à-dire celle de la structure à analyser.
- ℓ : la dimension du VER.

Par définition du VER, ces dimensions caractéristiques doivent vérifier la règle de séparation des échelles :

- $\ell \ll L$: condition nécessaire pour que le VER soit un point matériel de la structure ;
- $d \ll \ell$: condition nécessaire pour que le VER soit statistiquement représentatif du milieu hétérogène.

Dans le cas de milieux périodiques, cette dernière règle n'a pas lieu d'être vérifiée car le VER peut se réduire à une cellule de base de l'arrangement périodique ; l'étape de représentation conduit alors à une description déterministe du milieu hétérogène (ZAOUI, 2000). Dans le cas plus général des milieux aléatoires, la description des champs mécaniques, ainsi que celle de la géométrie, ne peut être déterministe : la détermination du VER se fait de manière statistique. Par exemple, bien que deux VE d'un milieu hétérogène aléatoire ne puissent être géométriquement identiques, leur comportement macroscopique doit être le même pour affirmer qu'il s'agit de deux VER.

II.1.2 Localisation et homogénéisation

L'étape de localisation consiste à analyser le comportement du VE sous diverses sollicitations. En mécanique, il s'agit de déterminer les champs « microscopiques » (ou locaux) $\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{x})$ et $\underline{\underline{\sigma}}(\underline{x})$, induits au sein du VE par un chargement « macroscopique » (ou global) $\underline{\underline{E}}, \underline{\underline{\Sigma}}$ donné.

Avant de poursuivre, nous rappelons que la moyenne volumique $\langle A \rangle_V$ d'un champ $A(\underline{x})$ défini en tout point \underline{x} d'un volume V est donnée par :

$$\langle A \rangle_V = \frac{1}{|V|} \int_V A(\underline{x}) dV. \quad (\text{II.1})$$

Par la suite, V désigne le volume du VE étudié, ∂V son contour, \underline{n} la normale extérieure à ∂V et \underline{x} le vecteur position d'un point du VE. Les grandeurs $\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{x})$ et $\underline{\underline{\sigma}}(\underline{x})$ désignent, respectivement, les déformations et les contraintes microscopiques. On définit les déformations $\underline{\underline{E}}$ et contraintes $\underline{\underline{\Sigma}}$ macroscopiques sur un volume V comme les moyennes volumiques des champs microscopiques $\underline{\underline{\varepsilon}}$ et $\underline{\underline{\sigma}}$:

$$\underline{\underline{E}} = \langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle_V \quad \text{et} \quad \underline{\underline{\Sigma}} = \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_V. \quad (\text{II.2})$$

Les tenseurs d'ordre 4 reliant les champs microscopiques et macroscopiques sont appelés *tenseurs de localisation*. On définit ainsi les tenseurs de localisation des déformations \mathbb{A} et des contraintes \mathbb{B} tels que :

$$\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{x}) = \mathbb{A}(\underline{x}) : \underline{\underline{E}} \quad \text{et} \quad \underline{\underline{\sigma}}(\underline{x}) = \mathbb{B}(\underline{x}) : \underline{\underline{\Sigma}}. \quad (\text{II.3})$$

En combinant les définitions précédentes aux équations (II.2), on montre que les tenseurs de localisation $\mathbb{A}(\underline{x})$ et $\mathbb{B}(\underline{x})$ doivent vérifier l'égalité suivante :

$$\langle \mathbb{A} \rangle_V = \mathbb{I} \quad \text{et} \quad \langle \mathbb{B} \rangle_V = \mathbb{I}. \quad (\text{II.4})$$

L'étape d'homogénéisation consiste à déterminer le comportement apparent du VE. Concrètement, il s'agit de calculer le tenseur d'élasticité, d'ordre 4, et noté \mathbb{C}^{app} , du VE. Deux approches peuvent être utilisées pour définir ce tenseur : l'approche « mécanique », et l'approche « énergétique » (ZAOUI, 2000).

L'approche mécanique définit \mathbb{C}^{app} comme le tenseur reliant directement la contrainte macroscopique $\underline{\underline{\Sigma}}$ à la déformation macroscopique $\underline{\underline{E}}$:

$$\underline{\underline{\Sigma}} = \mathbb{C}_{\text{méca}}^{\text{app}} : \underline{\underline{E}}. \quad (\text{II.5})$$

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

$$\left\langle \frac{1}{2} \underline{\underline{\varepsilon}} : \mathbb{C} : \underline{\underline{\varepsilon}} \right\rangle_V = \frac{1}{2} \underline{\underline{E}} : \mathbb{C}_{\text{éner}}^{\text{app}} : \underline{\underline{E}}, \quad (\text{II.6})$$

où \mathbb{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) :

$$\frac{1}{2} \langle \underline{\underline{\varepsilon}} : \underline{\underline{\sigma}} \rangle_V = \frac{1}{2} \underline{\underline{E}} : \underline{\underline{\Sigma}}. \quad (\text{II.7})$$

Cette condition peut également s'exprimer par une condition sur les déplacements et les vecteurs contrainte aux bords de V (HAZANOV et AMIEUR, 1995) :

$$\int_{\partial V} (\underline{\underline{u}} - \underline{\underline{E}} \cdot \underline{\underline{x}}) \cdot (\underline{\underline{t}} - \underline{\underline{\Sigma}} \cdot \underline{\underline{n}}) dS = 0. \quad (\text{II.8})$$

Ainsi, pour assurer l'équivalence du comportement effectif entre les définitions mécaniques et énergétiques, il faut vérifier des conditions particulières sur les déplacements et les vecteurs contrainte aux bords du VE, c'est-à-dire appliquer des conditions aux limites particulières.

II.1.3 Conditions aux limites (CL)

Plusieurs conditions aux limites vérifiant la condition de HILL (II.8) peuvent être appliquées. Deux types de conditions aux limites sont classiquement proposés dans la littérature (ZAOUI, 2000; BORNERT *et al.*, 2001a) : les conditions homogènes sur le contour (en déformation ou en contrainte) et les conditions périodiques. Il est également possible d'imposer des conditions mixtes, portant à la fois sur les déformations et les contraintes.

Conditions aux limites de déformation homogène sur le contour (CLDH)

Soit $\underline{\underline{E}}^0$ une déformation macroscopique. Les CLDH consistent à imposer le vecteur déplacement $\underline{\underline{u}}$ sur le bord du volume, tel que :

$$\underline{\underline{u}}(\underline{\underline{x}}) = \underline{\underline{E}}^0 \cdot \underline{\underline{x}} \quad \forall \underline{\underline{x}} \in \partial V. \quad (\text{II.9})$$

On vérifie alors que : $\underline{\underline{E}} = \langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle_V = \underline{\underline{E}}^0$. Ce résultat se démontre en appliquant le théorème de flux-divergence et en utilisant la relation de compatibilité des déformations.

Conditions aux limites de contrainte homogène sur le contour (CLCH)

Soit $\underline{\underline{\Sigma}}^0$ une contrainte macroscopique. Les CLCH consistent à imposer le vecteur contrainte $\underline{\underline{t}}$ sur le bord du volume, tel que :

$$\underline{\underline{t}}(\underline{\underline{x}}) = \underline{\underline{\sigma}}(\underline{\underline{x}}) \cdot \underline{\underline{n}} = \underline{\underline{\Sigma}}^0 \cdot \underline{\underline{n}} \quad \forall \underline{\underline{x}} \in \partial V. \quad (\text{II.10})$$

On vérifie alors que : $\underline{\underline{\Sigma}} = \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_V = \underline{\underline{\Sigma}}^0$. Ce résultat se démontre à l'aide du théorème de flux-divergence et de l'équation d'équilibre statique en l'absence de forces de volume.

Conditions aux limites périodiques (CLP)

Soit $\underline{\underline{E}}^0$ une déformation macroscopique. Les CLP consistent à imposer le vecteur déplacement $\underline{\underline{u}}$ sur le bord du volume, tel que :

$$\underline{\underline{u}}(\underline{\underline{x}}) = \underline{\underline{E}}^0 \cdot \underline{\underline{x}} + \underline{\underline{u}}'(\underline{\underline{x}}) \quad \forall \underline{\underline{x}} \in \partial V, \quad (\text{II.11})$$

où $\underline{\underline{u}}'(\underline{\underline{x}})$ est un champ de déplacement périodique, c'est-à-dire qu'il prend la même valeur en deux points homologues de ∂V . On impose également au vecteur contrainte $\underline{\underline{t}}(\underline{\underline{x}}) = \underline{\underline{\sigma}}(\underline{\underline{x}}) \cdot \underline{\underline{n}}$ d'être anti-périodique sur ∂V . On vérifie alors que : $\underline{\underline{E}} = \langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle_V = \underline{\underline{E}}^0$.

Conditions aux limites mixtes

Les conditions aux limites mixtes visent à vérifier la conditions de HILL (II.8) en imposant des CL sur les déplacements et les vecteurs contraintes. Plusieurs types de conditions mixtes sont proposées dans la littérature ; on citera notamment les conditions mixtes « orthogonales uniformes » (« orthogonal mixed uniform boundary conditions ») proposées par HAZANOV et AMIEUR (1995) ou les conditions mixtes « normales » proposées par GÉLÉBART *et al.* (2009).

Influence des conditions aux limites

En théorie, un VER est suffisamment grand pour que son comportement moyen ne dépende pas des CL utilisées pour son chargement. En pratique, on observe que les résultats obtenus sur des VE diffèrent selon les CL, 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). Cependant, cette convergence peut être lente et il convient de toujours analyser l'influence des CL sur le comportement apparent d'un VE. Ainsi, il est démontré que les conditions homogènes CLCH et CLDH fournissent un encadrement du comportement apparent $(\mathbb{C}_{\text{CLCH}}^{\text{app}} \leq \mathbb{C}^{\text{app}} \leq \mathbb{C}_{\text{CLDH}}^{\text{app}})^1$ et que les CLP, ou des conditions mixtes, donnent une meilleure estimation des propriétés apparentes par rapport aux conditions homogènes (HAZANOV et HUET, 1994; KANIT *et al.*, 2003)².

Les CLP sont ainsi largement utilisées pour analyser le comportement apparent de VE. Ces conditions sont souvent appliquées à un volume géométriquement périodique où des conditions de symétrie sur la frontière ∂V sont imposées. 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, les conditions périodiques n'impliquent aucune restriction sur la géométrie de la microstructure du VE étudié (ÖZDEMİR *et al.*, 2008). On trouvera, en annexe C page 127, les détails pour l'application de CLP sur des maillage périodiques et des maillages non périodiques.

II.1.4 Expression du tenseur d'élasticité apparent

En appliquant des conditions aux limites respectant la condition de HILL, le comportement apparent peut être obtenu à partir de sa définition par l'approche mécanique (II.5). En utilisant la définition des tenseurs de localisation des déformations et des contraintes (II.3), on peut faire les développements suivants :

$$\begin{aligned}
 \underline{\underline{\Sigma}} &= \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_V & \underline{\underline{E}} &= \langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle_V \\
 &= \langle \mathbb{C} : \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle_V & &= \langle \mathbb{S} : \underline{\underline{\sigma}} \rangle_V \\
 &= \langle \mathbb{C} : \mathbb{A} : \underline{\underline{E}} \rangle_V & &= \langle \mathbb{S} : \mathbb{B} : \underline{\underline{\Sigma}} \rangle_V \\
 &= \langle \mathbb{C} : \mathbb{A} \rangle_V : \underline{\underline{E}} & &= \langle \mathbb{S} : \mathbb{B} \rangle_V : \underline{\underline{\Sigma}} \\
 &= \mathbb{C}^{\text{app}} : \underline{\underline{E}} & &= \mathbb{S}^{\text{app}} : \underline{\underline{\Sigma}},
 \end{aligned} \tag{II.12}$$

¹Cette relation d'ordre sur les tenseurs des rigidités porte sur les formes quadratiques associées :

$\forall \underline{\underline{E}} \quad (\underline{\underline{E}} : \mathbb{C}_{\text{CLCH}}^{\text{app}} : \underline{\underline{E}}) \leq (\underline{\underline{E}} : \mathbb{C}^{\text{app}} : \underline{\underline{E}}) \leq (\underline{\underline{E}} : \mathbb{C}_{\text{CLDH}}^{\text{app}} : \underline{\underline{E}}).$

²L'estimation donnée par les CLP se situe « entre » les bornes fournies par les CLCH et CLDH.

d'où :

$$\mathbb{C}^{\text{app}} = \langle \mathbb{C} : \mathbb{A} \rangle_V \quad \text{et} \quad \mathbb{S}^{\text{app}} = \langle \mathbb{S} : \mathbb{B} \rangle_V \quad (\text{II.13})$$

où $\mathbb{S} = \mathbb{C}^{-1}$ désigne le tenseur des souplesses de la loi de comportement locale. Le comportement apparent est donc entièrement déterminé par la connaissance des tenseurs de localisation des déformations ou des contraintes. La figure II.2 résume la démarche de la modélisation multi-échelles dans son ensemble.

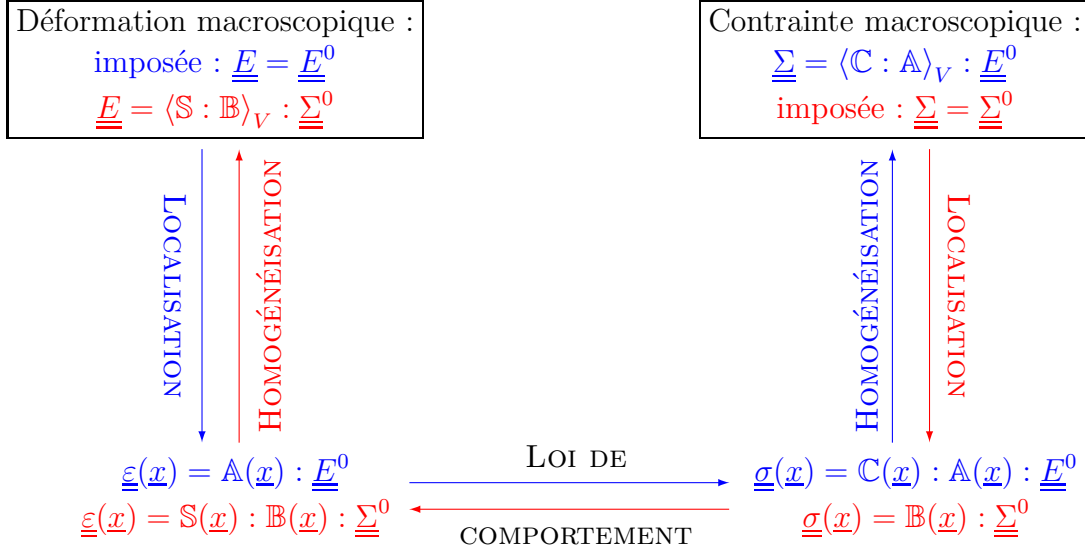


FIG. II.2 – Schéma illustrant la méthode de changement d'échelles en mécanique lorsque l'on impose la déformation macroscopique (trajet bleu) ou la contrainte macroscopique (trajet rouge). \mathbb{C} désigne le tenseur des rigidités et $\mathbb{S} = \mathbb{C}^{-1}$ le tenseur des souplesses.

En notant i l'indice de chaque phase du VE étudié et V_i leur volume, on définit les champs moyens par phase :

$$\underline{\underline{\varepsilon}}_i = \langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle_{V_i} \quad \text{et} \quad \underline{\underline{\sigma}}_i = \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_{V_i}. \quad (\text{II.14})$$

On associe à ces moyennes locales des tenseurs de localisation moyens par phase :

$$\mathbb{A}_i = \langle \mathbb{A} \rangle_{V_i} \quad \text{et} \quad \mathbb{B}_i = \langle \mathbb{B} \rangle_{V_i} \quad (\text{II.15})$$

tels que :

$$\underline{\underline{\varepsilon}}_i = \mathbb{A}_i : \underline{E} \quad \text{et} \quad \underline{\underline{\sigma}}_i = \mathbb{B}_i : \underline{\Sigma}. \quad (\text{II.16})$$

Le comportement apparent est obtenu grâce à l'équation (II.13), qui devient :

$$\mathbb{C}^{\text{app}} = \sum_{i=1}^n c_i \mathbb{C}_i : \mathbb{A}_i \quad \text{et} \quad \mathbb{S}^{\text{app}} = \sum_{i=1}^n c_i \mathbb{S}_i : \mathbb{B}_i, \quad (\text{II.17})$$

avec \mathbb{C}_i et \mathbb{S}_i les tenseurs des rigidités et des souplesses de la phase i , c_i sa fraction volumique et n le nombre de phases. Enfin, dans le cas particulier d'un milieu hétérogène constitué d'une matrice connexe et d'autres phases en inclusion, grâce à l'égalité sur la moyenne des tenseurs de localisation (II.4), on obtient, en notant m l'indice de la phase constituant la matrice :

$$\mathbb{C}^{\text{app}} = \mathbb{C}_m + \sum_{i=2}^n c_i (\mathbb{C}_i - \mathbb{C}_m) : \mathbb{A}_i \quad \text{et} \quad \mathbb{S}^{\text{app}} = \mathbb{S}_m + \sum_{i=2}^n c_i (\mathbb{S}_i - \mathbb{S}_m) : \mathbb{B}_i. \quad (\text{II.18})$$

II.1.5 Analogie en thermique

La démarche décrite précédemment peut être entreprise pour la modélisation multi-échelles de la conduction de la chaleur. La propriété effective, ou apparente, recherchée est alors le tenseur des conductivités thermiques. On peut observer les correspondances suivantes entre :

- le champ de température $T(\underline{x})$ et le champ de déplacements $\underline{u}(\underline{x})$;
- le champ de gradient de température $\underline{g}(\underline{x}) = \nabla(T(\underline{x}))$ et le champ de déformations $\underline{\underline{\epsilon}}(\underline{x})$;
- le champ de flux de chaleur $\underline{\phi}(\underline{x})$ et le champ de contraintes $\underline{\underline{\sigma}}(\underline{x})$;
- le tenseur des conductivités thermiques $\underline{\underline{\Lambda}}(\underline{x})$ traduisant la loi de comportement locale (loi de FOURIER) et le tenseur des rigidités $\mathbb{C}(\underline{x})$.

Les vecteurs gradient de température et flux de chaleur macroscopiques sont définis comme la moyenne volumique des même grandeurs microscopiques :

$$\underline{G} = \langle \underline{g} \rangle_V \quad \text{et} \quad \underline{\Phi} = \langle \underline{\phi} \rangle_V. \quad (\text{II.19})$$

On définit les tenseurs de localisation du gradient de température et du flux de chaleur, notés respectivement \underline{a} et \underline{b} , par :

$$\underline{g}(\underline{x}) = \underline{a}(\underline{x}) : \underline{G} \quad \text{et} \quad \underline{\phi}(\underline{x}) = \underline{b}(\underline{x}) : \underline{\Phi}. \quad (\text{II.20})$$

Le tenseur des conductivités thermiques apparent, noté $\underline{\underline{\Lambda}}^{\text{app}}$, relie les grandeurs macroscopiques :

$$\underline{\Phi} = -\underline{\underline{\Lambda}}^{\text{app}} \cdot \underline{G}. \quad (\text{II.21})$$

Il peut être obtenu en appliquant des conditions aux limites analogues aux conditions mécaniques.

Conditions aux limites de gradient de température homogène sur le contour (CLGH)

Soit \underline{G}^0 un gradient de température macroscopique homogène. Les CLGH consistent à imposer la température T sur le bord du volume telle que :

$$T(\underline{x}) = \underline{G}^0 \cdot \underline{x} \quad \forall \underline{x} \in \partial V. \quad (\text{II.22})$$

On vérifie alors que $\underline{G} = \langle \underline{g} \rangle_V = \underline{G}^0$.

Conditions aux limites de flux de chaleur homogène sur le contour (CLFH)

Soit $\underline{\Phi}^0$ un flux de chaleur macroscopique homogène. Les CLFH consistent à imposer le flux scalaire $q = \underline{\phi} \cdot \underline{n}$ sur le bord du volume tel que :

$$q(\underline{x}) = \underline{\Phi}^0 \cdot \underline{n} \quad \forall \underline{x} \in \partial V. \quad (\text{II.23})$$

On vérifie alors que $\underline{\Phi} = \langle \underline{\phi} \rangle_V = \underline{\Phi}^0$.

Conditions aux limites périodiques (CLP)

Soit \underline{G}^0 un gradient de température macroscopique homogène. Les CLP consistent à imposer la température T sur le bord du volume telle que :

$$T(\underline{x}) = \underline{G}^0 \cdot \underline{x} + T'(\underline{x}) \quad \forall \underline{x} \in \partial V. \quad (\text{II.24})$$

où $T'(\underline{x})$ est un champ de température périodique. On impose également au flux scalaire $q = \underline{\phi} \cdot \underline{n}$ d'être anti-périodique sur ∂V . On vérifie alors que $\underline{G} = \langle \underline{g} \rangle_V = \underline{G}^0$.

II.1.6 Remarques sur la notion de VER

Le VER est difficile à définir car il est fonction, en particulier, de la propriété étudiée. Différents critères sont fréquemment employés pour dimensionner le VER dans le cas des propriétés thermo-mécaniques. Un VER doit être tel que :

- ses propriétés moyennes n'évoluent plus lorsque ses dimensions augmentent ;
- son comportement moyen est indépendant des conditions aux limites appliquées ;
- son comportement moyen est identique pour différentes réalisations (différents tirages aléatoires de la microstructure).

Cette approche conduit à analyser l'évolution des propriétés apparentes de VE de taille croissante et de tester différentes conditions aux limites. Fixer la taille du VER en choisissant un VE satisfaisant toutes ces conditions peut s'avérer difficile et conduire à des VER de grande dimension (FOREST, 2004).

Une alternative est de mettre en œuvre une approche statistique en réalisant plusieurs VE de plus petites dimensions et en postulant que le comportement effectif du milieu hétérogène étudié peut être estimé en effectuant une moyenne statistique des comportements apparents de l'ensemble de ces réalisations. Une telle approche a été entreprise par KANIT *et al.* (2003).

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.

II.2 Présentation de quelques modèles analytiques de changement d'échelles

II.2.1 Modèles analytiques en élasticité linéaire

En élasticité linéaire, il est possible d'établir une expression analytique des tenseurs de localisation pour certains motifs simples afin d'explicitier les propriétés effectives du matériau hétérogène étudié. Quelques exemples sont présentés dans ce qui suit. Plusieurs modèles analytiques ont été développés sur la base des travaux d'ESHELBY (1957), qui a résolu ce qu'on appelle le « problème de l'inclusion ».

Tout d'abord, nous présentons les travaux d'ESHELBY (1957), puis différents modèles qui en sont dérivés et, plus particulièrement, le modèle auto-cohérent généralisé. Enfin, nous évoquons également une approche complémentaire à l'estimation des propriétés effectives du milieu hétérogène : celle de la recherche d'un encadrement de ses propriétés.

Problème de l'inclusion d'Eshelby

Dans le cadre de l'élasticité linéaire, ESHELBY (1957) a résolu le problème de l'équilibre mécanique d'une inclusion de forme ellipsoïdale, plongée dans une matrice infinie possédant les mêmes propriétés mécaniques que la matrice et soumise à une *déformation libre*.

Soit M un milieu élastique linéaire infini, appelé matrice, de rigidité \mathbb{C} , initialement soumis à aucune déformation, ni contrainte. Soit I un domaine ellipsoïdal fini de M appelé inclusion. On impose à cette inclusion, une déformation libre de contrainte et notée $\underline{\underline{\varepsilon}}_I^L$. On cherche la déformation dans l'inclusion et la matrice à l'équilibre. Le problème est illustré par la figure II.3.

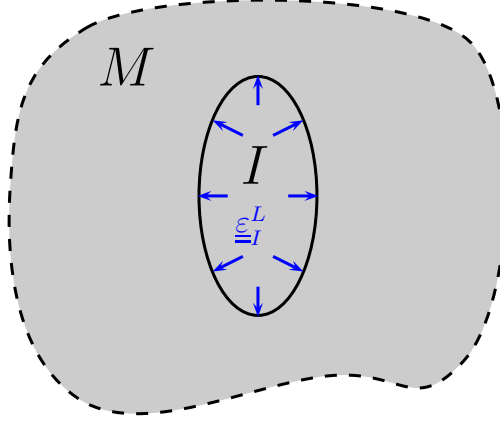


FIG. II.3 – Illustration du problème de l'inclusion.

ESHELBY montre que la déformation de l'inclusion $\underline{\underline{\varepsilon}}_I$ à l'équilibre est homogène et uniforme et qu'il existe un tenseur du 4^e ordre, noté \mathbb{S}^E , reliant la déformation libre à la déformation de l'inclusion :

$$\underline{\underline{\varepsilon}}_I = \mathbb{S}^E : \underline{\underline{\varepsilon}}_I^L. \quad (\text{II.25})$$

Le tenseur \mathbb{S}^E est appelé « tenseur d'ESHELBY ». Il dépend des propriétés mécaniques de la matrice (\mathbb{C}) et de la forme de l'inclusion. L'expression générale du tenseur d'ESHELBY est explicitée dans (MURA, 1987), ainsi que pour certaines formes d'inclusions particulières. Le cas de la sphère est détaillé par la suite. On montre également que la contrainte dans l'inclusion s'écrit :

$$\underline{\underline{\sigma}}_I = \mathbb{C} : \mathbb{S}^E : \underline{\underline{\varepsilon}}_I^L + \underline{\underline{p}} \quad \text{ou} \quad \underline{\underline{\sigma}}_I = \mathbb{C} : \underline{\underline{\varepsilon}}_I + \underline{\underline{p}} \quad (\text{II.26})$$

avec $\underline{\underline{p}} = -\mathbb{C} : \underline{\underline{\varepsilon}}_I^L$, la « contrainte de polarisation ».

La solution du problème de l'inclusion avec une déformation libre peut être étendue au cas où le milieu M est soumis à un état de déformation $\underline{\underline{E}}^0$ ou de contrainte $\underline{\underline{\Sigma}}^0$ homogène à l'infini. La déformation dans l'inclusion s'écrit alors :

$$\begin{aligned} \underline{\underline{\varepsilon}}_I &= \underline{\underline{E}}^0 + \mathbb{S}^E : \underline{\underline{\varepsilon}}_I^L \\ \text{ou} \quad \underline{\underline{\sigma}}_I &= \underline{\underline{\Sigma}}^0 + \mathbb{C} : (\mathbb{S}^E - \mathbb{I}) : \underline{\underline{\varepsilon}}_I^L. \end{aligned} \quad (\text{II.27})$$

En injectant dans la seconde équation de (II.27) l'expression de $\underline{\underline{\varepsilon}}_I^L$ obtenue dans la première, on obtient la relation suivante, appelée « loi d'interaction » (FRANÇOIS *et al.*, 1995) :

$$\underline{\underline{\sigma}}_I - \underline{\underline{\Sigma}}^0 = -\mathbb{C}^* : (\underline{\underline{\varepsilon}}_I - \underline{\underline{E}}^0) \quad (\text{II.28})$$

où : $\mathbb{C}^* = \mathbb{C} : \left((\mathbb{S}^E)^{-1} - \mathbb{I} \right)$, est appelé tenseur de HILL.

Extension du problème de l'inclusion au problème de l'hétérogénéité

Le problème de l'inclusion est équivalent à celui d'une inclusion hétérogène H , géométriquement identique à I , de rigidité \mathbb{C}_H sans déformation libre, plongée dans une matrice infinie M de rigidité \mathbb{C} , qui est soumise à une déformation homogène sur son contour $\underline{\underline{E}}^0$ (illustré par la figure II.4).

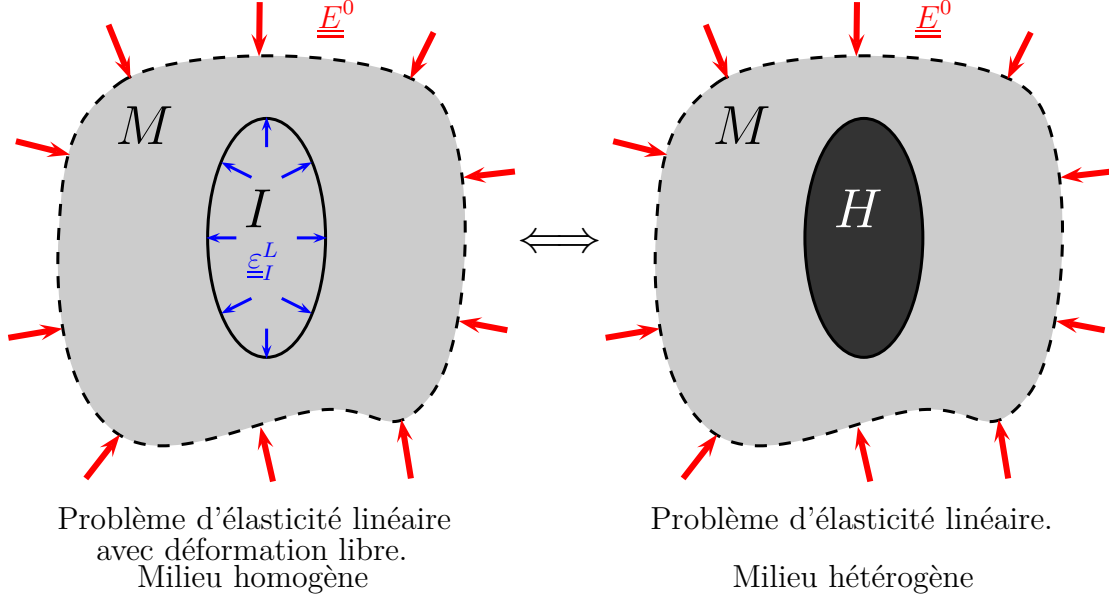


FIG. II.4 – Illustrations du problème de l'inclusion soumise à une déformation homogène et du problème de l'hétérogénéité.

En effet, la contrainte de polarisation $\underline{p} = -\mathbb{C} : \underline{\underline{\varepsilon}}_I^L$, qui apparaît dans le problème de l'inclusion, introduit une hétérogénéité de contrainte analogue au problème de l'hétérogénéité. L'équivalence des deux problèmes est établie par la relation suivante :

$$\begin{cases} \underline{\underline{\sigma}}_H = \mathbb{C}_H : \underline{\underline{\varepsilon}}_H = \mathbb{C} : \underline{\underline{\varepsilon}}_H + (\mathbb{C}_H - \mathbb{C}) : \underline{\underline{\varepsilon}}_H \\ \underline{\underline{\sigma}}_I = \mathbb{C} : \underline{\underline{\varepsilon}}_I - \mathbb{C} : \underline{\underline{\varepsilon}}_I^L \end{cases} \quad (\text{II.29})$$

$\underline{\underline{\varepsilon}}_H$ étant la déformation à l'équilibre dans l'hétérogénéité. En identifiant $\underline{\underline{\sigma}}_H$ à $\underline{\underline{\sigma}}_I$ et $\underline{\underline{\varepsilon}}_H$ à $\underline{\underline{\varepsilon}}_I$, on obtient, en développant :

$$\begin{aligned} -\mathbb{C} : \underline{\underline{\varepsilon}}_I^L &= (\mathbb{C}_H - \mathbb{C}) : \underline{\underline{\varepsilon}}_H \\ \underline{\underline{\varepsilon}}_I^L &= -\mathbb{C}^{-1} : (\mathbb{C}_H - \mathbb{C}) : \underline{\underline{\varepsilon}}_H. \end{aligned} \quad (\text{II.30})$$

Ainsi, en substituant $\underline{\underline{\varepsilon}}_I^L$ par son expression en fonction de $\underline{\underline{\varepsilon}}_H$, la solution du problème de l'hétérogénéité se déduit de l'équation (II.27) :

$$\begin{aligned} \underline{\underline{\varepsilon}}_H &= \underline{\underline{E}}^0 - \mathbb{S}^E : \mathbb{C}^{-1} : (\mathbb{C}_H - \mathbb{C}) : \underline{\underline{\varepsilon}}_H \\ &= \left(\mathbb{I} + \mathbb{S}^E : \mathbb{C}^{-1} : (\mathbb{C}_H - \mathbb{C}) \right)^{-1} : \underline{\underline{E}}^0. \end{aligned} \quad (\text{II.31})$$

Cette dernière expression fait apparaître le tenseur de localisation dans l'hétérogénéité :

$$\mathbb{A}_H = \left(\mathbb{I} + \mathbb{S}^E : \mathbb{C}^{-1} : (\mathbb{C}_H - \mathbb{C}) \right)^{-1}. \quad (\text{II.32})$$

Ce résultat est utilisé dans plusieurs modèles analytiques d'homogénéisation en élasticité linéaire que nous présentons par la suite. Ils consistent à remplacer le milieu M par un « milieu de référence » possédant des rigidités « judicieusement choisies ».

Cas de l'isotropie et de la sphère

Dans le cas d'une inclusion de forme sphérique plongée dans une matrice isotrope de module élastiques K et G , le tenseur d'ESHELBY s'écrit à l'aide de deux scalaires :

$$\mathbb{S}^E = \alpha \mathbb{K} + \beta \mathbb{J} \quad (\text{II.33})$$

avec

$$\alpha = \frac{3K}{3K + 4G} \quad \beta = \frac{6(K + 2G)}{5(3K + 4G)}. \quad (\text{II.34})$$

\mathbb{K} et \mathbb{J} sont les tenseurs d'ordre 4 permettant de projeter les parties sphériques et déviatoriques des tenseurs d'ordre 2 symétriques. En notant \mathbb{I} le tenseur identité d'ordre 4 opérant sur les tenseur d'ordre 2 symétriques, \mathbb{K} et \mathbb{J} sont définis ainsi :

$$\mathbb{I} = \mathbb{K} + \mathbb{J} \quad I_{ijkl} = \frac{1}{2}(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}) \quad K_{ijkl} = \frac{1}{3}\delta_{ij}\delta_{kl}. \quad (\text{II.35})$$

Les tenseurs \mathbb{K} et \mathbb{J} sont idempotents et ont les propriétés suivantes :

$$\begin{aligned} \mathbb{K} : \mathbb{K} &= \mathbb{K} & \text{et} & & \mathbb{J} : \mathbb{J} &= \mathbb{J} \\ \mathbb{K} : \mathbb{J} &= \mathbb{O} & \text{et} & & \mathbb{J} : \mathbb{K} &= \mathbb{O} \\ \mathbb{K} : \underline{\underline{\varepsilon}} &= \underline{\underline{\varepsilon}}^S = \frac{1}{3}Tr(\underline{\underline{\varepsilon}})\underline{\underline{I}} & \text{et} & & \mathbb{J} : \underline{\underline{\varepsilon}} &= \underline{\underline{\varepsilon}}^D = \underline{\underline{\varepsilon}} - \underline{\underline{\varepsilon}}^S. \end{aligned} \quad (\text{II.36})$$

Le résultat (II.33) peut alors être appliqué au problème de l'hétérogénéité. Supposons que l'hétérogénéité est isotrope, de modules élastiques K^H et G^H . En injectant le résultat (II.33) dans (II.32), on montre que le tenseur de localisation des déformations dans l'hétérogénéité s'écrit :

$$\mathbb{A}_H = \frac{1}{1 + \frac{\alpha(K^H - K)}{K}} \mathbb{K} + \frac{1}{1 + \frac{\beta(G^H - G)}{G}} \mathbb{J}. \quad (\text{II.37})$$

Modèles de changement d'échelles basés sur le problème de l'inclusion

Différents modèles de changement d'échelles ont été dérivés du problème de l'hétérogénéité. Le principe est de substituer différents « milieux de référence » au milieu M . On obtient ainsi les schémas des « distributions diluées », « auto-cohérent » ou, encore, « l'estimation de MORI et TANAKA ». Une comparaison des résultats obtenus par ces différentes méthodes est donnée par POTTIER (1998). Dans les paragraphes suivants, on considère un matériau hétérogène constitué de n phases. Dans ce qui suit, les différentes hétérogénéités seront nommées inclusions.

Schéma des distributions diluées : ce schéma s'applique aux milieux hétérogènes constitués d'inclusions dans une matrice (phase 1). On considère que chaque inclusion (phases 2 à n) se comporte comme si elle était seule noyée dans la matrice de rigidité \mathbb{C}_m . Il s'agit donc d'appliquer le résultat du problème de l'hétérogénéité (II.32) à chaque inclusion afin d'obtenir les tenseurs de localisation de chaque phase :

$$\mathbb{A}_i = \left(\mathbb{I} + \mathbb{S}_i^E : \mathbb{C}_m^{-1} : (\mathbb{C}_i - \mathbb{C}_m) \right)^{-1}. \quad (\text{II.38})$$

Le comportement homogénéisé est obtenu grâce au tenseur des rigidités effectif qui s'écrit, d'après la relation (II.18) :

$$\mathbb{C}^{\text{DD}} = \mathbb{C}_m + \sum_{r=2}^n c_r (\mathbb{C}_r - \mathbb{C}_m) : \left(\mathbb{I} + \mathbb{S}_i^E : \mathbb{C}_m^{-1} : (\mathbb{C}_i - \mathbb{C}_m) \right)^{-1}. \quad (\text{II.39})$$

Le schéma des distributions diluées ne prend pas en compte les interactions entre les inclusions. Il est donc limité à de faibles fractions volumiques d'inclusions.

Schéma auto-cohérent : chaque phase du matériau est successivement assimilée à une inclusion ellipsoïdale, qui est noyée dans un milieu infini possédant les propriétés du MHE recherché (figure II.5).

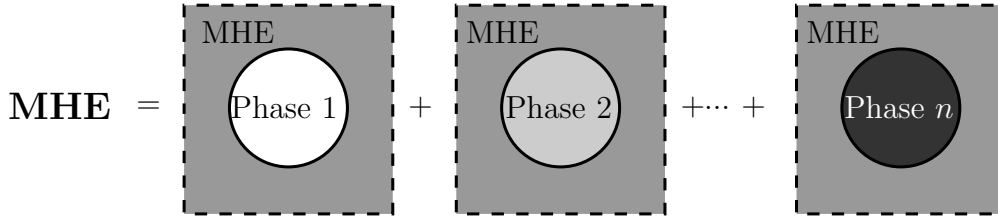


FIG. II.5 – Illustration du principe du schéma auto-cohérent.

Ce modèle est très utilisé pour les matériaux n'ayant pas de phase jouant un rôle privilégié (pas de matrice), comme, par exemple, les matériaux polycristallins (ZAOUI, 2000). Le tenseur de localisation de la phase i s'écrit, d'après (II.32) :

$$\mathbb{A}_i = \left(\mathbb{I} + \mathbb{S}_i^E : (\mathbb{C}^{\text{AC}})^{-1} : (\mathbb{C}_i - \mathbb{C}^{\text{AC}}) \right)^{-1}. \quad (\text{II.40})$$

D'où, selon (II.17), le tenseur des rigidités homogénéisé :

$$\mathbb{C}^{\text{AC}} = \sum_{i=1}^n c_i \mathbb{C}_i : \left(\mathbb{I} + \mathbb{S}_i^E : (\mathbb{C}^{\text{AC}})^{-1} : (\mathbb{C}_i - \mathbb{C}^{\text{AC}}) \right)^{-1}. \quad (\text{II.41})$$

La relation (II.41) est une équation implicite car \mathbb{C}^{AC} apparaît de part et d'autre du signe égal. Généralement, il n'est pas possible d'expliciter \mathbb{C}^{AC} à partir de cette équation. Le problème est donc résolu de manière numérique.

Estimation de Mori et Tanaka (Mori et Tanaka, 1973; Benveniste, 1987) : ce schéma s'applique à des milieux hétérogènes constitués d'inclusions dans une matrice. Il fait l'hypothèse que les inclusions sont réparties de manière isotrope et se comportent, en moyenne, comme des inclusions isolées dans une matrice infinie, soumise, à l'infini à la déformation moyenne de la matrice $\underline{\underline{\varepsilon}}_m$ (une inconnue du problème). La déformation de chaque inclusion est alors liée à la déformation moyenne de la matrice par des « pseudo-tenseurs de localisation » \mathbb{T}_i , solution du problème de l'hétérogénéité (II.32) :

$$\underline{\underline{\varepsilon}}_i = \mathbb{T}_i : \underline{\underline{\varepsilon}}_m \quad (\text{II.42})$$

avec : $\mathbb{T}_i = \left(\mathbb{I} + \mathbb{S}_i^E : \mathbb{C}_m^{-1} : (\mathbb{C}_i - \mathbb{C}_m) \right)^{-1}$. Le tenseur de localisation de chaque phase s'écrit alors :

$$\mathbb{A}_i = \mathbb{T}_i : \left(\sum_{j=1}^n c_j \mathbb{T}_j \right)^{-1} \quad (\text{II.43})$$

et le tenseur des rigidités homogénéisé, d'après (II.18) :

$$\mathbb{C}^{\text{MT}} = \mathbb{C}_m + \sum_{i=2}^n c_i (\mathbb{C}_i - \mathbb{C}_m) : \mathbb{T}_i : \left(\sum_{j=1}^n c_j \mathbb{T}_j \right)^{-1}. \quad (\text{II.44})$$

Le calcul du comportement effectif est explicite, contrairement au modèle auto-cohérent, car le milieu de référence est connu (la matrice). Les interactions entre les inclusions sont prises en compte mais de manière simplifiée. Ainsi, ce modèle ne s'applique correctement que lorsque la fraction volumique d'inclusions reste modérée, typiquement, inférieure à 25 %.

Schéma auto-cohérent généralisé : 3-phases et $(n + 1)$ -phases

Le schéma auto-cohérent généralisé trouve son origine dans les travaux d'HASHIN et SHTRIKMAN (1961, 1963) sur l'encadrement des propriétés élastiques effectives de composites biphasés, constitués d'inclusions sphériques dispersées de manière isotrope dans une matrice. Le milieu hétérogène est modélisé par un assemblage de sphères concentriques homothétiques, composées d'une inclusion recouverte d'une couche de matrice telle que les proportions de chaque phase dans cet assemblage soient les mêmes que dans le composite (voir figure II.6). HASHIN (1962) aboutit, ainsi, à une expression analytique du module de compressibilité effectif du milieu hétérogène.

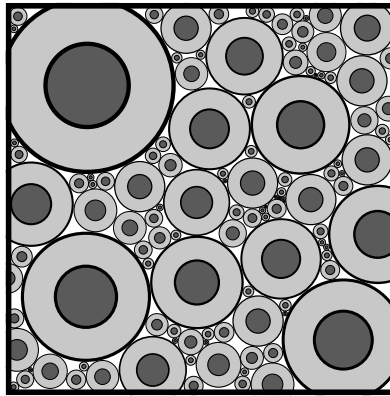


FIG. II.6 – Assemblage de sphères concentriques d'HASHIN.

Afin d'obtenir le module de cisaillement effectif, CHRISTENSEN et LO (1979) réinterprétèrent le modèle d'HASHIN et SHTRIKMAN par une approche de type auto-cohérente, en remplaçant l'assemblage de sphères concentriques par une sphère composite (inclusion sphérique recouverte d'une couche de matrice), entourée d'un milieu infini possédant les propriétés du MHE recherché (voir figure II.7). Ce modèle, généralement appelé modèle « auto-cohérent 3-phases » ou « auto-cohérent généralisé », conduit à la même expression du module de compressibilité que

le modèle d'HASHIN et SHTRIKMAN mais offre, de plus, l'expression analytique de son module de cisaillement. Ce modèle est également appliqué à la thermique par HASHIN et SHTRIKMAN (1962) pour estimer la conductivité thermique.

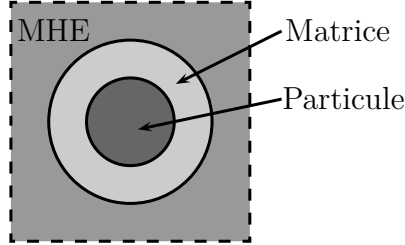


FIG. II.7 – Motif élémentaire du modèle auto-cohérent 3-phases.

Le modèle auto-cohérent 3-phases a finalement été étendu au cas de composites à inclusions multi-couches par HERVÉ et ZAOUI (1993). Les auteurs établissent une solution semi-analytique du problème d'une sphère à n couches concentriques plongée dans un milieu infini (phase $n+1$) où chacune des phases possède un comportement isotrope de module de compressibilité K_i et de module de cisaillement G_i . Cette solution est alors utilisée pour estimer le comportement effectif d'un composite constitué d'inclusions à $(n-1)$ -couches dispersées dans une matrice, en considérant le milieu infini comme le MHE recherché et où la $n^{\text{ième}}$ représente la matrice. Ce modèle est appelé « modèle auto-cohérent $(n+1)$ -phases ». Son principe est illustré par la figure II.8.

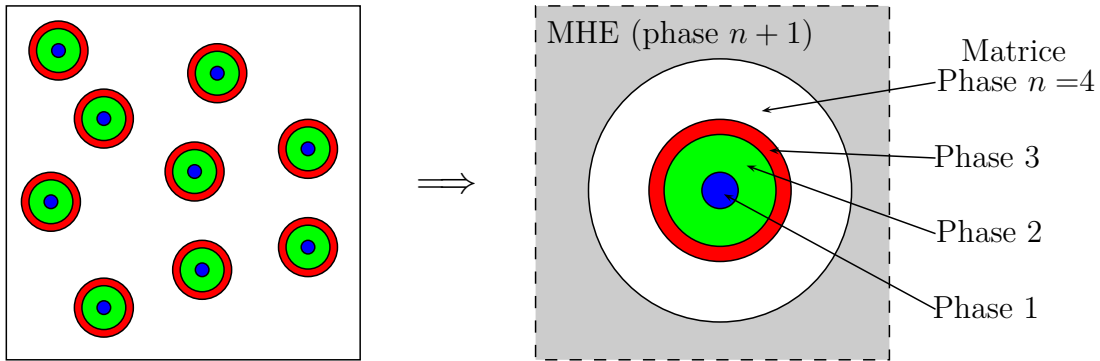


FIG. II.8 – Illustration du principe du modèle auto-cohérent $(n+1)$ -phases, avec $n=4$.

Le module de compressibilité effectif $K_{(n)}^{\text{ACN}}$ du composite est obtenu par une formule de récurrence :

$$K_{(n)}^{\text{ACN}} = K_n + \frac{R_{n-1}^3/R_n^3}{\frac{1}{K_{(n-1)}^{\text{ACN}} - K_n} + \frac{3(R_n^3 - R_{n-1}^3)}{R_n^3} \frac{1}{3K_n + 4G_n}} \quad (\text{II.45})$$

où R_n désigne le rayon extérieur de la phase n . K_n et G_n désignent les modules d'élasticité de la phase n . Le module de cisaillement $G_{(n)}^{\text{ACN}}$ est exprimé par une équation de récurrence du second degré, qui peut être résolue numériquement :

$$A \left(\frac{G_{(n)}^{\text{ACN}}}{G_n} \right)^2 + B \left(\frac{G_{(n)}^{\text{ACN}}}{G_n} \right) + C = 0. \quad (\text{II.46})$$

où A , B et C sont des coefficients calculés en fonction de R_n , ν_n et $G_{(n-1)}^{\text{ACN}}$. Le cas où $n = 2$ (milieu biphasé) aboutit au même résultat que le modèle auto-cohérent 3-phases. Ce modèle a également été étendu, par HERVÉ (2002), au comportement thermique et thermo-élastique, afin d'estimer la conductivité thermique, le coefficient de dilatation thermique et la chaleur massique d'un composite de type inclusions à n couches/matrice.

Approche par motifs morphologiques représentatifs et hétérogénéités intra-phases

STOLZ et ZAOUÏ (1991) ont généralisé la démarche d'HASHIN en introduisant la notion de « Motif Morphologique Représentatif » (MMR). Le matériau hétérogène est modélisé par un assemblage de motifs, qui peuvent avoir une géométrie quelconque mais sont localement représentatifs de la microstructure étudiée. L'utilisation d'un assemblage de plusieurs MMR permet de décrire la présence de plusieurs types de morphologies au sein de la microstructure. L'assemblage de sphères composites d'HASHIN apparaît alors comme un cas particulier de microstructure pouvant être décrite avec un seul MMR (sphère composite plongée dans un milieu infini). Plus de précisions sur cette approche sont fournies dans les travaux de BORNERT *et al.* (1994, 1996).

L'hétérogénéité des champs mécaniques locaux au sein des constituants de la microstructure peut être approchée par l'information locale extraite des MMR utilisés, si ces motifs fournissent cette information. Cependant, la pertinence des informations locales données par le MMR vis-à-vis de la distribution réelle des déformations n'est pas assurée. Ainsi, dans (BORNERT *et al.*, 1994) et (BORNERT, 1996) l'hétérogénéité de déformation de microstructures métalliques biphasées (fer/argent et fer/cuivre) est comparée à celle calculée dans la sphère composite du modèle auto-cohérent 3-phases. Le principal résultat est que les distributions de déformation équivalente calculées par le modèle 3-phases sont plus resserrées que celles mesurées expérimentalement. L'assemblage de sphères composites d'HASHIN ne peut donc pas rendre compte de la richesse des microstructures biphasées testées car il nivelle trop les fluctuations locales des déformations.

Les mêmes auteurs proposent alors d'utiliser un assemblage de plusieurs MMR pour décrire les « fluctuations de concentration » et les « inversions locales de configuration ». Les fluctuations de concentration traduisent les variations locales de fraction volumique de matrice. Elles sont modélisées en additionnant deux ou plusieurs motifs du modèle auto-cohérent 3-phases, dans lesquels l'épaisseur de matrice varie en accord avec les fluctuations observées. Les inversions locales de configuration traduisent le fait que, dans certaines zones du VER, les rôles des phases matrice et inclusions sont échangés. Ceci est modélisé en additionnant deux motifs du modèle auto-cohérent 3-phases où la position des constituants dans la sphère composite sont échangés. Ces modifications n'ont que peu d'effets sur les distributions de déformation équivalente, qui demeurent toujours différentes des distributions mesurées expérimentalement.

Encadrement des propriétés effectives

La détermination de bornes ou d'encadrements des propriétés effectives de milieux hétérogènes est une approche complémentaire à la recherche d'estimation de leur comportement effectif. La justification de la nature de borne est obtenue par des considérations énergétiques.

Bornes du premier ordre de Voigt et Reuss : l'encadrement le plus simple est offert par les bornes de VOIGT et REUSS. La borne de VOIGT est obtenue en supposant que le champ de déformation microscopique est uniforme dans tout le volume. Il est donc égal à la déformation macroscopique : $\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{x}) = \underline{\underline{E}}$. Dans ce cas, le tenseur de localisation des déformations est réduit à l'identité $\mathbb{A}(\underline{x}) = \mathbb{I}$. En appliquant la relation (II.17), l'expression du tenseur des rigidités effectif est alors donnée par la moyenne arithmétique des tenseurs des rigidités :

$$\mathbb{C}^{\text{Voigt}} = \sum_{i=1}^n c_i \mathbb{C}_i = \langle \mathbb{C} \rangle_V. \quad (\text{II.47})$$

On obtient, ainsi, une borne supérieure des rigidités effectives du milieu hétérogène. La borne de REUSS est la borne duale de celle de VOIGT. Elle est obtenue en supposant que le champ de contrainte microscopique est uniforme dans tout le volume. Il est donc égal à la contrainte macroscopique : $\underline{\underline{\sigma}}(\underline{x}) = \underline{\underline{\Sigma}}$. Dans ce cas, le tenseur de localisation des contraintes est réduit à l'identité $\mathbb{B}(\underline{x}) = \mathbb{I}$. En appliquant la relation (II.17) au tenseur des souplesses, nous obtenons :

$$\mathbb{S}^{\text{Reuss}} = \sum_{i=1}^n c_i \mathbb{S}_i = \langle \mathbb{S} \rangle_V = \langle \mathbb{C}^{-1} \rangle_V^{-1} \quad \text{d'où} \quad \mathbb{C}^{\text{Reuss}} = \langle \mathbb{C}^{-1} \rangle_V^{-1} \quad (\text{II.48})$$

soit la borne inférieure des rigidités effectives du milieu hétérogène, associée à la borne supérieure de VOIGT. Les bornes de VOIGT et REUSS des rigidités effectives sont donc formées par les moyennes arithmétique et harmonique des rigidités du matériau :

$$\langle \mathbb{C}^{-1} \rangle_V^{-1} \leq \mathbb{C}^{\text{eff}} \leq \langle \mathbb{C} \rangle_V. \quad (\text{II.49})$$

En thermique, le même type d'encadrement de la conductivité effective est obtenu par les bornes de WIENER (TORQUATO, 2002) :

$$\langle \lambda^{-1} \rangle_V^{-1} \leq \Lambda^{\text{eff}} \leq \langle \lambda \rangle_V. \quad (\text{II.50})$$

En élasticité linéaire et en thermique, ces deux bornes offrent un encadrement toujours valide du comportement effectif du milieu considéré, souvent utile pour vérifier la validité d'un modèle. Cependant, cet encadrement s'avère souvent trop large pour être suffisant à l'estimation des propriétés effectives.

Bornes du second ordre : Hashin et Shtrikman (1963) : en supposant isotrope la répartition spatiale des constituants, on peut construire des bornes plus resserrées que les bornes de VOIGT et REUSS : ce sont les bornes d'HASHIN et SHTRIKMAN. Elles s'obtiennent à partir de la solution du problème d'ESHELBY, en affectant successivement à la matrice les propriétés de la phase la plus rigide ou la plus souple (relation d'ordre au sens des formes quadratiques associées, voir note au bas de la page 10) (FRANÇOIS *et al.*, 1995).

La borne supérieure est obtenue en affectant à la matrice le tenseur des rigidités \mathbb{C}_{max} :

$$\mathbb{C}^{\text{HS}^+} = \langle \mathbb{C} : \mathbb{A}^+ \rangle_V : \langle \mathbb{A}^+ \rangle_V^{-1}, \quad (\text{II.51})$$

avec $\mathbb{A}^+ = (\mathbb{C} + \mathbb{C}_{\text{max}}^*)^{-1} : (\mathbb{C}_{\text{max}} + \mathbb{C}_{\text{max}}^*)$ et $\mathbb{C}_{\text{max}}^* = \mathbb{C}_{\text{max}} : \left((\mathbb{S}_{\text{max}}^E)^{-1} - \mathbb{I} \right)$. De la même façon, en affectant la rigidité \mathbb{C}_{min} à la matrice, on obtient la borne inférieure :

$$\mathbb{C}^{\text{HS}^-} = \langle \mathbb{C} : \mathbb{A}^- \rangle_V : \langle \mathbb{A}^- \rangle_V^{-1}, \quad (\text{II.52})$$

avec $\mathbb{A}^- = (\mathbb{C} + \mathbb{C}_{\text{min}}^*)^{-1} : (\mathbb{C}_{\text{min}} + \mathbb{C}_{\text{min}}^*)$ et $\mathbb{C}_{\text{min}}^* = \mathbb{C}_{\text{min}} : \left((\mathbb{S}_{\text{min}}^E)^{-1} - \mathbb{I} \right)$.

Cas des matériaux biphasés

Dans ce paragraphe, nous considérons le cas particulier d'un matériau constitué de deux phases. Il est possible, d'une part, d'écrire de manière plus explicite l'expression des bornes d'HASHIN et SHTRIKMAN et, d'autre part, de construire un encadrement plus précis du comportement effectif, qui tient compte de la morphologie des phases à l'aide des bornes du troisième ordre. Il est également possible de construire une estimation du comportement effectif du troisième ordre.

Encadrement par les bornes d'Hashin et Shtrikman : dans le cas d'un matériau biphasé, l'encadrement d'HASHIN et SHTRIKMAN est donné par les expressions suivantes pour le module de compressibilité K et le module de cisaillement G (TORQUATO, 2002) :

$$K^{\text{HS}+/-} = \langle K \rangle - \frac{c_1 c_2 (K_1 - K_2)^2}{\langle \tilde{K} \rangle + \frac{4}{6} G_i} \quad \text{avec } i = 1 \text{ ou } 2, \quad (\text{II.53})$$

$$G^{\text{HS}+/-} = \langle G \rangle - \frac{c_1 c_2 (G_1 - G_2)^2}{\langle \tilde{G} \rangle + H_i} \quad \text{avec } i = 1 \text{ ou } 2, \quad (\text{II.54})$$

avec :

$$H_i = G_i \frac{\frac{3}{2} K_i + \frac{4}{3} G_i}{K_i + 2G_i},$$

et où, pour toute propriété P valant P_1 dans la phase 1 et P_2 dans la phase 2 :

$$\begin{aligned} \langle P \rangle &= c_1 P_1 + (1 - c_1) P_2, \\ \langle \tilde{P} \rangle &= c_1 P_2 + (1 - c_1) P_1. \end{aligned}$$

Ces bornes trouvent également leur expression en thermique pour la conductivité (TORQUATO, 2002) :

$$\Lambda^{\text{HS}+/-} = \langle \lambda \rangle - \frac{c_1 c_2 (\lambda_1 - \lambda_2)^2}{\langle \tilde{\lambda} \rangle + 2\lambda_i} \quad \text{avec } i = 1 \text{ ou } 2. \quad (\text{II.55})$$

Bornes du troisième ordre : les encadrements de VOIGT/REUSS et d'HASHIN/SHTRIKMAN ne dépendent que des fractions volumiques de chacun des constituants ; ils ne contiennent donc pas compte de la distribution spatiale des constituants. Cependant, il est possible de construire des encadrements intégrant plus d'informations : c'est le but des bornes du troisième ordre. Pour un composite biphasé, ces bornes s'écrivent sur les modules d'élasticité K et G (JEULIN, 2002) :

$$K^{3o+} = \Lambda \left(\langle G \rangle_\zeta \right) \quad \text{et} \quad K^{3o-} = \Lambda \left(\left\langle \frac{1}{G} \right\rangle_\zeta^{-1} \right). \quad (\text{II.56})$$

$$G^{3o+} = \Gamma \left(\frac{\phi}{6} \right) \quad \text{et} \quad G^{3o-} = \Gamma \left(\frac{1}{6\psi} \right). \quad (\text{II.57})$$

avec :

$$\begin{aligned}\Lambda(x) &= \left\langle \frac{1}{K + \frac{4}{3}x} \right\rangle^{-1} - \frac{4}{3}x \quad \text{et} \quad \Gamma(x) = \left\langle \frac{1}{G + x} \right\rangle^{-1} - x, \\ \phi &= \frac{10 \langle G \rangle^2 \langle K \rangle_\zeta + 5 \langle G \rangle \langle 3G + 2K \rangle \langle G \rangle_\zeta + \langle 3K + G \rangle^2 \langle G \rangle_\eta}{(K + 2G)^2}, \\ \psi &= \frac{10 \langle K \rangle^2 \langle 1/K \rangle_\zeta + 5 \langle G \rangle \langle 3G + 2K \rangle \langle 1/G \rangle_\zeta + \langle 3K + G \rangle^2 \langle 1/G \rangle_\eta}{(9K + 8G)^2},\end{aligned}$$

et où, pour toute propriété P valant P_1 dans la phase 1 et P_2 dans la phase 2 :

$$\begin{aligned}\langle P \rangle_\zeta &= \zeta_1 P_1 + (1 - \zeta_1) P_2, \\ \langle P \rangle_\eta &= \eta_1 P_1 + (1 - \eta_1) P_2.\end{aligned}$$

Les grandeurs ζ_1 et η_1 sont des paramètres sans unité, compris entre 0 et 1, caractérisant la morphologie de la phase 1³. Ils dépendent des fonctions de corrélation $S_1^{(1)}$, $S_2^{(1)}$ et $S_3^{(1)}$ ⁴. Les paramètres ζ_1 et η_1 ont été approchés numériquement pour différents schémas booléens (JEULIN, 2002; TORQUATO, 1991, 2002). Ainsi, pour le schéma booléen des sphères dures, où la phase 1 correspond aux sphères, on peut utiliser l'estimation suivante (JEULIN, 2002) :

$$\begin{aligned}\zeta_1(c_1) &= 0.21068c_1 - 0.04693c_1^2 + 0.00247c_1^3 \\ \eta_1(c_1) &= 0.48274c_1\end{aligned} \quad \text{pour } c_1 \leq 0.6. \quad (\text{II.58})$$

En thermique, ces bornes s'écrivent (TORQUATO, 2002) :

$$\Lambda^{3o+} = \langle \lambda \rangle - \frac{c_1 c_2 (\lambda_1 - \lambda_2)^2}{\langle \tilde{\lambda} \rangle + 2 \langle \lambda \rangle_\zeta} \quad \text{et} \quad \Lambda^{3o-} = \langle \lambda \rangle - \frac{c_1 c_2 (\lambda_1 - \lambda_2)^2}{\langle \tilde{\lambda} \rangle + 2 \langle \lambda^{-1} \rangle_\zeta^{-1}}. \quad (\text{II.59})$$

Remarques : Pour le module de compressibilité et la conductivité thermique, en prenant $\zeta_1 = 0$ ($\zeta_1 = 1$), les bornes du troisième ordre de K sont égales entre elles et correspondent à la borne inférieure (supérieure) d'HASHIN et SHTRIKMAN. De même, pour le module de cisaillement, si $\eta_1 = \zeta_1 = 0$ ($\eta_1 = \zeta_1 = 1$) et en faisant tendre K_1 et K_2 vers l'infini, les bornes du troisième ordre de G sont égales entre elles et correspondent à la borne inférieure (supérieure) d'HASHIN et SHTRIKMAN.

Estimation du troisième ordre du comportement effectif (Torquato, 1997, 1998) :

TORQUATO (1998) a proposé une expression des propriétés mécaniques effectives d'un milieu hétérogène biphasé quelconque. L'expression du tenseur des rigidités effectif est donnée sous la forme d'un développement en série. Cette expression se simplifie grandement dans le cas des milieux macroscopiquement isotropes (TORQUATO, 1998) pour aboutir à une expression des modules de compressibilité et de cisaillement effectifs sous forme de séries, où chacun des termes successifs ajoutent plus d'information sur la morphologie du milieu hétérogène (il s'agit d'un développement d'un terme de perturbation autour des propriétés de la structure idéale de

³On trouvera une définition des paramètres ζ_1 et η_1 dans les références (TORQUATO, 1991, 1997, 1998, 2002; JEULIN, 2002).

⁴ $\forall n \in \mathbb{N}$ la fonction $S_n^{(i)}(\underline{x}_1, \dots, \underline{x}_n)$ représente la probabilité que n points $\underline{x}_1, \dots, \underline{x}_n$ appartiennent à la phase i .

sphères composites d'HASHIN (TORQUATO, 1997)).

Dans la suite de ce paragraphe, on désignera par l'indice e les propriétés effectives. Il est utile, pour la suite, d'introduire les variables réduites suivantes :

$$\kappa_{(i,j)} = \frac{K_i - K_j}{K_i + \frac{4}{3}G_j} \quad \text{où } i, j \in \{1, 2, e\} \quad (\text{II.60})$$

$$\mu_{(i,j)} = \frac{G_i - G_j}{G_i + \frac{G_j(\frac{3}{2}K_j + \frac{4}{3}G_j)}{K_j + 2G_j}} \quad \text{où } i, j \in \{1, 2, e\}. \quad (\text{II.61})$$

Les modules effectifs K_e et G_e sont obtenus à partir de développements en série suivant (TORQUATO, 1998) :

$$c_1^2 \frac{\kappa_{(1,2)}}{\kappa_{(e,2)}} = c_1 - \sum_{n=3}^{\infty} C_n^{(1)} \quad (\text{II.62})$$

$$c_1^2 \frac{\mu_{(1,2)}}{\mu_{(e,2)}} = c_1 - \sum_{n=3}^{\infty} D_n^{(1)} \quad (\text{II.63})$$

où les termes $C_n^{(1)}$ et $D_n^{(1)}$ dépendent des fonctions de corrélation à n points $S_1^{(1)}, \dots, S_n^{(1)}$ (voir la note au bas de la page 23). Ces fonctions dépendent de la morphologie de la microstructure et permettent d'intégrer cette information dans l'estimation des propriétés effectives. Cependant, leur expression, très complexe, est difficile à calculer pour une microstructure donnée. TORQUATO (1997, 1998) propose alors de tronquer les séries (II.62) et (II.63) aux premiers termes $C_3^{(1)}$ et $D_3^{(1)}$ dont l'expression est donnée explicitement par :

$$\frac{C_3^{(1)}}{c_1} = \frac{10G_2\kappa_{(1,2)}\mu_{(1,2)}}{3(K_2 + 2G_2)}(1 - c_1)\zeta_1 \quad (\text{II.64})$$

$$\begin{aligned} \frac{D_3^{(1)}}{c_1} = & \frac{2G_2\kappa_{(1,2)}\mu_{(1,2)}}{3(K_2 + 2G_2)}(1 - c_1)\zeta_1 + \frac{5G_2(2K_2 + 3G_2)\mu_{(1,2)}^2}{6(K_2 + 2G_2)^2}(1 - c_1)\zeta_1 \\ & + \frac{1}{6} \left[\frac{3K_2 + G_2}{K_2 + 2G_2} \right]^2 \mu_{(1,2)}^2 (1 - c_1)\eta_1. \end{aligned} \quad (\text{II.65})$$

Les fonctions ζ_1 et η_1 sont les mêmes que celles intervenant dans les bornes du troisième ordre. Ainsi, l'estimation des modules d'élasticité effectifs d'un composite aléatoire à inclusions sphériques suivant un schéma booléen de sphères dures est obtenue en utilisant les formules (II.58) pour les paramètres ζ_1 et η_1 (en supposant que la phase 1 correspond aux sphères).

II.2.2 Comportement thermo-élastique linéaire apparent

Dans le cadre de la thermo-élasticité linéaire, il est possible de déterminer la dilatation thermique apparente du milieu hétérogène à partir des relations de localisation établies en élasticité linéaire et de la donnée des coefficients de dilatation thermique de chaque phase. En raisonnant sur les champs moyens par phase, la déformation thermique moyenne dans la phase i , induite par une variation de température θ_i supposée uniforme dans la phase i , est égale à :

$$\underline{\underline{\varepsilon}}_i^{th} = \underline{\underline{\alpha}}_i \theta_i \quad (\text{II.66})$$

où $\underline{\alpha}_i$ est le tenseur des dilatations thermiques linéiques de la phase i . La loi de comportement s'écrit alors :

$$\underline{\sigma}_i = \mathbb{C}_i : \underline{\varepsilon}_i - \underline{\kappa}_i \theta_i \quad \text{ou} \quad \underline{\varepsilon}_i = \mathbb{S}_i : \underline{\sigma}_i + \underline{\alpha}_i \theta_i \quad (\text{II.67})$$

avec $\underline{\kappa}_i = \mathbb{C}_i : \underline{\alpha}_i$ et $\underline{\varepsilon}_i$ la déformation totale. Par analogie, la loi de comportement macroscopique prend la forme suivante :

$$\underline{\Sigma} = \mathbb{C}^{\text{app}} : \underline{E} - \underline{\kappa}^{\text{app}} \Theta \quad \text{ou} \quad \underline{E} = \mathbb{S}^{\text{app}} : \underline{\Sigma} + \underline{\alpha}^{\text{app}} \Theta. \quad (\text{II.68})$$

Les tenseurs des rigidités et des souplesses apparents ont la même expression que dans le cas de l'élasticité linéaire (II.13) :

$$\mathbb{C}^{\text{app}} = \langle \mathbb{C} : \mathbb{A} \rangle_V \quad \text{et} \quad \mathbb{S}^{\text{app}} = \langle \mathbb{S} : \mathbb{B} \rangle_V, \quad (\text{II.69})$$

et les tenseurs du comportement dilatométrique homogénéisé ont pour expression (ZAOUI, 2000) :

$$\underline{\kappa}^{\text{app}} \Theta = \langle \underline{\kappa} \theta : \mathbb{A} \rangle_V \quad \text{et} \quad \underline{\alpha}^{\text{app}} \Theta = \langle \underline{\alpha} \theta : \mathbb{B} \rangle_V. \quad (\text{II.70})$$

En faisant l'hypothèse que le *champ de température est uniforme* dans le milieu hétérogène ($\forall i, \theta_i = \Theta$), les tenseurs $\underline{\kappa}^{\text{app}}$ et $\underline{\alpha}^{\text{app}}$ s'écrivent :

$$\underline{\kappa}^{\text{app}} = \langle \underline{\kappa} : \mathbb{A} \rangle_V \quad \text{et} \quad \underline{\alpha}^{\text{app}} = \langle \underline{\alpha} : \mathbb{B} \rangle_V. \quad (\text{II.71})$$

Le comportement thermo-mécanique apparent est entièrement déterminé par les tenseurs de localisation \mathbb{A} et \mathbb{B} relatifs au comportement mécanique du milieu hétérogène. Cependant, ce résultat est limité à l'hypothèse d'un champ de température uniforme au sein du milieu hétérogène. Il ne permet donc pas de traiter le cas d'un milieu où certains constituants sont sources de chaleur.

II.2.3 Changements d'échelles en mécanique non linéaire

Approches par champs moyens

Dans le domaine des comportements mécaniques non linéaires, les modèles de changement d'échelles développés s'appuient sur une linéarisation du comportement afin de pouvoir appliquer les schémas d'homogénéisation de l'élasticité linéaire. Ces approches permettent de prendre en compte le comportement non linéaire de chaque phase en leur affectant des caractéristiques linéarisées associées à leurs déformation ou contrainte moyennes. On raisonne donc seulement sur le comportement moyen de chaque phase. Les résultats du problème d'ESHELBY ont permis l'extension des modèles linéaires à l'élasto-plasticité, la visco-élasticité et la visco-élasto-plasticité. Ces comportements peuvent être approchés par une formulation sécante, tangente ou affine. Nous présentons quelques modèles de changement d'échelles en mécanique non linéaire en annexe A page 121.

Analyse par champs de transformation

L'analyse par champs de transformation ou *Transformation Field Analysis* (TFA) a été développée par DVORAK (1990, 1992). DVORAK propose un formalisme permettant de généraliser l'écriture des relations de localisation dans le domaine non linéaire et de prendre en compte la variation des champs locaux de manière plus riche que les approches par champs moyens. On

trouvera une présentation détaillée de cette méthode dans les références (DVORAK, 1990, 1992; DVORAK et BENVENISTE, 1992; POTTIER, 1998; ROUSSETTE, 2005; BAYART, 2005).

L'idée de la TFA est de supposer que le champ de déformation macroscopique est redistribué de manière purement élastique dans le VER. Les déformations de nature non élastiques sont vues comme des champs locaux de déformations libres. Le VER est ainsi décomposé en m sous-volumes V_i , à l'intérieur desquels les champs de nature non élastique $\underline{\underline{\mu}}_i$ sont supposés uniformes (une phase peut donc contenir plusieurs sous-volumes mais un sous-volume n'appartient qu'à une phase). Ainsi, chaque sous-volume constitue une partie homogène du VER. Les déformations et contraintes moyennes de chaque sous-volume s'écrivent alors :

$$\underline{\underline{\varepsilon}}_i = \mathbb{A}_i : \underline{\underline{E}} + \sum_{j=1}^m \mathbb{D}_{ij} : \underline{\underline{\mu}}_j \quad (\text{II.72})$$

$$\underline{\underline{\sigma}}_i = \mathbb{B}_i : \underline{\underline{\Sigma}} + \sum_{j=1}^m \mathbb{F}_{ij} : \mathbb{C}_j : \underline{\underline{\mu}}_j. \quad (\text{II.73})$$

Les tenseurs de localisation \mathbb{A}_i et \mathbb{B}_i correspondent à ceux déterminés dans le cadre de l'élasticité linéaire. Les tenseurs \mathbb{D}_{ij} et \mathbb{F}_{ij} sont les « tenseurs d'influence » de la déformation non élastique du sous-volume j transmise à la déformation du sous-volume i .

Les tenseurs \mathbb{A}_i et \mathbb{B}_i peuvent être obtenus de manière analytique grâce aux méthodes citées précédemment. Ils peuvent aussi être calculés numériquement par résolution d'une série de problèmes élastiques en imposant des déformations et contraintes macroscopiques $\underline{\underline{E}}$ et $\underline{\underline{\Sigma}}$ élémentaires et des champs $\underline{\underline{\mu}}_j$ nuls.

Les tenseurs d'influence \mathbb{D}_{ij} et \mathbb{F}_{ij} d'un sous-volume i sont déterminés numériquement en résolvant une série de problèmes élastiques où sont imposés, tour à tour, des $\underline{\underline{\mu}}_j$ élémentaires dans tous les sous-volumes, et en prenant $\underline{\underline{E}}$ et $\underline{\underline{\Sigma}}$ nuls. La connaissance du tenseur d'influence \mathbb{D}_{ij} permet de calculer \mathbb{F}_{ij} par la relation (POTTIER, 1998) :

$$\mathbb{F}_{ij} = \mathbb{C}_i : \left(\delta_{ij} \mathbb{I} - c_j \mathbb{A}_i : \mathbb{B}_j^t - \mathbb{D}_{ij} \right) : \mathbb{C}_j^{-1}. \quad (\text{II.74})$$

Les tenseurs d'influence vérifient, de plus, les relations suivantes (DVORAK et BENVENISTE, 1992) :

$$\sum_i c_i \mathbb{D}_{ij} = \mathbb{O} \quad \text{et} \quad \sum_i c_i \mathbb{F}_{ij} = \mathbb{O} \quad \forall j \in \llbracket 1, m \rrbracket \quad (\text{II.75})$$

$$\sum_j \mathbb{D}_{ij} = \mathbb{I} - \mathbb{A}_i \quad \text{et} \quad \sum_j \mathbb{F}_{ij} = \mathbb{I} - \mathbb{B}_i \quad \forall i \in \llbracket 1, m \rrbracket \quad (\text{II.76})$$

$$\sum_j \mathbb{D}_{ij} : \mathbb{S}_j = \mathbb{O} \quad \text{et} \quad \sum_j \mathbb{F}_{ij} : \mathbb{C}_j = \mathbb{O} \quad \forall i \in \llbracket 1, m \rrbracket. \quad (\text{II.77})$$

Grâce à ces équations, les coefficients des tenseurs d'influence peuvent être calculés analytiquement dans le cas particulier d'un milieu biphasé constitué uniquement de deux sous-volumes (DVORAK et BENVENISTE, 1992). Les relations de localisation font intervenir plusieurs tenseurs : les tenseurs de localisation et d'influence. Ces tenseurs sont calculés en résolvant des problèmes linéaires. Si les propriétés élastiques des sous-volumes varient (sous l'influence d'un endommagement, par exemple), il s'avère nécessaire de recalculer ces différents tenseurs.

Une extension de la TFA aux phénomènes d'endommagement, dénommée GTFA, est proposée par POTTIER (1998); CHABOCHE *et al.* (2001). Elle permet de tenir compte de l'endommagement local des sous-volumes sans avoir à recalculer les tenseurs d'influence. Son principe consiste à introduire, dans la loi de comportement initiale, une déformation libre, appelée « déformation libre généralisée », traduisant les effets d'une variation des propriétés élastiques. La loi de comportement locale est donc toujours écrite avec un tenseur des rigidités de référence (souvent, l'état initial, sans endommagement). Cette déformation libre généralisée est introduite dans les relations de localisation de la méthode TFA comme une déformation inélastique. Le calcul des tenseurs d'influence n'est donc à effectuer qu'une seule fois pour un état de référence.

En définitive, la TFA permet de prendre en compte la variation des champs locaux par phase, à la différence des approches par champs moyens. Cependant, cette méthode ne peut donner de bons résultats qu'à condition d'avoir un nombre de sous-volumes important dans chaque phase. Le comportement effectif dépend aussi du découpage en sous-volumes du VER.

Analyse par champs de transformation non uniformes

L'analyse par champs de transformation non uniformes ou *Nonuniform Transformation Field Analysis* (NTFA) est une extension de la TFA. La méthode TFA propose une décomposition uniforme des déformations inélastiques par sous-volume, ce qui s'écrit :

$$\underline{\underline{\varepsilon}}^{in}(\underline{x}) = \sum_{i=1}^m \underline{\underline{\mu}}_i \chi_i(\underline{x}), \quad (\text{II.78})$$

où $\chi_i(\underline{x})$ est la fonction caractéristique de la phase i :

$$\chi_i(\underline{x}) = \begin{cases} 1 & \text{si } \underline{x} \in V_i \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (\text{II.79})$$

La NTFA propose de décomposer les déformations inélastiques sur une base de fonctions caractéristiques non uniformes $\theta_i(\underline{x})$:

$$\underline{\underline{\varepsilon}}^{in}(\underline{x}) = \sum_{i=1}^m \underline{\underline{\mu}}_i \theta_i(\underline{x}). \quad (\text{II.80})$$

Les fonctions θ_i , aussi appelés modes plastiques, sont à définir par l'utilisateur. Le support de θ_i peut s'étendre à plusieurs sous-volumes mais doit être contenu dans une seule phase. Cette méthode a notamment été développée par MICHEL *et al.* (2000). La NTFA a ensuite été modifiée par MICHEL et SUQUET (2003) en considérant des modes plastiques tensoriels :

$$\underline{\underline{\varepsilon}}^{in}(\underline{x}) = \sum_{i=1}^m \mu_i \underline{\underline{\theta}}_i(\underline{x}). \quad (\text{II.81})$$

On trouvera une comparaison entre les résultats donnés par la TFA et la NTFA, pour plusieurs cas tests en 2D, dans la thèse de ROUSSETTE (2005). De manière générale, la TFA prédit un comportement trop rigide, même en augmentant significativement le nombre de sous-volumes dans chaque phase. De plus, le type de découpage modifie les résultats. Les résultats de la NTFA dépendent entièrement de la détermination des modes plastiques. En effet, les résultats sur le comportement donnés dans les gammes de déformations voisines de celles utilisées pour la détermination des modes plastiques sont excellents (en utilisant moins de sous-volumes que

pour la TFA), alors que, dans les gammes de déformations autres, les prédictions ne concordent plus avec les calculs de référence.

ROUSSETTE (2005) souligne ainsi qu'il est nécessaire de prendre en compte l'information des champs de déformations inélastiques pour plusieurs niveaux de déformation afin de prédire correctement le comportement non linéaire effectif par la NTFA. Cependant, cela implique la détermination de nombreux modes plastiques et donc la manipulation de nombreuses variables internes.

Les modes plastiques permettent de prendre en compte les variations spatiales des déformations inélastiques dans chaque sous-volume. Le choix de ces modes constitue la principale difficulté de cette méthode car il est laissé libre à l'utilisateur et est fortement fonction de son domaine d'application. Pour nous aider, ROUSSETTE (2005) propose une méthode de détermination du choix des modes plastiques par une méthode d'orthogonalisation des modes utilisant la transformation de KARHUNEN-LOÈVE.

II.3 Simulation de 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, 2004). 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.

Nous présentons, dans cette partie, des modèles pour générer des microstructures à inclusions sphériques, les différentes techniques de maillage qui peuvent être employées pour discrétiser ces microstructures, ainsi que des outils de caractérisation de leur morphologie.

II.3.1 Génération de microstructures aléatoires à inclusions sphériques

L'objectif est de générer des échantillons numériques de la microstructure d'un matériau composite, constitué d'inclusions sphériques (que l'on désignera également par le terme 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.

On parle de méthode concurrentes pour traduire le fait que, dans ce type de processus, plusieurs événements ont lieu simultanément dans un intervalle de temps.

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).

Le 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, 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.

Le modèle de Lubachevsky et Stillinger

LUBACHEVSKY et STILLINGER (1990); LUBACHEVSKY *et al.* (1991) ont proposé une méthode dite concurrente de « croissance » de particules sphériques au cours du temps. L'état initial est obtenu en tirant aléatoirement la position de N points (centres des particules) dans un domaine fermé et en imposant des conditions de périodicité. On affecte à chaque point un vecteur vitesse initial dont les composantes sont également tirées aléatoirement. Ces points représentent des sphères dont le diamètre est initialement nul. Pour les temps ultérieurs, les particules se déplacent selon leur vecteur vitesse initial et leur diamètre augmente dans le temps. Au cours de leur déplacement et à mesure qu'elles grossissent, les particules s'entrechoquent de façon élastique. Les conditions de périodicité sont imposées sur les bords du domaine. L'algorithme d'une telle méthode nécessite de calculer la position et la vitesse des particules à chaque pas de temps et, également, de « prédire » les chocs devant avoir lieu au pas suivant. Le grossissement des sphères permet d'augmenter la fraction volumique de particules au cours du temps et le processus est arrêté quand la fraction volumique de particules visée est atteinte.

La fraction volumique maximale atteinte varie entre 63 % et 65 %. Enfin, nous pouvons remarquer que l'état final du système est entièrement déterminé par les positions et les vitesses initiales des particules.

Autre méthodes de génération de nuages de points

Enfin, on peut citer d'autres méthodes permettant de générer des distributions aléatoires de sphères dures avec une compacité très élevée (liste non exhaustive) :

- La méthode de perturbations aléatoires de la position des particules 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.

- HINRICHSSEN *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.
- Enfin, 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.3.2 Différentes méthodes de maillage

Démarche générale

La géométrie d'un composite à inclusions sphériques est entièrement déterminée par la donnée des centres des inclusions et de leur diamètre. À partir d'une telle description, une démarche possible de maillage consiste à construire le maillage des surfaces, puis à remplir ce maillage surfacique par des éléments volumiques. Cependant, cette démarche peut être difficile à mettre en œuvre si la fraction volumique d'inclusions est relativement élevée. En effet, les inclusions étant très proches, la matrice présente des ligaments d'épaisseur faible. La taille des éléments finis doit donc être adaptée si l'on souhaite obtenir une bonne précision du calcul dans les ligaments fins. Une seconde difficulté est celle du maillage des inclusions interceptant les bords du volume, où la géométrie des inclusions est celle de sphères coupées par un ou plusieurs plans. Cette difficulté est accrue s'il s'agit de particules multi-couches. D'autres méthodes permettent de contourner ces difficultés. Nous nous sommes limités à présenter les méthodes basées sur la réalisation d'un maillage régulier, le maillage adaptatif et l'utilisation d'éléments finis enrichis (X-FEM).

Maillage régulier

Il s'agit de construire un pavage régulier du volume 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). 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. L'inconvénient de cette technique est que la description des interfaces reste pauvre.

Il est également possible de décrire la géométrie des interfaces par la méthode des « marching-cubes » (LORENSEN et CLINE, 1987). La méthode consiste à décrire de manière polygonale l'interface, en superposant une grille de points arrangés de manière cubique, à la description de la géométrie (images tridimensionnelles ou autre). Pour chaque cube de la grille, on détermine la phase dans laquelle se situe chaque point et on fait passer l'interface de manière polygonale entre ces points. Un maillage est alors réalisé à partir de cette description polygonale de l'interface. Cette méthode est principalement employée dans le cas où la géométrie de l'interface n'est

pas connue ou dans le cas où la géométrie est connue mais où sa complexité ne peut pas être décrite correctement par les outils de CAO. Cette méthode a récemment été appliquée pour décrire les interfaces matrice/particules d'un composite constitué d'une matrice élastomère et de particules de noir de carbone (JEAN, 2009).

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).

Maillage avec des éléments finis enrichis

La méthode des éléments enrichis, ou *eXtended Finite Element Method* (X-FEM), a été initialement développée pour modéliser une fissure avec un maillage éléments finis sans avoir à la mailler explicitement (MOËS *et al.*, 1999). L'idée est d'enrichir les fonctions d'interpolation des éléments finis du maillage de manière à décrire la discontinuité du champ de déplacement le long de la fissure. Le lieu de la fissure est décrit par deux courbes de niveaux, ou *level sets*, exprimées dans le repère des coordonnées curvilignes de la fissure. La première donne la distance signée à la fissure, la deuxième, la distance signée à la pointe de fissure.

La méthode des X-FEM est également utilisée pour modéliser des interfaces entre différents milieux, comme la frontière entre deux matériaux (MOËS *et al.*, 2003; BELYTSCHKO *et al.*, 2003) ou la surface libre d'un fluide (SAUERLAND et FRIES, 2009), sans avoir à les mailler explicitement. La différence entre les éléments finis enrichis utilisés pour modéliser une fissure et ceux utilisés dans ce cas réside dans le choix des fonctions d'interpolation des éléments finis enrichis. Les fonctions d'interpolation d'éléments finis enrichis pour décrire l'interface entre deux milieux doivent être continues mais de *dérivées spatiales discontinues*.

Si les éléments finis enrichis permettent de représenter les discontinuités géométriques ou matérielles sans avoir à y adapter le maillage, leur utilisation ne présente pas que des avantages. La principale difficulté inhérente à la mise en œuvre d'X-FEM, que ce soit pour la modélisation de fissures ou d'interfaces, est celle de l'intégration dans l'élément fini enrichi. En effet, quelle que soit la discontinuité modélisée, on ne peut jamais être sûr que chacun des deux sous-domaines créés dans l'élément par cette discontinuité contienne au moins un point d'intégration. Une solution est de trianguler ces deux sous-domaines et d'intégrer dans chacun d'eux à l'aide des éléments de cette triangulation. Cette méthode pose le problème de la projection des champs définis aux points d'intégration de l'élément fini enrichi avant l'apparition de la discontinuité sur les éléments de cette triangulation. Une solution alternative est de sur-intégrer les X-FEM, c'est-à-dire d'augmenter le nombre de points d'intégration, de sorte que les cas où l'un des deux sous-domaines créés par la discontinuité ne contient pas de points d'intégration soient peu fréquents et que, le cas échéant, l'erreur commise soit faible et très locale.

II.3.3 Outils de caractérisation morphologique pour les composites à inclusions

Le comportement thermo-mécanique d'un matériau hétérogène est lié à sa composition et à la morphologie de sa microstructure. Aussi, nous sommes intéressés par caractériser la morphologie des microstructures générées. Cette caractérisation morphologique peut avoir plusieurs buts :

- vérifier que les échantillons réalisés respectent certaines hypothèses sur la distribution spatiale des inclusions (fraction volumique, distribution aléatoire, isotropie) ;
- analyser les relations entre microstructure et distribution statistique des champs thermo-mécaniques locaux ;
- alimenter la modélisation multi-échelles de paramètres microstructuraux plus riches que la fraction volumique de constituants.

Dans ce cadre, nous présentons un certain nombre de caractéristiques morphologiques destinées à analyser la microstructure de composites à inclusions sphériques. On distingue, d'une part, les descripteurs locaux, qui analysent le voisinage des inclusions et mettent en évidence les relations entre inclusions à courte distance, et, d'autre part, les descripteurs globaux, qui concernent des distances supérieures.

Descripteurs locaux

Les descripteurs locaux permettent d'analyser le voisinage de chaque inclusion. Ce voisinage peut être identifié à l'aide de polyèdres de VORONOÏ associés aux centres des inclusions. On rappelle que ces polyèdres ne se recouvrent pas et sont délimités par les plans médiateurs des segments de la triangulation de DELAUNAY. Ce découpage de l'espace est nommé *partition de VORONOÏ*. La figure II.9 présente la partition de VORONOÏ d'un ensemble de points en 2D et en 3D.

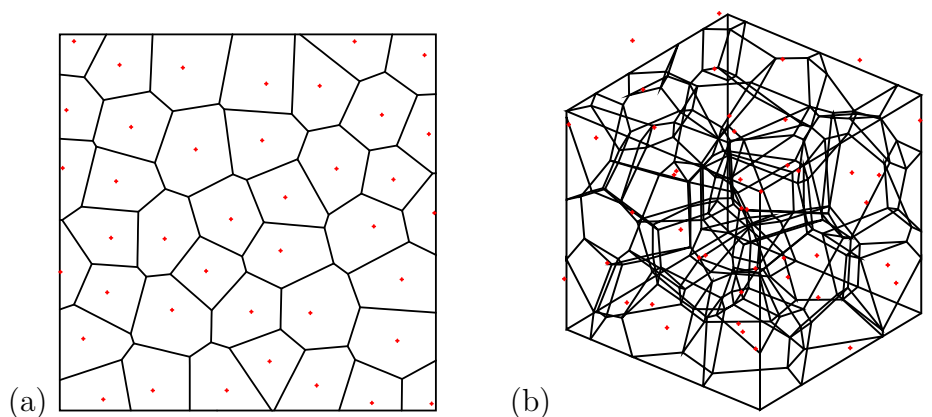


FIG. II.9 – Partition de VORONOÏ d'un ensemble de points en 2D (a) et 3D (b).

La forme et le volume des cellules peuvent être utilisés pour caractériser le voisinage des inclusions. À partir de cette partition, plusieurs descripteurs peuvent être calculés, renseignant sur les distances entre inclusions, la fraction volumique locale et l'isotropie des échantillons. On s'intéresse notamment à la distribution des grandeurs suivantes :

- Le volume des cellules de VORONOÏ qui renseigne sur la fraction volumique locale d'inclusions en faisant le rapport du volume de l'inclusion sur le volume de sa cellule.
- Le nombre de voisins, qui correspond au nombre de faces des cellules.
- La distance aux voisins, qui correspond à la moyenne des distances centre à centre entre une inclusion et ses voisines. On pourra s'intéresser également à la distance au premier voisin.
- Les angles au premier voisin dans le repère de l'échantillon indiquent d'éventuelles directions préférentielles dans l'arrangement des inclusions.

Descripteurs globaux

Fonction de distribution radiale : la fonction de distribution radiale, notée RDF (*Radial Distribution Function*), est employée pour caractériser des distributions de points. Elle représente l'évolution moyenne de la densité d'inclusions en fonction de la distance aux inclusions. En notant ρ la densité volumique moyenne d'inclusions dans le milieu (nombre d'inclusions par unité de volume), la RDF, notée $g(r)$, représente la densité volumique moyenne d'inclusions à la distance r d'une inclusion du milieu :

$$\rho(r) = g(r)\rho. \quad (\text{II.82})$$

Illustrons cette fonction en 2D. Pour une inclusion i donnée, la valeur $g_i(r)$ fournit le nombre d'inclusions présentes dans une couronne de rayon r et de largeur dr (voir figure II.10). En 3D, on considère une coque sphérique de rayon r et d'épaisseur dr . Ainsi, connaissant le nombre N_r d'inclusions présentes dans ce volume, la valeur $g_i(r)$ est donnée par :

$$g_i(r) = \begin{cases} \frac{1}{\rho} \frac{N_r}{2\pi r dr} & \text{en 2D,} \\ \frac{1}{\rho} \frac{N_r}{4\pi r^2 dr} & \text{en 3D.} \end{cases} \quad (\text{II.83})$$

$g(r)$ est alors obtenue en faisant la moyenne de l'ensemble des $g_i(r)$.

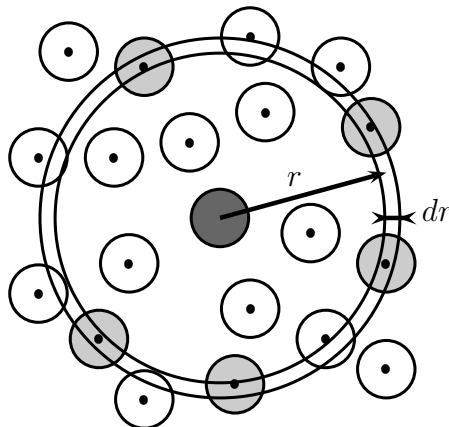


FIG. II.10 – Illustration de la RDF en 2D. Pour une inclusion donnée (noircie), la valeur de la fonction $g_i(r)$ est déterminée grâce au nombre N_r d'inclusions dont le centre est situé dans la couronne de rayon r et d'épaisseur dr (grisées), ici au nombre de 5.

La RDF renseigne sur les variations de la fraction volumique d'inclusions, la distance au premier voisin, ainsi que la distance à partir de laquelle la densité locale d'inclusions atteint la densité globale. Cette fonction fournit une information sur la distribution des distances entre les inclusions. Un maximum local indique une distance particulièrement fréquente entre les inclusions, alors qu'un minimum indique le contraire. L'occurrence de ces extrema est caractéristique d'une distribution périodique d'inclusions. À l'inverse, pour une distribution aléatoire uniforme d'inclusions, la fonction $g(r)$ tend vers 1 quand r augmente.

Covariance : la covariance, au sens morphologique, d'un ensemble géométrique X est la probabilité que deux points reliés par le vecteur \underline{r} appartiennent au même ensemble. La covariance peut s'exprimer de manière plus explicite par la mesure d'intersections d'ensembles. Soit Z un cadre de mesure dans lequel on étudie l'ensemble X . La covariance s'exprime alors de la manière suivante :

$$C(X, \underline{r}) = \frac{\text{Mes}((X \cap X_{\underline{r}}) \cap (Z \cap Z_{\underline{r}}))}{\text{Mes}(Z \cap Z_{\underline{r}})}. \quad (\text{II.84})$$

où « Mes » désigne la mesure d'un ensemble géométrique (surface, volume) et $X_{\underline{r}}$ l'ensemble X translaté du vecteur \underline{r} . Cette expression permet d'estimer la covariance d'un ensemble en mesurant les intersections des domaines intervenant dans l'équation. Elle est illustrée par la figure II.11.

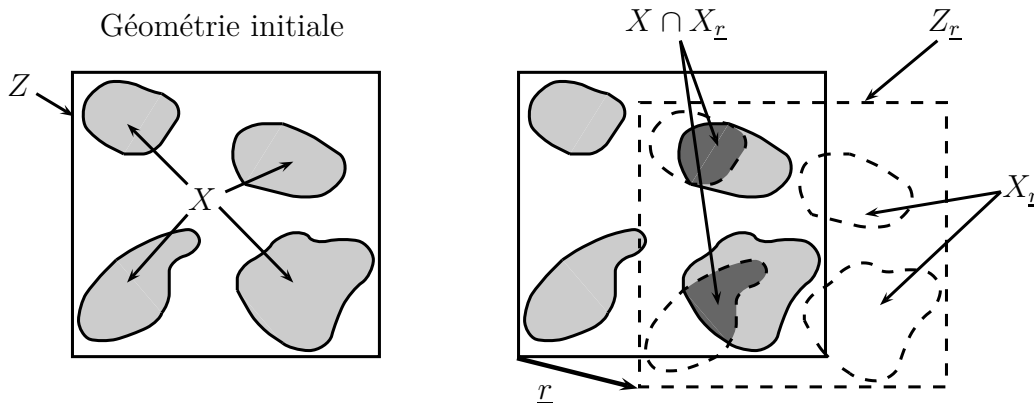


FIG. II.11 – Illustration des intersections des domaines intervenant dans l'expression (II.84) de la covariance.

Dans le cas d'une géométrie isotrope, la covariance n'est plus fonction que de la distance $r = \|\underline{r}\|$ séparant les deux points. Dans notre cas, la géométrie étudiée est l'ensemble des inclusions. La covariance permet de mesurer la corrélation des probabilités de présence de deux inclusions entre deux points distants de r . La valeur initiale $C(r = 0)$ correspond à la fraction volumique d'inclusions c . La valeur asymptotique, quand r tend vers l'infini, est égale au carré de la fraction volumique c^2 :

$$C(0) = c \quad \lim_{r \rightarrow +\infty} C(r) = c^2. \quad (\text{II.85})$$

On définit la *portée de la covariance*, notée d_c , comme la plus petite valeur de r pour laquelle $C(r)$ est égale à sa valeur asymptotique c^2 . Cette distance est caractéristique de la microstructure étudiée. Deux points séparés par une distance supérieure à d_c sont statistiquement indépendants (BORNERT *et al.*, 2001a).

II.4 Étude numérique de composites à inclusions sphériques

Nous présentons, tout d'abord, les résultats d'études sur les microstructures à inclusions et, notamment, l'influence de certains paramètres sur leur comportement mécanique (influence de la répartition et la distribution de taille des inclusions). Puis, nous abordons le problème de l'homogénéisation de ces microstructures en mécanique. Enfin, nous présentons également les travaux déjà réalisés sur le combustible nucléaire à particules de cette étude.

II.4.1 Influence de la répartition des inclusions

Concernant l'effet de la répartition des inclusions sur le comportement des composites à matrice métallique ductile (de type aluminium), renforcée d'inclusions rigides et fragiles (de type céramique, SiC), SEGURADO *et al.* (2003); SEGURADO et LLORCA (2005, 2006) ont modélisé l'effet de la présence ou non d'amas d'inclusions pour une fraction volumique globale d'inclusions de 15 % et différentes valeurs de fractions volumiques locales d'amas (de 20 à 40 %). Les résultats de ces travaux montrent que la présence d'amas semble ne pas influencer le comportement élasto-plastique global. En revanche, l'effet des amas est visible sur la valeur moyenne de la contrainte principale maximale dans les inclusions : cette contrainte est plus élevée en présence d'amas que dans le cas homogène (voir figure II.12).

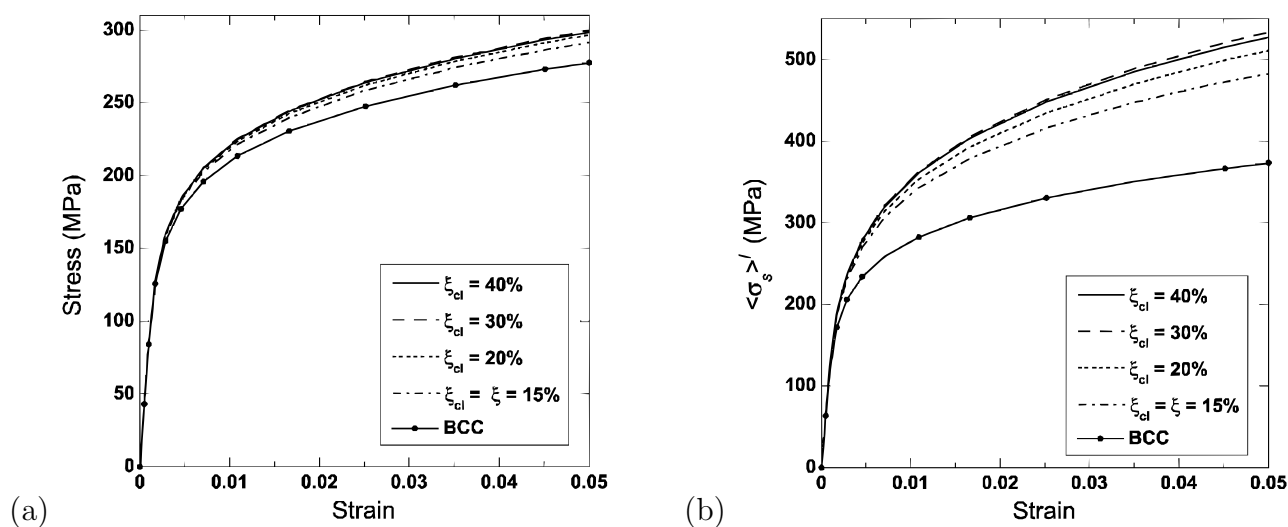


FIG. II.12 – Comparaison du comportement en traction uniaxiale de composites à inclusions avec amas à celui d'un composite à inclusions sans amas et d'un composite régulier (réseau cubique centré BCC) (SEGURADO *et al.*, 2003). ξ désigne la fraction volumique d'inclusions globale et ξ_{cl} celle dans les amas. (a) : courbes contrainte/déformation moyennes du composite à inclusions. (b) : évolution de la valeur moyenne de la contrainte principale maximale dans les inclusions en fonction de la déformation moyenne appliquée.

La statistique de WEIBULL est ensuite utilisée pour estimer le nombre d'inclusions rompues à partir des valeurs locales de la contrainte principale maximale. Le résultat est que la présence d'amas dans la microstructure augmente très fortement la proportion d'inclusions rompues (SEGURADO *et al.*, 2003).

SEGURADO et LLORCA (2004, 2005, 2006) ont poursuivi leurs travaux en prenant en compte la décohésion des inclusions avec la matrice à l'aide d'éléments finis d'interface, dont le comportement est piloté par un modèle de rupture. Cette nouvelle modélisation confirme que la présence d'amas ne modifie pas le comportement moyen du composite. En revanche, la modélisation de la décohésion des inclusions influence grandement la tenue mécanique et, notamment :

- la limite d'élasticité du composite, qui diminue fortement avec la résistance de l'interface mais pas avec la présence d'amas ;
- la résistance en traction (contrainte ultime), qui augmente globalement avec la résistance de l'interface ;
- l'allongement à rupture, qui diminue fortement avec la résistance de l'interface pour de petites valeurs, puis augmente pour une plage de valeurs supérieures.

Dans tous les cas, la présence d'amas conduit à des valeurs systématiquement inférieures de résistance en traction et d'allongement à rupture par rapport à une structure aléatoire homogène (SEGURADO et LLORCA, 2005). La probabilité de rupture des inclusions est 3 à 6 fois plus élevée pour une distribution en amas que pour une distribution homogène (SEGURADO et LLORCA, 2006).

MISHNAEVSKY (2004) a également étudié le comportement micromécanique de ce type de milieu en comparant plusieurs distributions d'inclusions : réseau périodique cubique centré, distribution aléatoire homogène, distribution aléatoire avec amas, distribution aléatoire en imposant un gradient de concentration d'inclusions dans une direction. Les réalisations sont soumises à des sollicitations de traction uniaxiale. MISHNAEVSKY (2004) observe le même phénomène : pour une fraction volumique moyenne d'inclusions donnée, les différentes distributions n'influencent quasiment pas le comportement élastique du composite. L'effet de la distribution des inclusions apparaît en plasticité sur le module d'écrouissage, l'amorçage et la progression de l'endommagement. De manière générale, les concentrations de contrainte et de déformation, à l'origine des phénomènes de rupture et d'endommagement, sont plus élevées dans les zones où les inclusions sont rapprochées et, donc, dans les amas. Ce résultat souligne l'influence de la morphologie des échantillons numériques (notamment l'évolution des fractions volumiques locales d'inclusions) sur l'hétérogénéité des champs mécaniques locaux. Ces résultats sont obtenus avec des fractions volumiques d'inclusions relativement faibles (de 2.5 à 15 %). Les concentrations de contraintes, notamment dans la matrice, ne sont sans doute pas comparables à celles présentes dans un composite présentant une fraction volumique de 45 % d'inclusions.

II.4.2 Homogénéisation du comportement mécanique

Peu de travaux ont été publiés sur l'homogénéisation de composites présentant de fortes fractions volumiques d'inclusions (de l'ordre de 50 %). Cependant, grâce à l'algorithme RSA modifié (voir le paragraphe II.3), SEGURADO et LLORCA (2002) ont étudié le comportement de microstructures présentant des fractions volumiques d'inclusions comprises entre 10 et 50 %. Les éléments de volume réalisés sont soumis à des conditions aux limites périodiques. Trois configurations de matériaux sont testés : une matrice élastique renforcée d'inclusions rigides, une matrice élastique contenant des vides sphériques et une matrice élastique (type époxy) renforcée de sphères élastiques (type verre). La faible dispersion des résultats sur plusieurs réalisations de microstructures permet de considérer la moyenne de ces résultats comme une bonne approximation de la solution « exacte » pour le comportement effectif du matériau. Les proprié-

tés effectives calculées : module de YOUNG, coefficient de POISSON, modules de compressibilité et de cisaillement, sont comparés à ceux obtenus analytiquement par les schémas d'homogénéisation linéaires suivants : l'estimation de MORI et TANAKA, le modèle auto-cohérent généralisé et l'approximation du troisième ordre de TORQUATO. L'approximation du troisième ordre de TORQUATO fournit la meilleure approximation des résultats numériques. Les résultats obtenus par le modèle auto-cohérent sont également convenables.

KARI *et al.* (2007) ont étudié le comportement de composites à inclusions de tailles variables (pour un matrice métallique de type aluminium et des inclusions de type céramique, SiC). Les fractions volumiques d'inclusions visées sont élevées (jusqu'à 60 %). KARI *et al.* (2007) ont comparé les résultats de leurs simulations aux estimations fournies par des modèles analytiques : auto-cohérent, auto-cohérent 3-phases, estimation de MORI et TANAKA, approximation du troisième ordre de TORQUATO. La meilleure approximation du comportement effectif est à nouveau fournie par le modèle du troisième ordre de TORQUATO.

Récemment, l'étude mécanique de composites à inclusions a été étendue aux comportements non linéaires (élasto-visco-plasticité) (PIERARD *et al.*, 2007). Les résultats de simulations numériques par éléments finis sont comparés aux résultats d'un modèle d'homogénéisation affine (le modèle choisi est l'estimation de MORI et TANAKA). La matrice et les inclusions ont un comportement élasto-visco-plastique selon le modèle de PERZYNA (matrice métallique de type aluminium et inclusions de type céramique, SiC). Les éléments de volume sont soumis à des conditions aux limites périodiques. Les résultats obtenus (pour des fractions volumiques d'inclusions de 15 et 30 % et différentes vitesses de déformations) montrent que le modèle affine prédit correctement le comportement dans différents cas de charge (traction uni et bi-axiale, cisaillement), ainsi que pour un chargement cyclique, pour les faibles vitesses de déformations (de 10^{-6} à $10^{-5} s^{-1}$). Le modèle affine sous-estime le niveau des contraintes pour les vitesses supérieures (de 10^{-4} à $10^{-3} s^{-1}$).

II.4.3 Modélisation multi-échelles du combustible à particules

Le comportement mécanique d'un combustible nucléaire à particules, pour un concept de réacteur à haute température et à caloporteur gaz, a été modélisé par une méthode de changement d'échelles basée sur la méthode des éléments finis au carré (BLANC, 2009). Il s'agit de particules combustibles de type « Triso » : noyau sphérique d'UO₂ revêtu d'une couche de buffer, d'une couche de PyC, d'une couche de SiC et d'une nouvelle couche de PyC. La fraction volumique de particules considérée reste relativement faible : autour de 10 %. La microstructure aléatoire a d'abord été caractérisée, sur des tirages de très grande taille servant de référence, par l'indicateur morphologique de distance au premier voisin afin d'assurer la représentativité morphologique des volumes plus petits générés pour les calculs mécaniques. Le comportement thermo-élastique effectif du combustible à particules peut être calculé sur des microstructures de petite taille (contenant au moins 5 particules) avec une variation des modules élastiques apparent entre deux tirages de moins de un pour cent. Ce comportement effectif est également en bon accord avec celui donné par le modèle auto-cohérent ($n + 1$)-phases. Les contraintes locales au sein de la microstructure sont analysées en particulier dans la couche de SiC, qui assure l'intégrité de la particule combustible. La moyenne, sur toutes les particules, de la contrainte orthoradiale maximale dans chaque couche de SiC est ainsi analysée sur plusieurs VER. L'auteur établit également une relation empirique entre des indicateurs morphologiques de la distribu-

tion des particules (à savoir les distances aux deux premiers voisins et l'angle formé par ces deux voisins) et le niveau de contrainte orthoradiale dans la couche de SiC. Ce modèle permet ainsi de détecter, dans un tirage, les particules dans une situation pénalisante.

Les précédents travaux effectués au LM2S sur le réacteur spatial concernent les fractions volumiques élevées recherchées (de 40 à 50 %) (PASCAL, 2005, 2006, 2007, 2008). Le modèle de changement d'échelles auto-cohérent $(n + 1)$ -phases permet d'estimer les caractéristiques élastiques et thermiques (modules élastiques, conductivité thermique, coefficient de dilatation thermique, capacité calorifique) du combustible. Il est appliqué à l'étude du comportement thermo-mécanique du cœur du réacteur spatial, en prenant en compte le gonflement sous irradiation (sous forme de déformations libres imposées à chaque phase). Les cas-tests de validation de ce modèle montrent sa bonne aptitude à décrire le comportement thermo-élastique global des structures, ainsi que la valeur moyenne des champs locaux par phase. En revanche, le modèle ne décrit pas la distribution des contraintes locales, qui peuvent fluctuer fortement dans une même phase, notamment la matrice, et ne peut donc pas être utilisé pour analyser la tenue mécanique du combustible.

Chapitre III

Modélisation de la microstructure du combustible à particules

Ce chapitre présente les travaux consacrés à la modélisation de la microstructure du combustible à particules. Après une présentation du matériau, nous décrivons les méthodes mises en œuvre pour réaliser des *échantillons numériques* de sa microstructure, c'est-à-dire comment nous avons généré aléatoirement des nuages de points représentant les centres des particules, puis mailler les échantillons. Les microstructures virtuelles ainsi créées serviront pour caractériser le comportement thermo-mécanique du matériau. Les hypothèses de cette modélisation sont les suivantes :

- la microstructure est supposée constituée de particules sphériques de même diamètre D .
- Les particules sont réparties aléatoirement et uniformément dans l'espace sans contact entre elles.
- La fraction volumique moyenne de particules est de 45 %.
- La matrice recouvre tout l'espace non occupé par les particules, c'est-à-dire qu'on ne représente pas d'éventuelles décohésions de particules avec la matrice ou la présence de porosité.

Les échantillons numériques réalisés sont des cubes, dont *la dimension de l'arête est exprimée en diamètre de particules*. Nous présentons, dans la première partie, la fonction des différents constituants du combustible à particules, ainsi que leur procédé d'élaboration. La seconde partie est dédiée aux méthodes développées pour générer des échantillons numériques. La troisième partie présente les échantillons numériques réalisés.

III.1 Le combustible à particules

III.1.1 Constituants

Le combustible à particules est constitué de particules combustibles multi-couches dans une matrice de graphite. Les particules sont composées d'un noyau combustible en dioxyde d'uranium UO_2 revêtu de deux couches d'enrobage. Le noyau combustible a un diamètre d'environ 0.85 mm. Le rôle du noyau est de produire de la chaleur par fission (ESCLEINE, 2005). Plusieurs procédés d'élaboration permettent de réaliser des noyaux sphériques d' UO_2 d'une taille de quelques centaines de micromètres dont, notamment, le procédé sol-gel allemand qui semble aujourd'hui s'imposer.

Le Buffer est réalisé en pyrocarbone basse densité, obtenu par dépôt chimique en phase vapeur CVD¹ à une température d'environ 1300 °C. Il présente une porosité importante, de l'ordre de 50 %. Sa microstructure poreuse offre un volume libre à l'expansion des gaz de fission, dont il assure partiellement le confinement. Il permet également d'accommoder, en partie, les déformations de gonflement du noyau sous irradiation et de protéger la couche dense de pyrocarbone des fragments de fission émis par les réactions de fission. Enfin, sa densification sous irradiation conduit à sa fragmentation. On peut donc considérer qu'il ne joue aucun rôle dans la tenue mécanique de la particule (ESCLEINE, 2005).

La couche de pyrocarbone dense est également élaborée par CVD. Elle présente une porosité relativement faible, variant de 5 à 15 %. Cette couche assure le confinement des produits de fission par son très bon potentiel de rétention des gaz et l'intégrité mécanique de la particule par sa densification sous irradiation (PELLETIER *et al.*, 2003).

La matrice de graphite est élaborée à partir d'un mélange de poudre de graphite, d'un liant de type résine phénolique ou de braie et de divers adjuvants améliorant sa mise en œuvre. Les particules combustibles sont ajoutées dans les proportions volumiques voulues et le mélange est mis en forme par compression isostatique, puis fritté à une température de l'ordre de 1950 °C. Au cours du procédé d'élaboration, les particules combustibles sont ainsi soumises à des chargements mécaniques et thermiques qui peuvent conduire à l'endommagement ou à la rupture d'un certain nombre d'entre elles (PETTI *et al.*, 2003). En fonctionnement, outre son rôle de matériau de structure, la matrice permet d'évacuer la chaleur produite par les particules vers le fluide caloporteur. Elle représente également une barrière additionnelle à la diffusion des produits de fission.

III.1.2 Propriétés des constituants

Les données présentées dans ce paragraphe sont issues :

- de la note technique de PELLETIER et MARTIN (2003) en ce qui concerne l'UO₂ ;
- de la note technique de PELLETIER *et al.* (2003) en ce qui concerne les couches de pyrocarbone ;
- et des travaux de BONAL (2001); GOSMAIN et BONAL (2001) et LEJEAIL (2004) en ce qui concerne le graphite.

Les propriétés thermo-mécaniques des différents constituants à une température de 1450 K, ainsi que leurs dimensions, sont présentées dans le tableau III.1.

Remarque : étant donné les différences de dilatation thermique entre le noyau et les autres constituants, il est probable que le procédé de fabrication du combustible conduise à une décohésion du noyau d'UO₂, c'est-à-dire à la formation d'un jeu entre le noyau et les couches d'enrobage (PASCAL, 2008). Cette décohésion initiale du noyau joue un rôle important dans le comportement mécanique du combustible car il offre un jeu partiel au gonflement du noyau sous irradiation. De plus, il modifie significativement la rigidité apparente des particules. Cependant, cette analyse n'étant pas validée, et la décohésion du noyau n'étant pas l'hypothèse de travail communément admise, nous supposons dans la majeure partie de l'étude que tous

¹Chemical Vapor Deposition.

TAB. III.1 – Dimensions et propriétés thermo-mécaniques des constituants du combustible à particules de l'étude (à une température de 1450 K).

Propriété	UO ₂	Buffer	PyC	Matrice
Rayon / épaisseur (mm)	0.425	0.47 / 0.045	0.52 / 0.05	
Module de YOUNG (GPa)	164	7	29	10.2
Coefficient de POISSON	0.3	0.3	0.3	0.15
Conductivité thermique (W.m ⁻¹ .K ⁻¹)	2.52	0.5	4	66.1
Coefficient de dilatation thermique (10 ⁻⁶ K ⁻¹)	10.6	3.50	5.50	5.68

les constituants sont parfaitement adhérents et que le noyau d'UO₂ reste intègre. Le cas du noyau décollé est néanmoins abordé dans le paragraphe IV.2.5.

III.2 Génération des échantillons numériques

III.2.1 Génération de nuages de points aléatoires

L'objectif est de construire une distribution aléatoire de points, représentant les centres des particules avec une fraction volumique de 45 %. De nombreuses méthodes ont été proposées pour réaliser de tels nuages de points (voir le paragraphe II.3) mais la principale difficulté est d'obtenir la fraction volumique de particules souhaitée quand celle-ci est élevée, typiquement au-delà de 30 % en 3D. Nous avons utilisé deux méthodes pour générer nos échantillons numériques : une méthode basée sur le modèle RSA modifié proposé par SEGURADO et LLORCA (2002) et une méthode basée sur le modèle de LUBACHEVSKY et STILLINGER (1990).

Algorithme du modèle RSA modifié

L'algorithme RSA modifié, développé pour réaliser une distribution de N sphères avec une fraction volumique cible c compte trois étapes. La première étape consiste à tirer aléatoirement, selon la loi uniforme, la position des points dans un domaine cubique. Une particule i tirée aléatoirement est acceptée si ses coordonnées \underline{x}_i vérifient la condition suivante : la distance entre la particule i et les particules déjà acceptées ($j = 1, \dots, i - 1$) doit être supérieure ou égale à une distance d'exclusion D_e :

$$\forall j \in \llbracket 1, i - 1 \rrbracket \quad \|\underline{x}_i - \underline{x}_j\| \geq D_e. \quad (\text{III.1})$$

On peut définir D_e à partir du diamètre des particules : $D_e = f_e D$ (avec $f_e \geq 1$). Cette distance d'exclusion permet de faciliter le maillage de la matrice. La condition (III.1) doit être vérifiée pour chaque couple de particules, ce qui donne $(i - 1)$ conditions à vérifier pour la particule i . Si la particule i intersecte une particule déjà placée, sa position est exclue et le tirage est réitéré. Les tentatives de placement d'une nouvelle particule sont limitées à un nombre maximal N_t .

La fraction volumique maximale de particules que l'on peut atteindre par cette méthode est d'environ 30 %, avec $f_e = 1.05$. En pratique, on utilise cet algorithme avec une valeur de

fraction volumique cible plus faible, de l'ordre de 25 %, afin de placer avec succès les N particules souhaitées dans le cube. L'étape suivante de « dilatations et réarrangements » permet d'augmenter la fraction volumique de particules en les dilatant progressivement et, si besoin, en les redistribuant localement de façon aléatoire tout en vérifiant la condition de non interpénétration.

- **Dilatations-réarrangements** : on effectue une homothétie de rapport $f_h > 1$ des particules, ce qui a pour effet d'augmenter la fraction volumique. Cette homothétie amène des particules à s'interpénétrer. Pour chaque particule i dilatée, on détermine sa première voisine j . Si la distance entre les centres de i et j est inférieure à D_e ², la particule i est déplacée dans une direction donnée par un vecteur unitaire aléatoire \underline{u}_d mais respectant la condition suivante :

$$\underline{u}_d \cdot (\underline{x}_j - \underline{x}_i) \leq 0 \quad \text{avec} \quad \|\underline{u}_d\| = 1. \quad (\text{III.2})$$

La direction de \underline{u}_d garantit d'éloigner les deux sphères i et j car l'angle formé avec le vecteur liant les centres des particules est supérieur à $\pi/2$. La particule i est alors déplacée et sa nouvelle position est donnée par :

$$\underline{x}'_i = \underline{x}_i + f_d R \underline{u}_d, \quad (\text{III.3})$$

où $f_d > 0$ est un coefficient sans dimension décrivant l'amplitude du déplacement aléatoire et $R = D/2$ est le rayon des particules.

La nouvelle position \underline{x}'_i de la particule est acceptée si elle vérifie la condition (III.1). Dans le cas contraire, la particule est replacée à sa position précédente \underline{x}_i et un nouveau réarrangement est appliqué dans la limite d'un nombre maximal N_d . Si ce nombre de tentatives de réarrangement est atteint pour une particule, cette étape est arrêtée, les particules sont replacées à leur position précédente et la dilatation de rapport f_h est également annulée.

- **Perturbation aléatoire** : au cours des dilatations-réarrangements, il est utile de procéder à une étape de perturbation aléatoire pour accélérer la convergence de l'algorithme. Cela consiste à appliquer des déplacements aléatoires aux centres de toutes les particules afin de perturber leur position et d'augmenter ainsi la probabilité de succès des prochains compactages. Chaque particule i est déplacée et sa nouvelle position est donnée par :

$$\underline{x}'_i = \underline{x}_i + f_p R \underline{u}, \quad (\text{III.4})$$

où $f_p > 0$ est un coefficient sans dimension décrivant l'amplitude du déplacement aléatoire et \underline{u} un vecteur unitaire.

Il est à nouveau nécessaire de vérifier la condition (III.1) pour chaque particule déplacée. Si cette condition n'est pas respectée, la particule est replacée à sa position précédente \underline{x}_i et un nouveau déplacement est tenté dans la limite d'un nombre maximal N_p .

Il est également possible d'enchaîner plusieurs fois de suite l'étape de *dilatation-réarrangements* ou l'étape de *perturbation*. On note N_1 et N_2 les nombres de répétitions de ces étapes. La figure III.1 présente l'algorithme dans son ensemble. Les paramètres intervenant dans l'algorithme peuvent se classer en deux catégories :

²La distance d'exclusion $D_e = f_e D$ est calculée avec la nouvelle valeur du rayon des particules après homothétie.

Les **paramètres propres à la microstructure** que l'on souhaite créer. Il s'agit des paramètres de départ de l'algorithme :

- N : nombre de particules souhaité dans le cube ;
- c : fraction volumique de particules visée ;
- f_e : facteur d'exclusion entre les centres des particules.

Les **paramètres propres à l'algorithme RSA modifié** :

- N_t : nombre maximal de tirages effectués pour placer une nouvelle particule ;
- N_1 : nombre de répétitions de l'étape *dilatation-réarrangements* (paramètre évoluant au cours de l'algorithme) ;
- f_h : facteur d'homothétie de chaque dilatation (paramètre évoluant au cours de l'algorithme) ;
- f_d : coefficient contrôlant l'amplitude des déplacements lors des réarrangements aléatoires (paramètre évoluant au cours de l'algorithme) ;
- N_d : nombre maximal de réarrangements aléatoires d'une particule ;
- N_2 : nombre de répétitions de l'étape *perturbation* (paramètre évoluant au cours de l'algorithme) ;
- f_p : coefficient contrôlant l'amplitude des déplacements lors des perturbations aléatoires (paramètre évoluant au cours de l'algorithme) ;
- N_p : nombre maximal de perturbations aléatoires d'une particule.

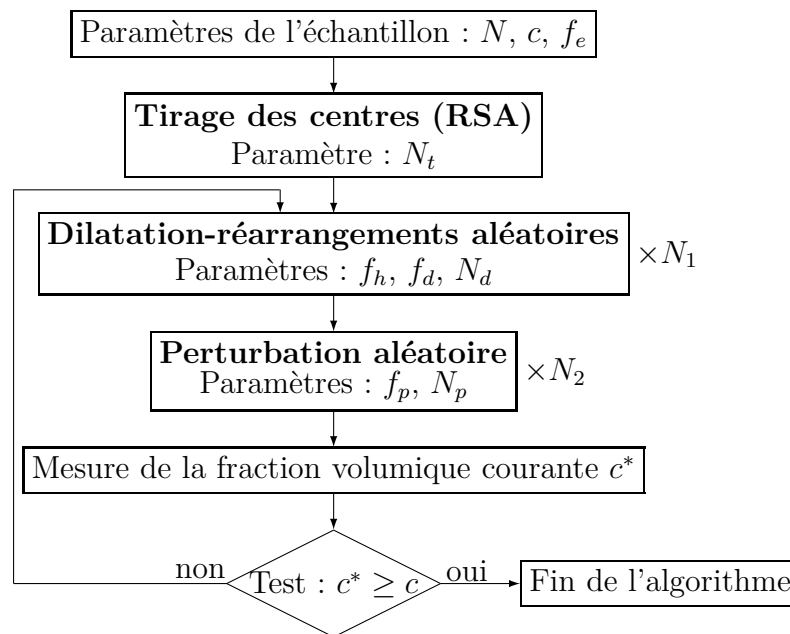


FIG. III.1 – Algorithme de la méthode RSA modifiée.

Le choix de ces paramètres influe grandement sur la rapidité d'exécution de l'algorithme et il est encore difficile de déterminer une séquence optimale. De plus, nous choisissons de faire varier certains paramètres au cours des itérations afin d'accélérer son exécution :

- le facteur d'homothétie f_h diminue progressivement au cours des itérations car, plus la fraction volumique augmente, plus il est difficile de dilater à nouveau avec succès les particules ;

- le nombre de dilatations/réarrangements successifs N_1 augmente progressivement inversement à f_h , afin d'effectuer de plus « petites dilatations » ;
- le nombre de perturbations N_2 augmente également avec la fraction volumique.

Cet algorithme a été implanté dans CAST3M en Gibiane. De nombreux tests ont été réalisés et sa mise en place a été fastidieuse. Le programme s'avère robuste mais les durées de génération des nuages de points sont relativement longues.

Algorithme de Donev Torquato et Stillinger

DONEV *et al.* (2005a,b) proposent un algorithme de dynamique moléculaire basé sur le modèle de LUBACHEVSKY et STILLINGER (1990); LUBACHEVSKY *et al.* (1991), mais modifié pour générer des empilements aléatoires d'ellipsoïdes et, donc, également de sphères de même diamètre. À partir d'un tirage aléatoire initial de particules par un algorithme RSA avec une faible fraction volumique, la méthode consiste à affecter une vitesse aléatoire à chacune des particules et, parallèlement, à augmenter leur taille progressivement dans le temps. Les chocs élastiques³ entre particules les redistribuent et le processus est arrêté lorsque la fraction volumique de particules atteint la valeur cible.

Il s'agit d'un algorithme dit *événementiel* (*event driven*), où l'on calcule, à un instant donné, le prochain événement (choc de deux particules entre elles ou choc d'une particule sur un bord du domaine), puis l'on détermine l'état du système après l'événement (calcul de la nouvelle position des particules, de leur orientation dans le cas de particules non sphériques, de leur vitesse, de leur vitesse angulaire et de leur masse). L'état du système n'est donc pas calculé à des intervalles de temps régulièrement espacés puisque la durée des pas de temps est ajustée aux intervalles de temps entre chaque événement.

Le programme développé pour cet algorithme est disponible sur Internet à l'adresse suivante :

<http://cherry.pit.princeton.edu/donev/Packing/PackLSD/Instructions.html>

Nous utilisons cet algorithme dans le cas particulier de particules sphériques de même diamètre. La figure III.2 présente la génération d'un empilement de sphères dures à différents pas de temps. La rapidité de l'algorithme peut être grandement augmentée en supposant une vitesse initiale des particules nulle. L'efficacité et la robustesse du programme permet de réaliser des tirages de points en grand nombre (supérieurs à 100 000 particules) et rapidement : pour un tirage de 100 000 particules avec une fraction volumique de 45 %, une distance d'exclusion $D_e = 1.05D$ et une vitesse initiale nulle, les durées de calcul sont de l'ordre de 10 minutes en utilisant un PC de bureau (2.4 GHz, 2 Go de RAM). Nous avons donc retenu cet algorithme pour réaliser les échantillons numériques de la microstructure du combustible à particules.

III.2.2 Remarques importantes sur les échantillons numériques réalisés

Si les algorithmes RSA modifié et de DONEV *et al.* (2005b) permettent de construire des distributions de particules présentant la fraction volumique recherchée, leur distribution est

³On suppose la conservation de la quantité de mouvement de l'ensemble des particules.

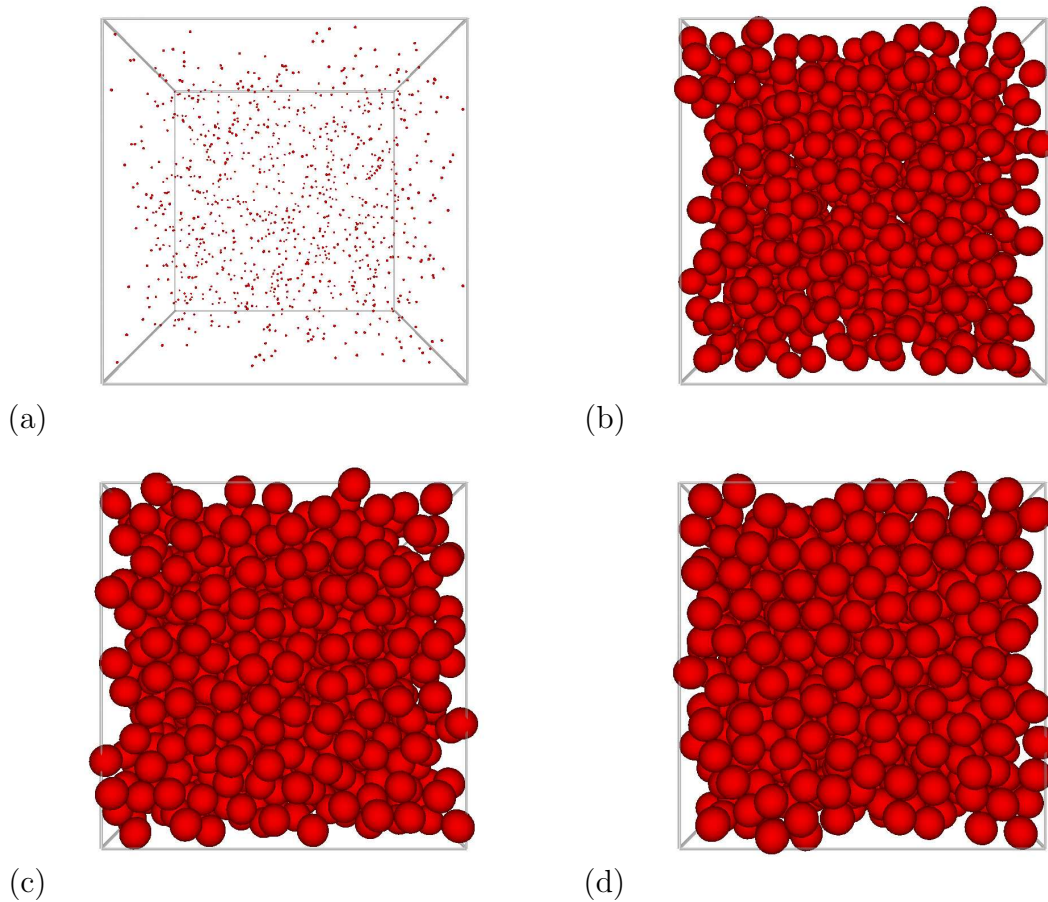


FIG. III.2 – Génération d’un empilement de sphères dures pour une fraction volumique de 45 % par l’algorithme de DONEV *et al.* (2005b) à différents pas de temps : (a) état initial, (b) un tiers du temps final, (c) deux tiers du temps final, (d) temps final.

biaisée sur les bords par la contrainte de devoir former un échantillon cubique. Pour pallier ce problème, deux solutions peuvent être mises en œuvre :

- imposer des conditions de périodicité au nuage de points, ce qui permet de supprimer ces effets de bords mais introduit une périodicité artificielle ;
- réaliser un nuage sur un volume donné et en extraire une sous-zone cubique suffisamment éloignée des bords pour s’affranchir de leurs effets.

C’est cette seconde solution que nous avons choisie afin de réaliser des échantillons non périodiques, plus représentatifs d’une microstructure aléatoire du matériau. La figure III.3 présente un tirage aléatoire de 1 000 points dans lequel on extrait un échantillon numérique cubique de taille $3D$ au centre du tirage. Les points situés à l’extérieur du cube mais dont les sphères associées intersectent les faces du cube sont également extraits.

Enfin, la taille L de l’arête du cube des échantillons numériques est ramenée à l’unité par homothétie de manière à obtenir des *cubes unitaires*. Le rapport taille du cube/diamètre des particules est cependant conservé. La taille des échantillons numériques, définie par la longueur de l’arête du cube, est prise comme un multiple du diamètre des particules.

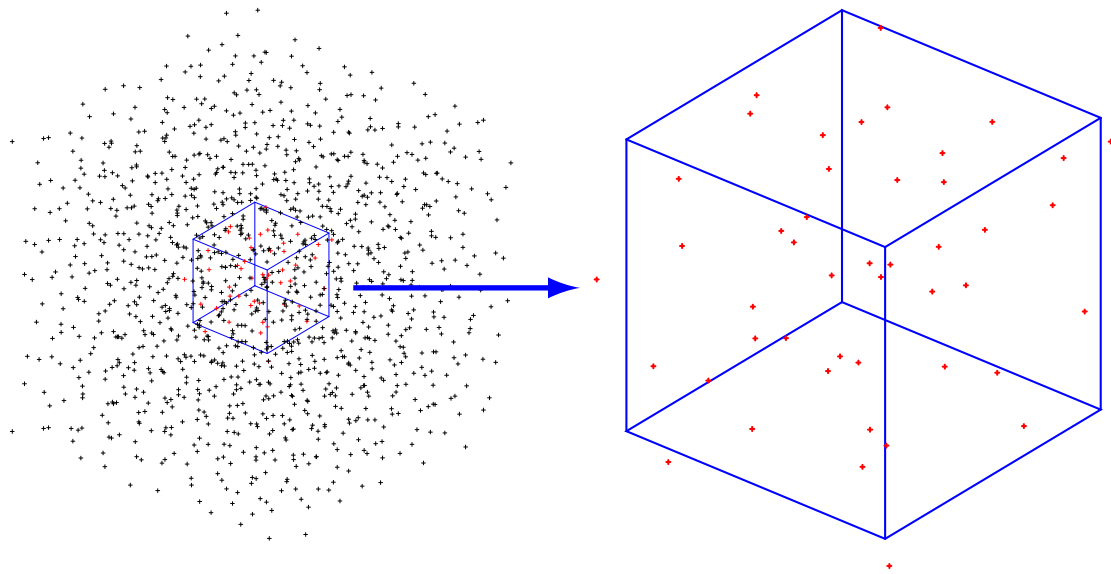


FIG. III.3 – Échantillon numérique de taille $3D$ choisi dans un tirage aléatoire de 1 000 particules (les croix rouges correspondent aux points appartenant à l'échantillon).

III.2.3 Maillage des échantillons numériques

Deux méthodes de maillage ont été mises en œuvre pour discrétiser nos échantillons numériques : une méthode de maillage libre s'appuyant sur les surfaces des particules sphériques et une méthode de maillage régulier basé sur un pavage régulier. Ces deux types de maillages sont illustrés par la figure III.4 pour le même échantillon numérique.

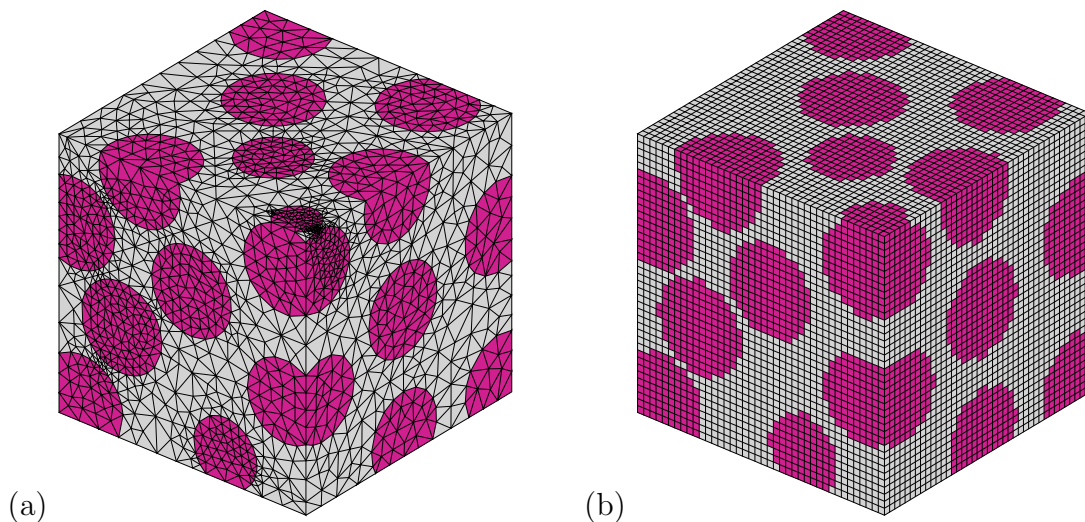


FIG. III.4 – Maillages libre (a) et régulier (b) d'un échantillon numérique de taille $3D$. Le maillage libre utilise des éléments tétraédriques et le maillage régulier des éléments hexaédriques.

Maillage libre

La méthode de maillage libre développée s'appuie sur la partition de l'espace en polyèdres de VORONOÏ construite sur les centres des particules (voir le paragraphe II.3.3). Chaque polyèdre

III.2. GÉNÉRATION DES ÉCHANTILLONS NUMÉRIQUES

de VORONOÏ contient alors une seule particule entourée de matrice. La méthode de maillage consiste à mailler le volume de la particule et de la matrice de chaque polyèdre et d'assembler ces maillages. Les polyèdres sont ainsi maillés un par un. La matrice est maillée en adaptant la taille des éléments à la distance séparant la surface du polyèdre à celle de la particule (afin de représenter correctement les ligaments). La méthode de maillage, dans le cas de particules homogènes, est décrite ci-après et illustrée par la figure III.5 :

- la première étape du maillage consiste à construire la partition de VORONOÏ associée aux centres des particules et à la restreindre au cube de l'échantillon numérique. Les polyèdres sont alors maillés un par un. La partition de VORONOÏ est déterminée par le biais d'une procédure Gibiane que nous avons développée dans CAST3M.
- Un polyèdre donné est maillé en commençant par ses *arêtes*, ce qui décrit le contour de chacune de ses faces. La taille de maille est variable le long d'une arête et est raffinée au milieu de l'arête. Ce raffinement est d'autant plus petit que la distance du milieu de l'arête aux 3 centres de particules définissant cette arête est petite.
- Les *faces* du polyèdre sont ensuite maillées une à une à partir du maillage de ses arêtes en adaptant la taille des éléments en fonction de la distance minimale de la surface du polyèdre au centre de la particule. Chaque face étant commune à deux polyèdres, son maillage n'est réalisé que si le polyèdre voisin n'a pas été traité. Le maillage des faces des polyèdres n'est donc réalisé qu'une seule fois, ce qui assure la conformité du maillage de chaque polyèdre avec ses voisins.
- Le maillage de la *surface des particules* est construit par projection conique du maillage surfacique des faces du polyèdre sur l'enveloppe de la particule. Dans le cas particulier de particules intersectant au moins une face du cube, on ajoute les surfaces planes coupées par les faces du cube au maillage précédent.
- Les *volumes* de la particule et de la matrice sont enfin maillés à partir des maillages de leurs surfaces enveloppes.

Les particules peuvent être maillées de manière homogène ou en représentant les couches d'enrobage, comme le présente la figure III.6. Les couches d'enrobage sont maillées à partir de la surface de la particule. Les enveloppes des différentes couches sont construites par projection conique du maillage de l'enveloppe de la particule, la difficulté résidant dans la détermination des intersections d'une ou plusieurs couches avec les faces du cube. La figure III.7 présente un tirage aléatoire de 30 particules, la partition de VORONOÏ associée et le maillage de la matrice et des particules avec les couches d'enrobage.

Ce type de maillage n'est pas toujours réalisable, notamment pour les échantillons de grande taille où le nombre de particules intersectant une face du cube est important. La difficulté à mailler les couches d'enrobage des particules coupées nous a conduit à modéliser les particules combustible à l'aide de particules homogènes équivalentes dont le comportement thermo-élastique est obtenu par homogénéisation (voir le paragraphe III.2.4).

La finesse du maillage est contrôlée par la taille maximale des éléments. Cette taille dépend du nombre N de particules de l'échantillon numérique et d'un coefficient f_m :

$$\text{Taille de maille} = \frac{f_m}{\sqrt[3]{N}}. \quad (\text{III.5})$$

Le terme $\sqrt[3]{N}$ correspond au nombre moyen de particules le long d'une arête du cube unitaire. Le terme f_m représente donc la taille moyenne des éléments dans une particule. Le choix de la

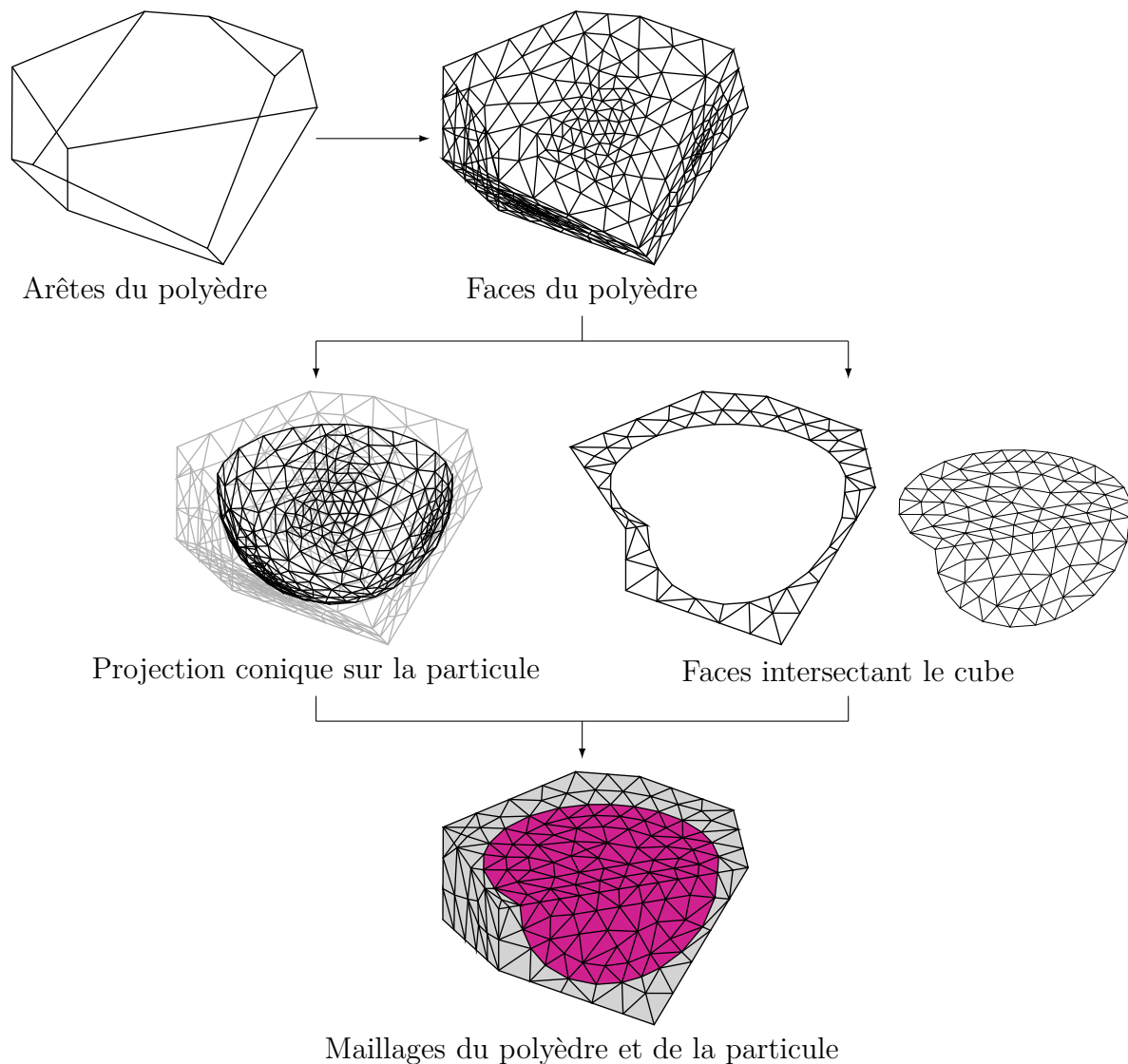


FIG. III.5 – Étapes de construction du maillage de l'intérieur d'un polyèdre.

valeur de f_m est discuté dans le paragraphe IV.2.1. La taille de maille est modifiée localement lors de la construction du maillage afin que *les ligaments de matrice entre particules contiennent toujours au moins deux éléments*. La figure III.8 présente des détails de maillages de quelques polyèdres permettant d'apprécier la qualité des maillages réalisés. Enfin, les figures III.9 et III.10 présentent le maillage d'échantillons de taille $4D$ et $8D$.

Maillage régulier

Un maillage régulier (pavage) du cube unitaire est construit en fixant le nombre d'éléments d'une arête. Les constituants peuvent être discrétisées selon deux méthodes : une discrétisation *par élément* ou *par point d'intégration*.

Dans le cas de la discrétisation par élément, on affecte à chaque élément du maillage les propriétés de la phase dans laquelle se trouve le centre de gravité de l'élément. Cette méthode est simple à mettre en œuvre. Notons que chaque élément appartient à une seule phase, ce qui

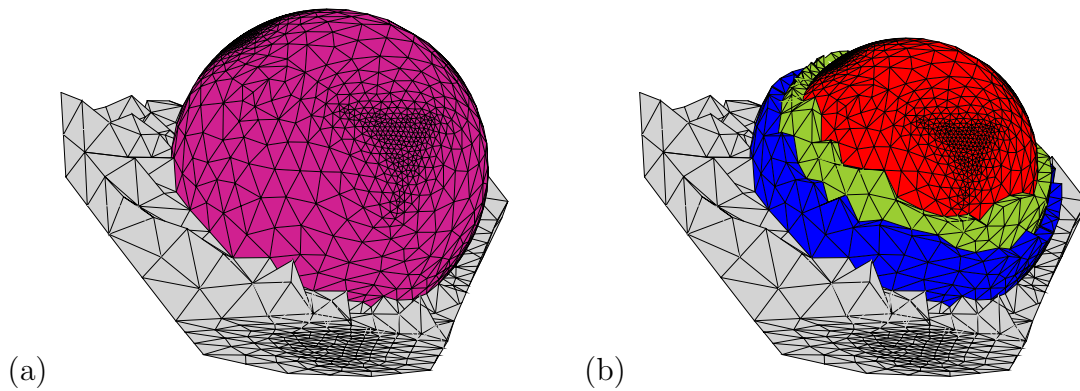


FIG. III.6 – Maillages d'un polyèdre et d'une particule homogène (a) ou multi-couches (b).

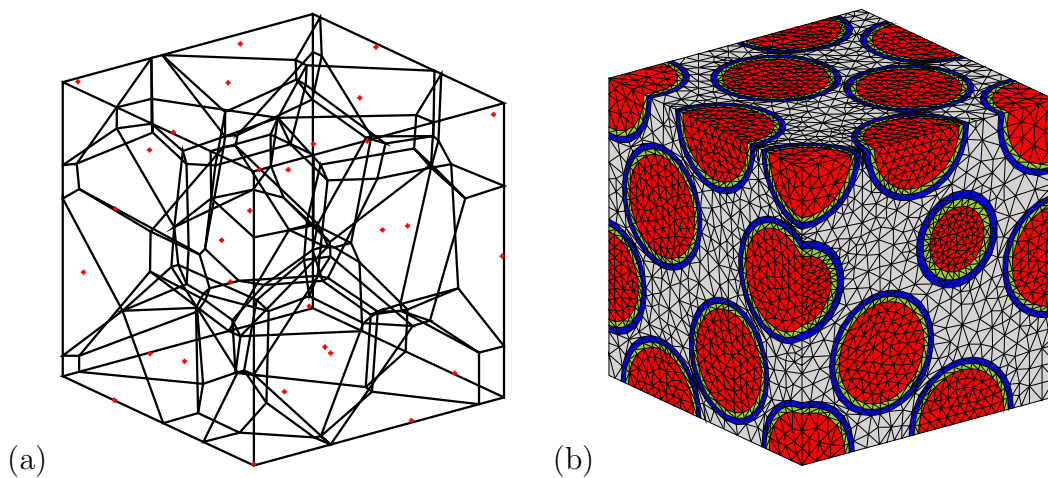


FIG. III.7 – Tirage aléatoire de 30 particules, partition de VORONOÏ associée (a) et maillage avec des particules multi-couches (b).

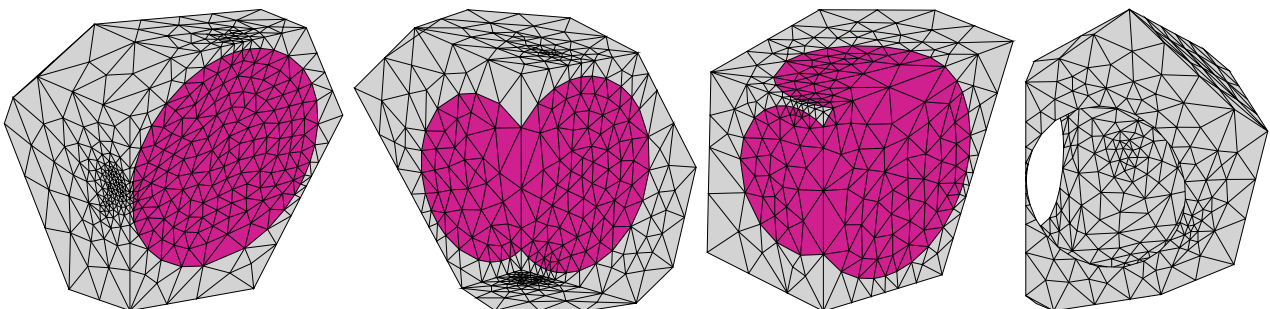


FIG. III.8 – Détails du raffinement de maillage réalisés dans quelques cas particuliers.

conduit à discrétiser l'interface particule-matrice en « marches d'escalier ». Dans le cas de la discrétisation par point d'intégration, on affecte à chaque point d'intégration des éléments du maillage les propriétés de la phase dans laquelle il se situe. Ainsi, un élément fini peut appartenir à plusieurs phases. L'interface particule-matrice est alors décrite par un saut de propriétés dans l'élément fini. Cette technique de construction est également appelée méthode des éléments « multiphasés » (STEINKOPFF et SAUTTER, 1995a,b; LIPPMANN *et al.*, 1997; FOREST, 2004). Les deux méthodes de discrétisation des propriétés sont illustrées par la figure III.11. Cette technique permet également de représenter les couches d'enrobage des particules mais

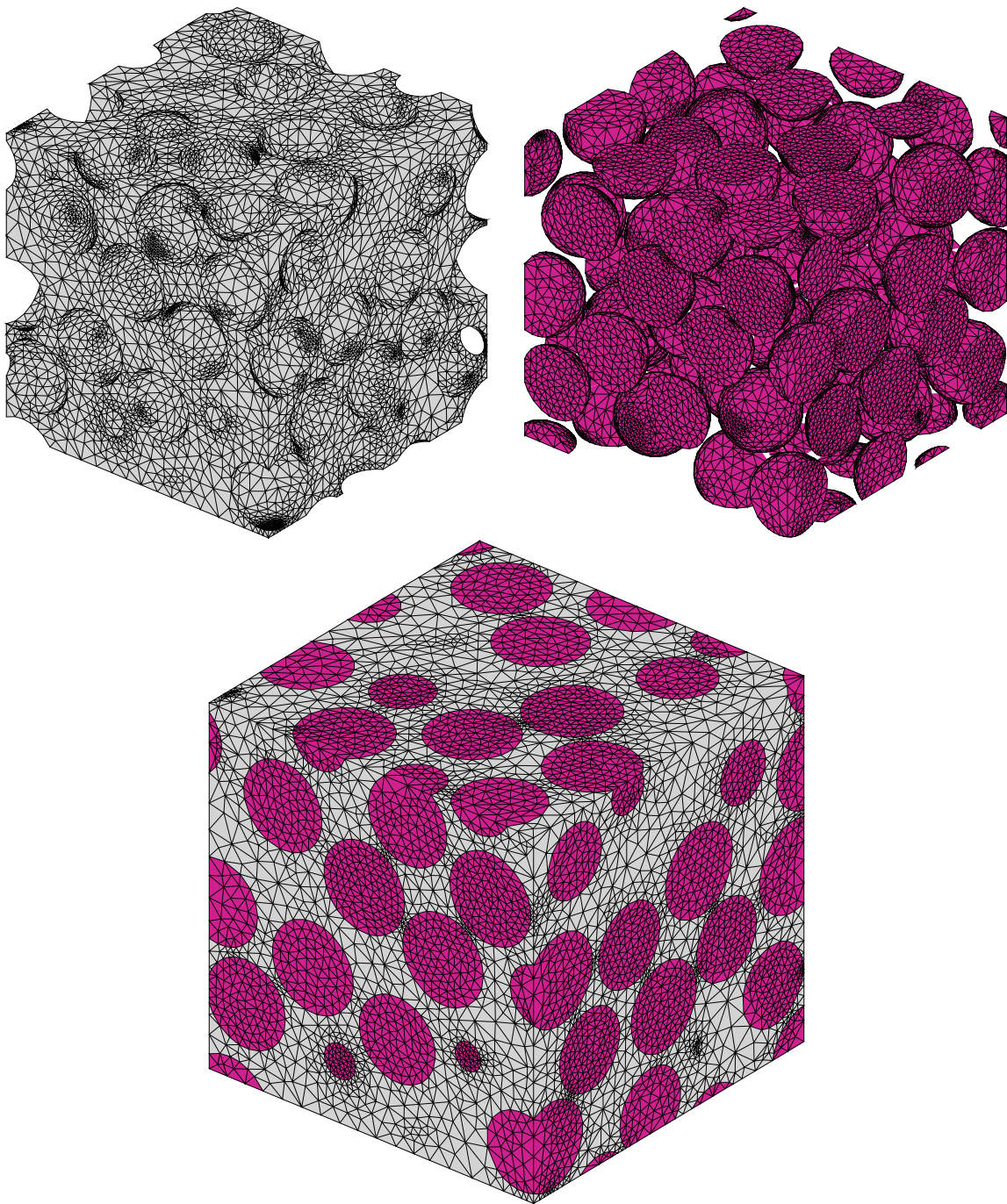


FIG. III.9 – Échantillon numérique de taille $4D$ contenant 94 polyèdres. Maillage libre de la matrice, des particules et du composite.

nécessite un raffinement important car les couches sont fines. Le seul paramètre définissant la taille de maille étant le nombre d'éléments sur l'arête du cube, le raffinement du maillage n'est pas possible localement. Une étude de la taille de maille à adopter est présentée dans le paragraphe IV.2.3.

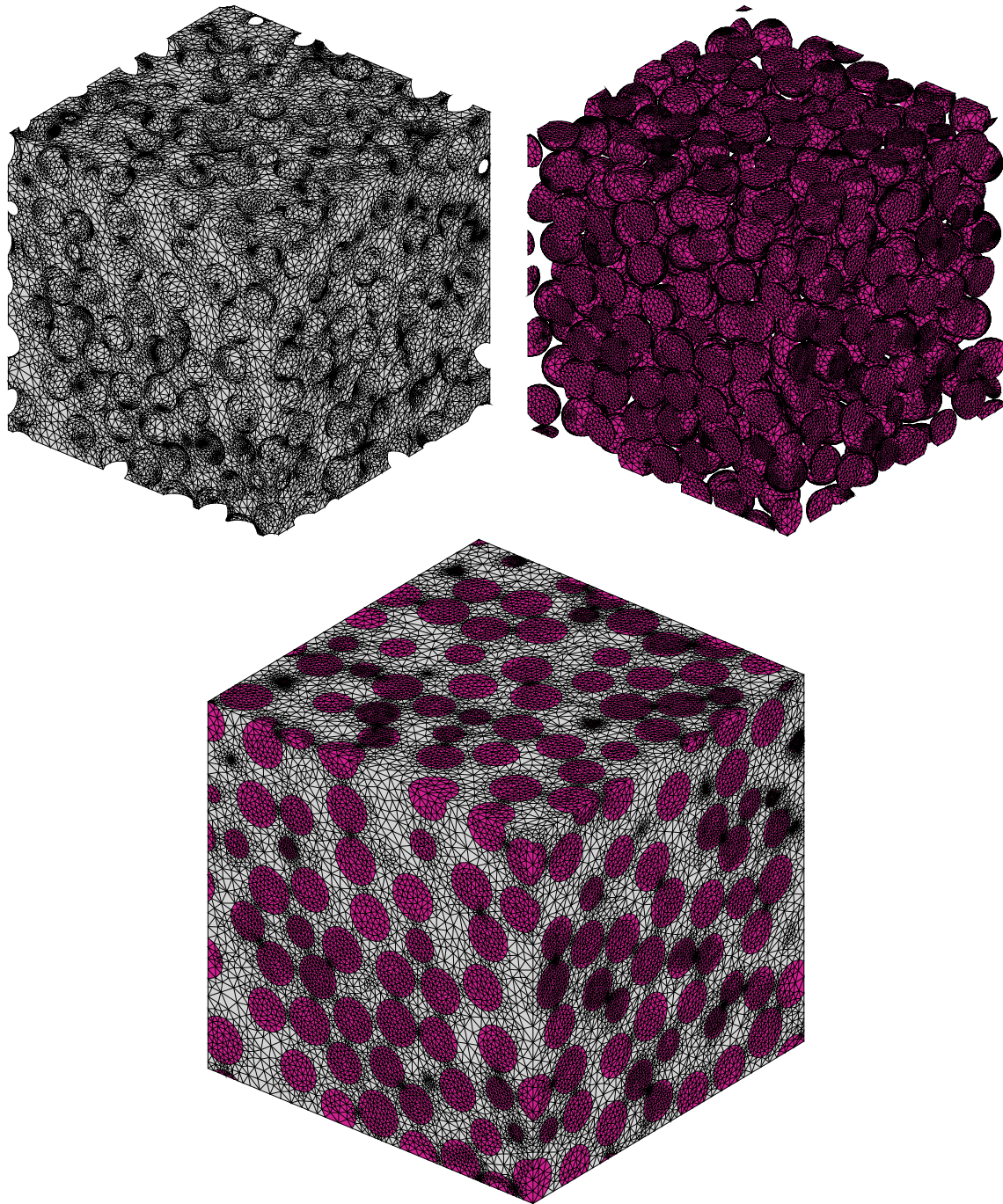


FIG. III.10 – Échantillon numérique de taille $8D$ contenant 594 polyèdres. Maillage libre de la matrice, des particules et du composite.

III.2.4 Particules Homogènes Équivalentes (PHE)

Afin de simplifier la procédure de maillage des particules combustibles, notamment pour les particules intersectant au moins une face du cube, celles-ci peuvent être modélisées à l'aide de particules homogènes équivalentes, notées PHE, dont le comportement thermo-élastique est obtenu par homogénéisation, à l'aide du modèle auto-cohérent $(n+1)$ -phases développé par HERVÉ et ZAOUÏ (1993) pour les modules élastiques et complété par HERVÉ (2002) pour la conductivité et la dilatation thermique. Les propriétés des PHE sont détaillées dans le tableau III.2 où deux

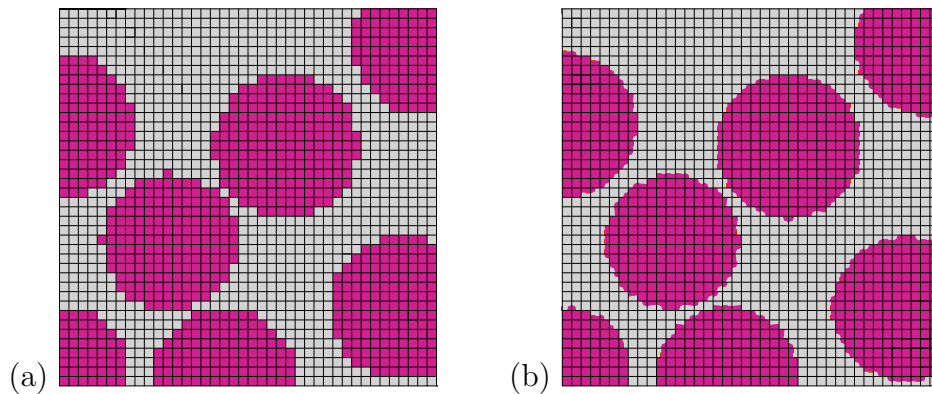


FIG. III.11 – Détail d’un maillage régulier utilisant une discrétisation par élément (a) et par point d’intégration (b).

cas sont envisagés :

- le cas où le noyau d’ UO_2 est adhérent au buffer ;
- le cas où le noyau d’ UO_2 est décollé du buffer, laissant un faible jeu. Dans ce cas, le noyau ne participe pas à la rigidité mécanique de la particule. On suppose, en revanche, que la conductivité thermique reste inchangée, c’est-à-dire que le saut de température dans ce jeu est négligeable.

La validité de la modélisation par des PHE est abordée dans le chapitre suivant.

TAB. III.2 – Propriétés thermo-élastiques des particules homogènes équivalentes (PHE).

Propriété	PHE noyau intègre	PHE noyau décollé	Matrice
Module de YOUNG (GPa)	36.9	4.41	10.2
Coefficient de POISSON	0.26	0.29	0.15
Conductivité thermique ($\text{W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$)	2.13		66.1
Coefficient de dilatation thermique (10^{-6}K^{-1})	8.31		5.68

III.3 Caractéristiques morphologiques des échantillons numériques réalisés

Plusieurs échantillons numériques de tailles différentes ont été réalisés à l’aide de l’algorithme de DONEV *et al.* (2005b). Nous présentons les fractions volumiques de particules obtenues et analysons la distribution spatiale des particules à partir de leurs moments d’inertie et des courbes de covariance.

III.3.1 Fraction volumique de particules

Le tableau III.3 présente le nombre de réalisations par taille d’échantillon, ainsi que des données statistiques sur les fractions volumiques de particules. La figure III.12 présente les fractions

III.3. CARACTÉRISTIQUES MORPHOLOGIQUES DES ÉCHANTILLONS NUMÉRIQUES RÉALISÉS

volumiques de particules des échantillons numériques réalisés en fonction de leur taille. Pour chaque taille, le nombre de réalisations est suffisant pour que l'écart de la fraction volumique moyenne à la valeur cible de 45 % soit inférieur à 1 %.

TAB. III.3 – Liste des échantillons numériques réalisés.

Taille (D)	Volume équivalent en D^3	Nombre de réalisations	Fraction volumique de particules (%)			
			min	max	moyenne	écart-type
3	1242	46	42.2	47.0	45.0	1.23
4	1856	29	43.6	46.3	45.0	0.80
5	3000	24	43.5	45.9	44.9	0.66
6	1080	5	44.3	45.3	44.9	0.39
7	1715	5	44.7	45.0	44.9	0.11
8	512	1	45.1	45.1	45.1	—

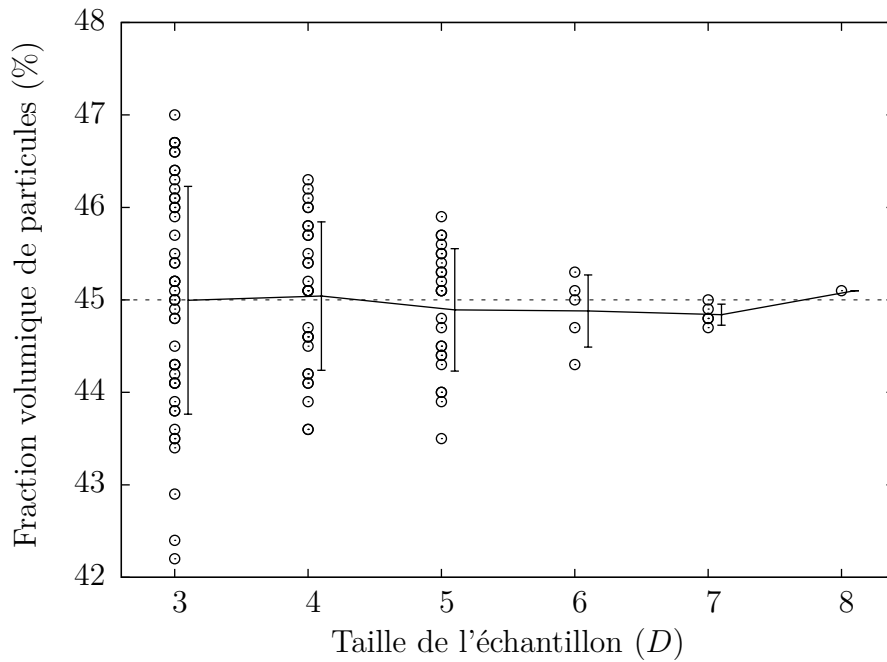


FIG. III.12 – Fractions volumiques de particules des échantillons numériques réalisés en fonction de leur taille (valeurs moyennes et écart-types).

III.3.2 Moments d'inertie

L'isotropie de la distribution spatiale de particules est analysée en calculant les moments d'inertie des échantillons. Le moment d'inertie d'un solide, considéré comme un ensemble continu de points matériels \underline{x} , selon un axe Δ , est donné par la formule suivante :

$$J_{\Delta} = \int \mathcal{D}(\underline{x}, \Delta)^2 dm = \int \mathcal{D}(\underline{x}, \Delta)^2 \rho dV, \quad (\text{III.6})$$

où $\mathcal{D}(\underline{x}, \Delta)$ représente la distance du point \underline{x} à l'axe Δ , dm est la masse élémentaire autour de \underline{x} , ρ la masse volumique et dV l'élément de volume autour de \underline{x} . Les moments d'inertie des sphères sont déterminés à partir de leur maillage grâce à une procédure que nous avons développée dans CAST3M. La figure III.13 présente les moments d'inertie moyens pour 5 tailles d'échantillons et dans les trois directions principales du cube. Le moment d'inertie d'un cube homogène de même masse que les particules est également tracé à titre comparatif. Les moments d'inertie d'un cube sont égaux à $mL^2/6$ (m étant la masse et L la longueur de l'arête du cube). En choisissant une masse volumique et un cube unitaire, le moment d'inertie du cube de même masse que les particules est donc égal à $c/6$ (où c est la fraction volumique de particules). Comme on s'y attendait, les moments d'inerties des échantillons tendent vers celui d'un solide homogène de même masse lorsque leur taille augmente.

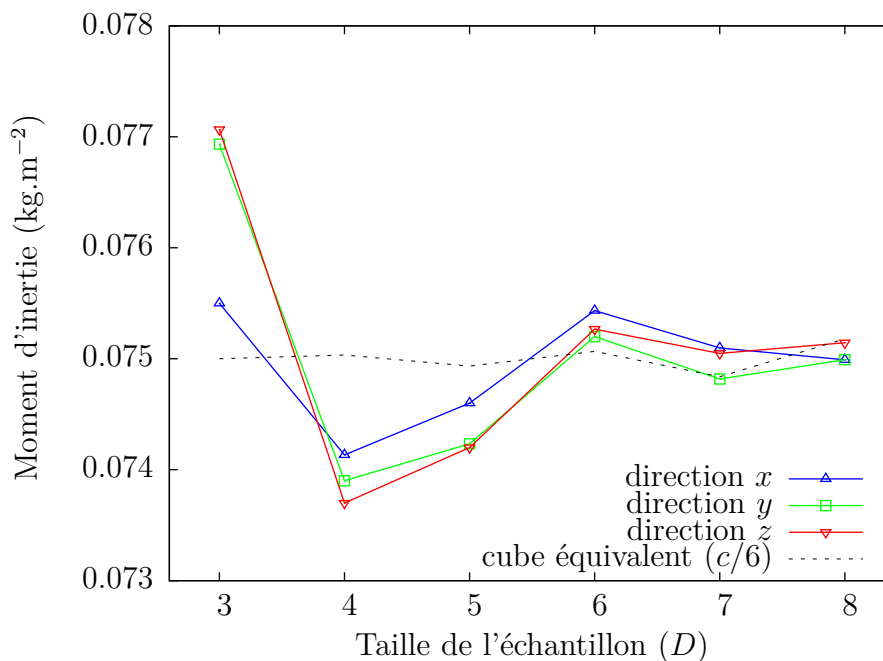


FIG. III.13 – Moments d'inertie moyennés sur trois réalisations de l'ensemble des particules en fonction de la taille des échantillons, dans les directions principales du cube (une seule réalisation est présentée pour l'échantillon de taille $8D$). Le moment d'inertie d'un cube homogène de même masse, pour la fraction volumique de particules moyenne, est donné à titre comparatif.

III.3.3 Courbes de covariance

La covariance spatiale des particules des échantillons numériques est mesurée par une procédure Gibiane que nous avons développée dans le code CAST3M. Cette mesure est réalisée sur le maillage des particules. Les détails du fonctionnement de cette procédure, ainsi qu'un cas test de validation, sont présentés en annexe B page 125. L'isotropie de la distribution des particules d'un échantillon numérique peut être vérifiée en comparant ses courbes de covariance dans les trois directions principales du cube. La figure III.14 présente les courbes de covariance dans les directions x , y et z des échantillons numériques de taille $4D$ et $8D$ possédant une fraction volumique de particules proche de 45 %. Les courbes de covariance pour d'autres tailles d'échantillons sont présentés en annexe D.1 page 131.

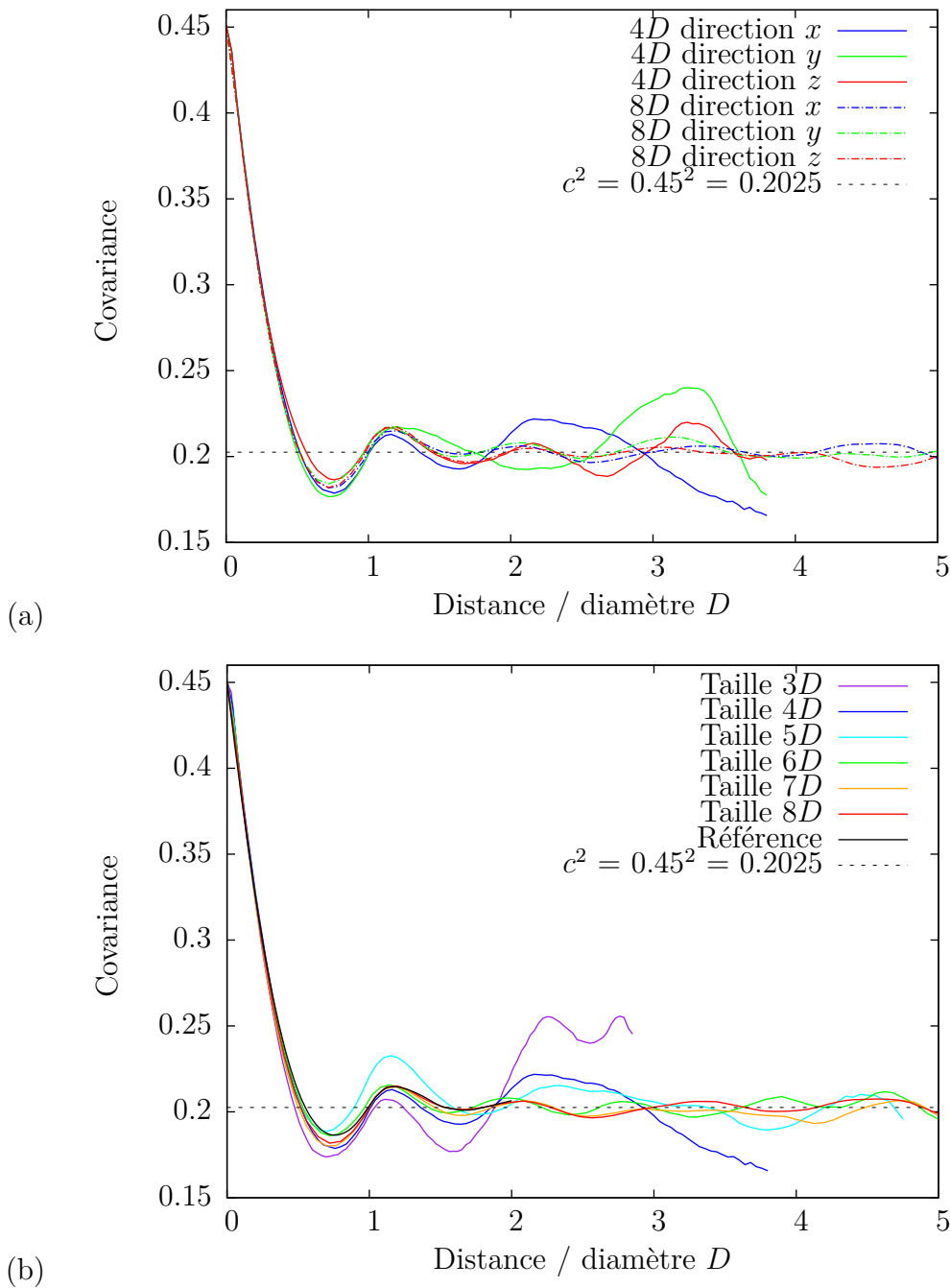


FIG. III.14 – Courbes de covariance dans les trois directions du cube d'échantillons numériques de taille $4D$ et $8D$ (a). Courbes de covariance dans la direction x des échantillons numériques de tailles $3D$ à $8D$ comparée à une courbe de référence de la littérature (TORQUATO, 2002) (b).

La distribution de particules apparait isotrope pour les échantillons de taille supérieure à $4D$ puisque, pour chacun de ces échantillons et pour des distances inférieures à la portée, les courbes de covariance dans les trois directions se superposent. La portée de la covariance correspond à la plus petite distance pour laquelle la covariance atteint sa valeur asymptotique, *i.e.* la fraction volumique de particules au carré. Cette distance, caractéristique de la microstructure, est estimée à $0.51D$ sur les courbes de l'échantillon de taille $8D$. Les oscillations « quasi »périodiques, de la covariance sont caractéristiques d'une distribution de sphères sans interpénétration et la

période des oscillations est environ égale au diamètre des particules (TORQUATO, 2002).

Pour les distances supérieures au $3/4$ de la taille du domaine de mesure, les courbes de covariance sont entachées d'erreur car le domaine de calcul est trop réduit et ne contient pas assez d'information sur la géométrie de la microstructure. Ces effets sont d'autant plus importants que la taille de l'échantillon est petite.

Ces courbes de covariance peuvent être comparées à celle présentée dans la littérature pour une distribution aléatoire de sphères sans interpénétration et servant de référence (TORQUATO, 2002). Cette comparaison est présentée sur la figure III.14 (b). Nous constatons que les courbes de covariance sont en bon accord avec la courbe de référence.

Chapitre IV

Caractérisation des échantillons numériques

IV.1 Présentation des essais numériques

L'objectif est de caractériser le comportement thermo-élastique des échantillons numériques du combustible à particules à une température de 1 450 K. Pour cela, nous analysons la réponse de ces échantillons à différents chargements thermiques et mécaniques afin de déterminer leurs propriétés thermo-élastiques apparentes : modules d'élasticité, conductivité thermique et coefficient de dilatation thermique. Nous nous intéressons également à la distribution des contraintes au sein de la matrice pour un chargement macroscopique donné. Ce paragraphe présente les sollicitations thermiques et mécaniques appliquées aux échantillons numériques, ainsi que la méthode de détermination des propriétés apparentes et de la distribution des contraintes.

IV.1.1 Calcul des propriétés thermo-élastiques apparentes

Nous supposons que les échantillons numériques ont un comportement thermo-élastique isotrope, ce qui sera vérifié par la suite. Dans ce cas, les propriétés apparentes sont entièrement déterminées par les modules de compressibilité et de cisaillement, par la conductivité thermique et le coefficient de dilatation thermique.

Module de compressibilité apparent

Le module de compressibilité apparent K^{app} est déterminé en appliquant un chargement purement sphérique. Pour cela, suivant le type de sollicitation envisagé (CLDH ou CLCH), nous imposons les tenseurs des déformations $\underline{\underline{E}}^0$ ou des contraintes $\underline{\underline{\Sigma}}^0$ suivants :

$$\underline{\underline{E}}^0 = \begin{bmatrix} E^0 & 0 & 0 \\ 0 & E^0 & 0 \\ 0 & 0 & E^0 \end{bmatrix} \quad \text{ou} \quad \underline{\underline{\Sigma}}^0 = \begin{bmatrix} \Sigma^0 & 0 & 0 \\ 0 & \Sigma^0 & 0 \\ 0 & 0 & \Sigma^0 \end{bmatrix}. \quad (\text{IV.1})$$

Le module K^{app} est alors donné par :

$$K^{\text{app}} = \frac{\text{Tr}(\underline{\underline{\Sigma}})}{3\text{Tr}(\underline{\underline{E}})}. \quad (\text{IV.2})$$

Module de cisaillement apparent

Le module de cisaillement apparent G^{app} est déterminé en appliquant un chargement purement déviatorique. Pour cela, suivant le type de sollicitation envisagé (CLDH ou CLCH), nous imposons les tenseurs des déformations $\underline{\underline{E}}^0$ et des contraintes $\underline{\underline{\Sigma}}^0$ suivants :

$$\underline{\underline{E}}^0 = \begin{bmatrix} 0 & E^0 & E^0 \\ E^0 & 0 & E^0 \\ E^0 & E^0 & 0 \end{bmatrix} \quad \text{ou} \quad \underline{\underline{\Sigma}}^0 = \begin{bmatrix} 0 & \Sigma^0 & \Sigma^0 \\ \Sigma^0 & 0 & \Sigma^0 \\ \Sigma^0 & \Sigma^0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (\text{IV.3})$$

Le module G^{app} est alors donné par :

$$G^{\text{app}} = \frac{1}{3} \left(\frac{\Sigma_{yz}}{2E_{yz}} + \frac{\Sigma_{xz}}{2E_{xz}} + \frac{\Sigma_{xy}}{2E_{xy}} \right). \quad (\text{IV.4})$$

Conductivité thermique apparente

La conductivité thermique apparente Λ^{app} est déterminée en appliquant un chargement thermique homogène dans les trois directions de l'espace. Pour cela, suivant le type de sollicitation envisagé (CLGH ou CLFH), nous imposons les vecteurs gradient de température \underline{G}^0 ou flux de chaleur $\underline{\Phi}^0$ suivants :

$$\underline{G}^0 = \begin{bmatrix} G^0 \\ G^0 \\ G^0 \end{bmatrix} \quad \text{ou} \quad \underline{\Phi}^0 = \begin{bmatrix} \Phi^0 \\ \Phi^0 \\ \Phi^0 \end{bmatrix}. \quad (\text{IV.5})$$

La conductivité Λ^{app} est alors donnée par :

$$\Lambda^{\text{app}} = -\frac{\text{Tr}(\underline{\Phi})}{\text{Tr}(\underline{G})}. \quad (\text{IV.6})$$

Remarque : l'utilisation des CLCH nécessite de bloquer les mouvements de corps rigides car seules des conditions sur les vecteurs contraintes sont imposées. La figure IV.1 présente les blocages choisis. Le point P1 est encastré, le point P2 est libre de se déplacer uniquement dans la direction x et le point P3 est libre de se déplacer dans le plan (y, z) . De même, l'utilisation des CLFH pour la thermique nécessite d'imposer la température en un point du volume ; nous choisissons d'imposer la température du point P1 comme nulle.

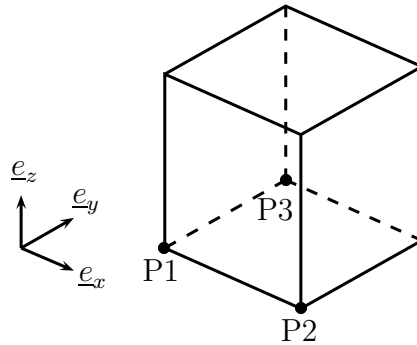


FIG. IV.1 – Blocages des mouvement de corps rigide.

Coefficient de dilatation thermique apparent

Le coefficient de dilatation thermique peut être calculé en imposant une variation de température homogène Θ sur l'échantillon et en calculant la déformation macroscopique induite :

$$\underline{\underline{\alpha}}^{\text{app}} = \frac{\langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle_V}{\Theta}. \quad (\text{IV.7})$$

Mais nous pouvons également l'obtenir à partir de calculs purement mécaniques. Le comportement dilatométrique apparent est obtenu en appliquant la formule (II.71), qui exprime le tenseur de dilatation thermique apparent en fonction du tenseur de localisation des contraintes \mathbb{B} du problème élastique :

$$\underline{\underline{\alpha}}^{\text{app}} = \langle \underline{\underline{\alpha}} : \mathbb{B} \rangle_V. \quad (\text{IV.8})$$

En supposant l'isotropie globale et locale du comportement thermo-élastique, le coefficient de dilatation thermique s'exprime de la façon suivante :

$$\alpha^{\text{app}} = \frac{1}{3} \text{Tr}(\underline{\underline{\alpha}}^{\text{app}}) = \frac{1}{3} \alpha_{kk}^{\text{app}} = \frac{1}{3} \langle \alpha_{ij} B_{ijkk} \rangle_V = \frac{1}{3} \langle \alpha B_{iikk} \rangle_V. \quad (\text{IV.9})$$

Le terme $\frac{1}{3} B_{iikk}$ correspond au terme de localisation de la contrainte hydrostatique pour un chargement sphérique. Dans ce cas, la contrainte hydrostatique locale s'écrit, en fonction du tenseur de localisation :

$$\sigma^H = \frac{1}{3} \sigma_{kk} = \frac{1}{3} B_{kkij} \Sigma_{ij} = \frac{1}{3} B_{kkii} \Sigma^0. \quad (\text{IV.10})$$

En remplaçant la somme sur les B_{iikk} de l'équation (IV.9), le coefficient de dilatation thermique apparent est alors donné par :

$$\alpha^{\text{app}} = \left\langle \alpha \frac{\sigma^H}{\Sigma^0} \right\rangle_V = \frac{1}{3} \left\langle \alpha \frac{\text{Tr}(\underline{\underline{\sigma}})}{\Sigma^0} \right\rangle_V. \quad (\text{IV.11})$$

La dilatation thermique apparente α^{app} peut donc être calculée à partir des caractéristiques élastiques déterminées en CLCH pour un chargement sphérique. Elle peut également être calculée à partir du calcul élastique en CLDH, avec une déformation macroscopique sphérique, en utilisant l'expression de $\underline{\underline{\kappa}}^{\text{app}}$ dans l'équation (II.71) et en appliquant la même démarche pour expliciter le terme de localisation des déformations que celle utilisée ci-dessus pour expliciter le terme de localisation des contraintes.

IV.1.2 Encadrement des propriétés apparentes

Les chargements homogènes au contour fournissent un encadrement des propriétés apparentes de l'échantillon numérique (cf. paragraphe II.1.3. En mécanique, les CLDH conduisent à une borne supérieure de la rigidité apparente et les CLCH à une borne inférieure. Cet encadrement se traduit, pour un comportement isotrope, par les inégalités suivantes sur les modules d'élasticité :

$$K_{\text{CLCH}}^{\text{app}} \leq K^{\text{app}} \leq K_{\text{CLDH}}^{\text{app}}, \quad (\text{IV.12})$$

$$G_{\text{CLCH}}^{\text{app}} \leq G^{\text{app}} \leq G_{\text{CLDH}}^{\text{app}}. \quad (\text{IV.13})$$

De même, en thermique, on obtient l'encadrement de la conductivité thermique apparente suivant :

$$\Lambda_{\text{CLFH}}^{\text{app}} \leq \Lambda^{\text{app}} \leq \Lambda_{\text{CLGH}}^{\text{app}}. \quad (\text{IV.14})$$

IV.1.3 Distribution des contraintes

Nous nous intéressons à la distribution des contraintes dans la matrice. L'objectif est de pouvoir appliquer des critères de dimensionnement. Pour cela, nous calculons la distribution des contraintes, chaque composante étant normée par la contrainte moyenne dans l'échantillon, Σ^0 .

La distribution des contraintes est obtenue en mesurant la proportion volumique de phase dont l'état de contrainte est compris dans un intervalle de contrainte donné. Les contraintes issues d'un calcul par éléments finis étant exprimées aux points d'intégration, la fraction volumique associée à un intervalle de contrainte sera obtenue en sommant les volumes associés aux points d'intégration concernés.

IV.2 Étude de sensibilité aux paramètres de la modélisation

Afin de valider la caractérisation des échantillons numériques, nous avons étudié l'influence de différents paramètres de la modélisation ou vérifié certaines hypothèses :

- taille et type d'éléments finis ;
- isotropie du comportement apparent ;
- méthodes de maillage libre ou régulier ;
- conditions aux limites ;
- utilisation de particules homogènes équivalentes (PHE).

IV.2.1 Sensibilité des résultats au maillage

Afin d'évaluer la sensibilité des résultats au maillage, nous avons comparé les résultats de calculs effectués avec des éléments tétraédriques linéaires (TET4, 4 nœuds, 1 point d'intégration) à ceux effectués avec des éléments tétraédriques quadratiques (TE10, 10 nœuds, 5 points d'intégration). Nous avons également analysé l'influence de la taille de maille. Ces comparaisons sont effectuées sur un échantillon numérique test de taille $3D$, où les particules combustibles sont modélisées par des PHE. L'échantillon est soumis à une traction uniaxiale selon la direction x en utilisant des CL homogènes (CLDH et CLCH). Nous étudions la distribution des contraintes dans la matrice.

La taille de maille maximale des éléments finis dépend du nombre de particules de l'échantillon numérique N et du paramètre f_m (cf. paragraphe III.2.3 et l'équation (III.5)). Le tableau IV.1 présente les caractéristiques des différents maillages réalisés pour cette étude, et, la figure IV.2, les maillages avec $f_m = 0.3$ et $f_m = 0.07$.

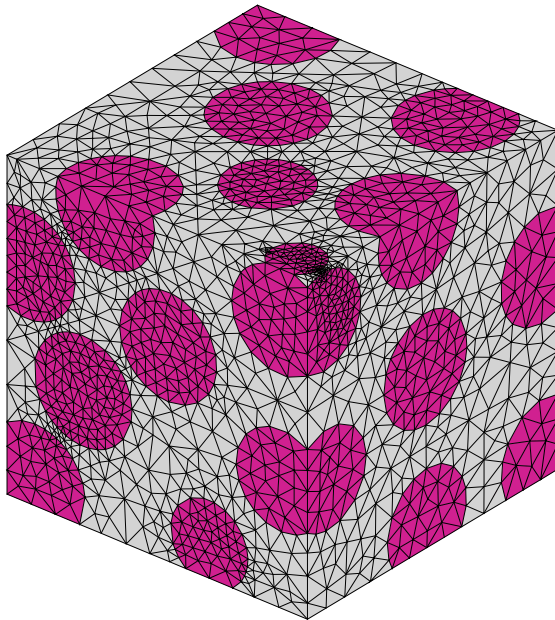
La figure IV.3 présente les distributions des contraintes σ_{xx} et σ_{xy} obtenues avec les différents maillages en CLCH. Les mêmes distributions calculées en CLDH sont présentées sur la figure IV.4. Sur ces deux figures, nous constatons que :

- la distribution des contraintes varie sensiblement en fonction du maillage ;
- la distribution de la contrainte σ_{xx} en CLCH présente deux modes dont le second (pour $\sigma_{xx}/\Sigma^0 = 0.97$) n'apparaît avec les éléments linéaires qu'à partir de $f_m \leq 0.15$;

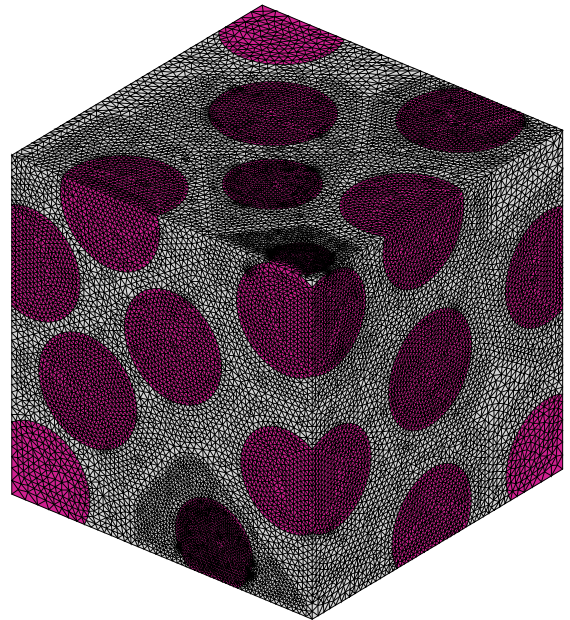
IV.2. ÉTUDE DE SENSIBILITÉ AUX PARAMÈTRES DE LA MODÉLISATION

TAB. IV.1 – Caractéristiques des maillages réalisés (échantillon test de coté $3D$). La dernière colonne présente les durées de calcul selon la finesse du maillage et le type d'éléments utilisés (calcul en CLDH).

f_m	Nombre d'éléments	Type d'éléments	Nombre de nœuds	Temps CPU (s)
0.30	89 757	TET4	16 900	197
		TE10	126 235	6 955
0.20	197 584	TET4	36 353	620
		TE10	274 737	29 178
0.15	408 563	TET4	74 001	2 249
		TE10	563 536	92 396
0.10	915 558	TET4	164 549	9 594
0.07	2 704 939	TET4	475 486	67 977



(a)



(b)

FIG. IV.2 – Maillages de l'échantillon test pour plusieurs valeurs de f_m : (a) $f_m = 0.3$ — 89 757 éléments. (b) $f_m = 0.07$ — 2 704 939 éléments.

- la distribution de la contrainte σ_{xx} en CLDH présente un pic avec les éléments linéaires (pour $\sigma_{xx}/\Sigma^0 \approx 0.5$). L'amplitude de ce pic se réduit en raffinant le maillage mais n'est pas présent avec des éléments quadratiques.

Avec les éléments quadratiques, la solution n'a complètement convergé qu'à partir de $f_m = 0.2$, ce qui correspond à 197 584 éléments. Avec des éléments linéaires, la convergence est beaucoup plus lente : même le maillage le plus fin ($f_m = 0.07$ — 2 704 939 éléments) donne un résultat plus éloigné de la solution convergée que le maillage le plus grossier avec des éléments quadratiques ($f_m = 0.3$ — 89 757 éléments). Les durées de calcul (temps CPU) pour les maillages utilisés sont présentées dans le tableau IV.1.

En conclusion, nous choisissons d'utiliser par la suite des éléments finis quadratiques TE10

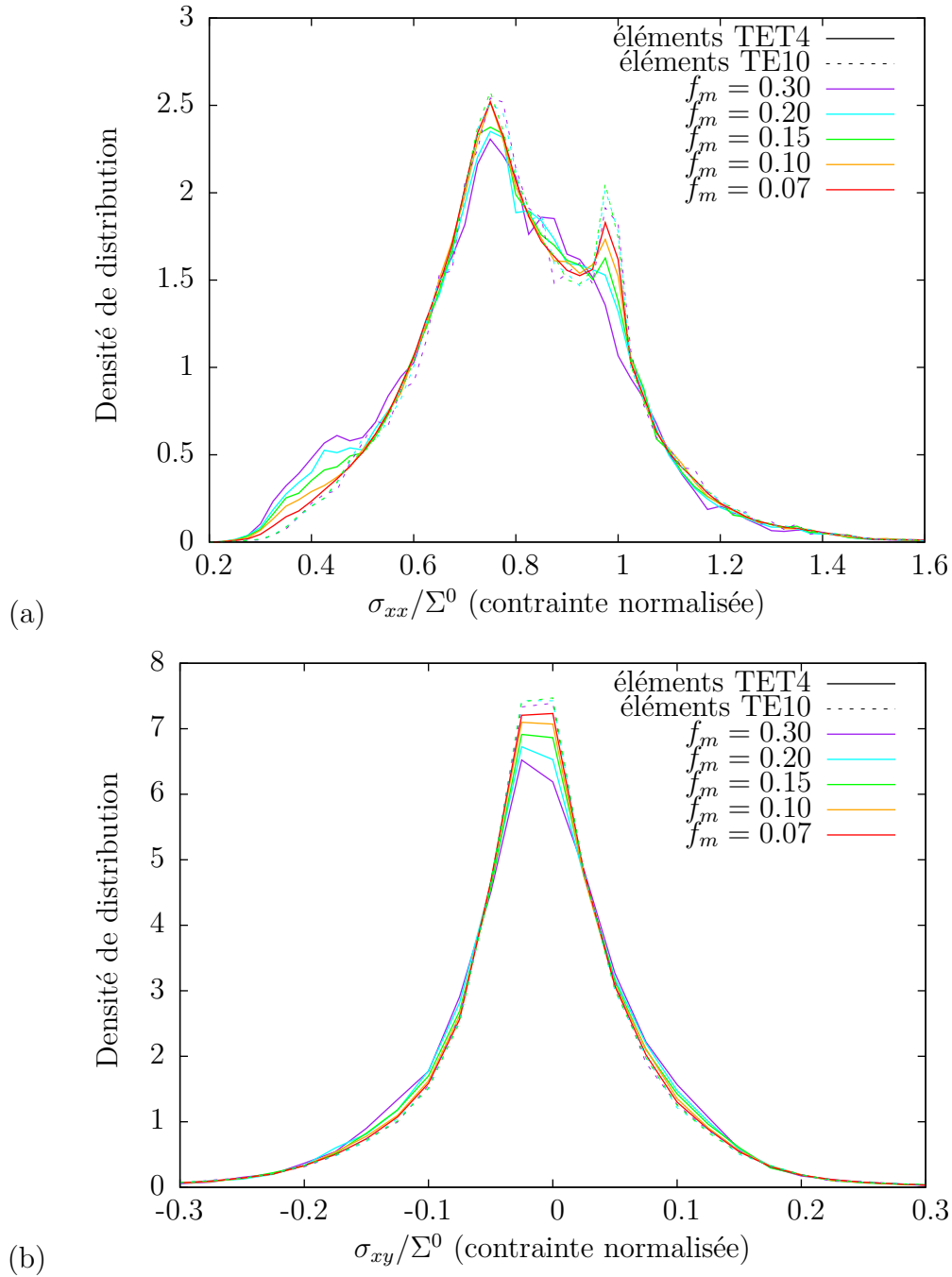


FIG. IV.3 – Distributions des contraintes de traction σ_{xx} (a) et de cisaillement σ_{xy} (b) dans la matrice, normalisées par rapport à la contrainte moyenne Σ^0 , pour différentes valeurs du paramètre de taille de maille f_m et types d'éléments finis. Traction uniaxiale suivant x en CLCH.

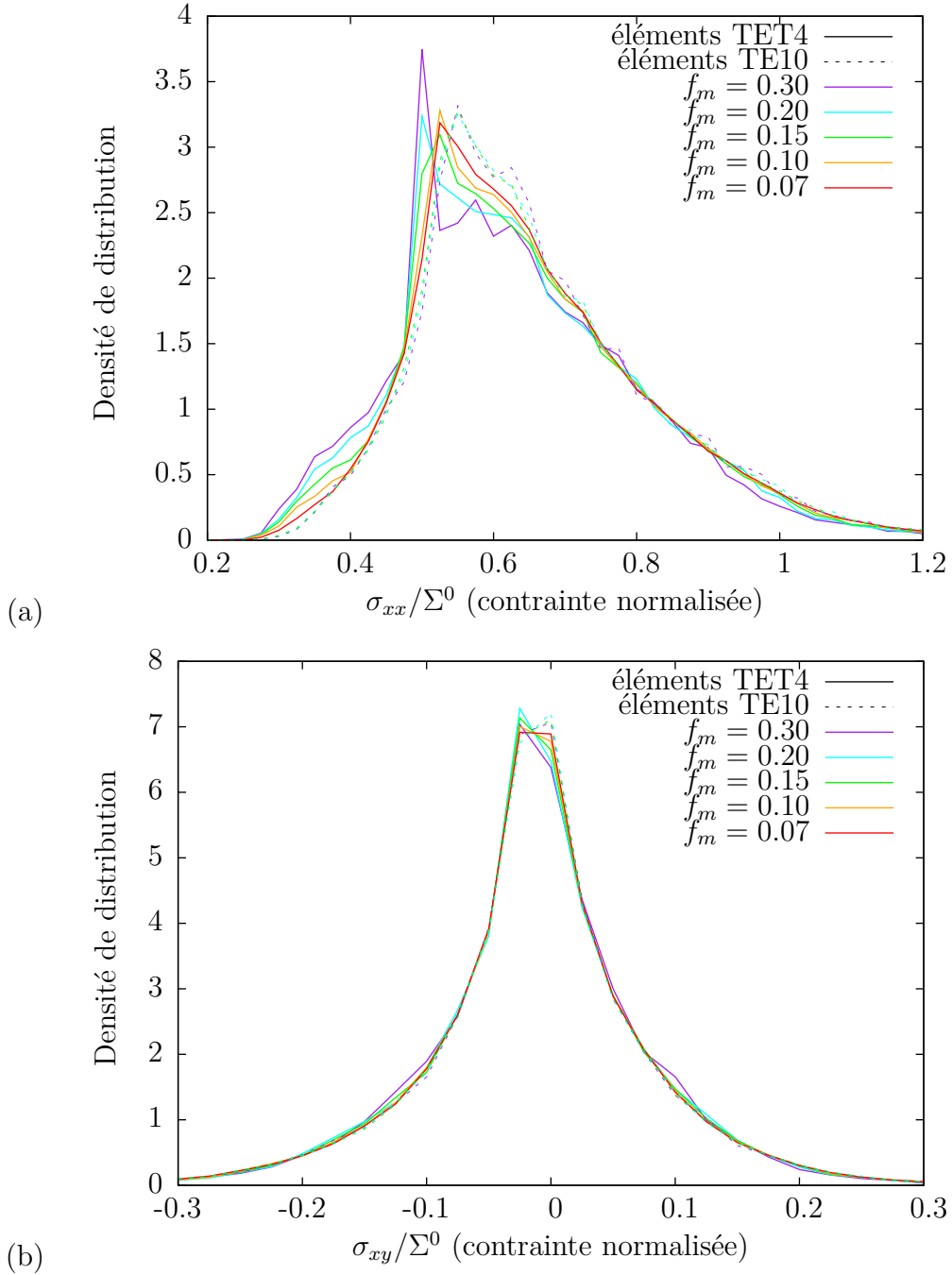


FIG. IV.4 – Distributions des contraintes de traction σ_{xx} (a) et de cisaillement σ_{xy} (b) dans la matrice, normalisée par rapport à la contrainte moyenne Σ^0 , pour différentes valeurs du paramètre de taille de maille f_m et types d'éléments finis. Traction uniaxiale suivant x en CLDH.

avec un paramètre de taille de maille f_m égal à 0.30. Cette taille de maille représente un bon compromis entre précision des résultats et durée de calcul.

IV.2.2 Isotropie du comportement thermo-élastique

L'isotropie du comportement thermo-élastique des échantillons numériques est vérifiée en calculant tous les termes du tenseur des rigidités et du tenseur des conductivités thermiques. Le tenseur des rigidités apparent est obtenu en appliquant 6 chargements linéairement indépendants, chacun de ces chargements permettant de calculer 6 des 36 termes du tenseur. De même, en thermique, le tenseur des conductivités apparent est calculé en appliquant 3 chargements linéairement indépendants, chacun de ces chargements permettant de calculer 3 des 9 termes du tenseur. Les équations (IV.15) et (IV.16) présentent les tenseurs des rigidités d'un échantillon numérique de taille 3D caractérisé avec des CL homogènes (valeurs en GPa)¹. Les équations (IV.17) et (IV.18) présentent les tenseurs des conductivités thermiques du même échantillon également caractérisé avec des CL homogènes (valeurs en W.m⁻¹.K⁻¹).

$$\mathbb{C}_{\text{CLDH}}^{\text{app}} = \begin{bmatrix} \mathbf{20.7} & \mathbf{5.20} & \mathbf{5.22} & 5.01 \text{ E-3} & 2.57 \text{ E-2} & -3.44 \text{ E-2} \\ \mathbf{5.20} & \mathbf{20.7} & \mathbf{5.21} & 1.05 \text{ E-2} & 1.93 \text{ E-3} & -2.51 \text{ E-2} \\ \mathbf{5.22} & \mathbf{5.21} & \mathbf{20.8} & 8.99 \text{ E-3} & 1.00 \text{ E-2} & 8.18 \text{ E-4} \\ \hline 5.01 \text{ E-3} & 1.05 \text{ E-2} & 8.99 \text{ E-3} & \mathbf{7.86} & 2.45 \text{ E-3} & -4.67 \text{ E-3} \\ 2.57 \text{ E-2} & 1.93 \text{ E-3} & 1.00 \text{ E-2} & 2.45 \text{ E-3} & \mathbf{7.87} & 8.56 \text{ E-4} \\ -3.44 \text{ E-2} & -2.51 \text{ E-2} & 8.18 \text{ E-4} & -4.67 \text{ E-3} & 8.56 \text{ E-4} & \mathbf{7.85} \end{bmatrix} \quad (\text{IV.15})$$

$$\mathbb{C}_{\text{CLCH}}^{\text{app}} = \begin{bmatrix} \mathbf{18.6} & \mathbf{4.31} & \mathbf{4.36} & -3.12 \text{ E-3} & 4.43 \text{ E-2} & -4.12 \text{ E-2} \\ \mathbf{4.31} & \mathbf{18.6} & \mathbf{4.31} & 2.16 \text{ E-2} & 4.26 \text{ E-4} & -3.81 \text{ E-2} \\ \mathbf{4.36} & \mathbf{4.31} & \mathbf{18.7} & 1.11 \text{ E-4} & 2.16 \text{ E-2} & 4.59 \text{ E-3} \\ \hline -3.12 \text{ E-3} & 2.16 \text{ E-2} & 1.11 \text{ E-4} & \mathbf{7.19} & -3.53 \text{ E-3} & -3.22 \text{ E-3} \\ 4.43 \text{ E-2} & 4.26 \text{ E-4} & 2.16 \text{ E-2} & -3.53 \text{ E-3} & \mathbf{7.22} & 4.60 \text{ E-4} \\ -4.12 \text{ E-2} & -3.81 \text{ E-2} & 4.59 \text{ E-3} & -3.22 \text{ E-3} & 4.60 \text{ E-4} & \mathbf{7.18} \end{bmatrix} \quad (\text{IV.16})$$

$$\underline{\underline{\Lambda}}_{\text{CLGH}}^{\text{app}} = \begin{bmatrix} \mathbf{32.4} & -0.134 & 0.185 \\ -0.134 & \mathbf{32.4} & 0.0869 \\ 0.185 & 0.0869 & \mathbf{32.6} \end{bmatrix} \quad (\text{IV.17})$$

$$\underline{\underline{\Lambda}}_{\text{CLFH}}^{\text{app}} = \begin{bmatrix} \mathbf{17.9} & 0.294 & -0.232 \\ 0.294 & \mathbf{17.1} & 0.0819 \\ -0.232 & 0.0819 & \mathbf{17.6} \end{bmatrix} \quad (\text{IV.18})$$

On vérifie que le comportement apparent de l'échantillon est isotrope et que les tenseurs des rigidités et des conductivités sont symétriques. L'isotropie de plusieurs autres échantillons de même taille et de taille supérieure a également été vérifiée de cette manière. La caractérisation du comportement thermo-mécanique peut donc se restreindre au comportement isotrope.

IV.2.3 Comparaison des techniques de maillage

La méthode de maillage régulier est comparée à la méthode de maillage libre en cherchant le niveau de raffinement du maillage régulier nécessaire pour obtenir la même précision qu'avec le

¹La notation de VOIGT est utilisée avec $\underline{\underline{\Sigma}} \equiv {}^t[\Sigma_{xx} \ \Sigma_{yy} \ \Sigma_{zz} \ \Sigma_{xy} \ \Sigma_{xz} \ \Sigma_{yz}]$ et $\underline{\underline{E}} \equiv {}^t[E_{xx} \ E_{yy} \ E_{zz} \ 2E_{xy} \ 2E_{xz} \ 2E_{yz}]$

maillage libre. Cette étude sur le maillage régulier a été réalisée au cours du stage de GHAMRI (2009). Les éléments finis utilisés pour les maillages réguliers sont des hexaèdres linéaires (CUB8, 8 nœuds, 8 points d'intégration). La comparaison est faite sur les propriétés apparentes et la distribution des contraintes d'un échantillon de taille 3D soumis à un chargement sphérique imposé en CLDH. La figure IV.5 présente les valeurs du module de compressibilité apparent obtenues avec un maillage régulier en fonction du nombre de nœuds du maillage. Ces valeurs sont normées par rapport au résultat obtenu avec un maillage libre qui sert de solution de référence ($f_m = 0.30$ — 89 757 éléments TE10 — 126 235 nœuds). Les résultats donnés par les deux méthodes de discrétisation des propriétés (cf. paragraphe III.2.3) sur le maillage régulier sont quasiment identiques.

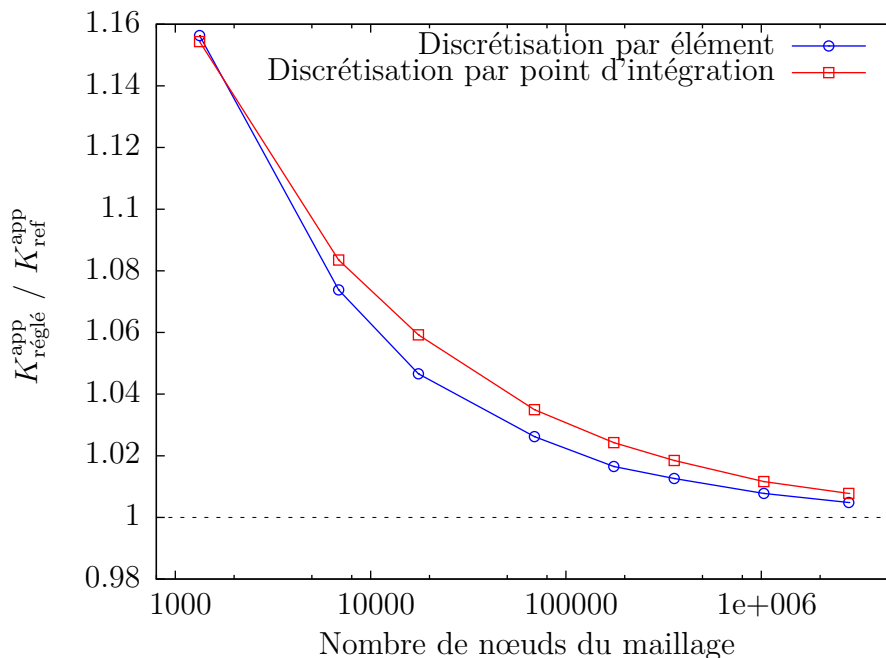


FIG. IV.5 – Évolution du module de compressibilité apparent, d'un échantillon de taille 3D, en fonction du nombre de nœuds du maillage régulier. La valeur est normée par la valeur de référence obtenue avec un maillage libre à 126 235 nœuds.

La comparaison des deux méthodes de maillage a également porté sur la distribution des contraintes. La figure IV.6 présente les distributions de la contrainte hydrostatique σ^H dans la matrice obtenues avec des maillages réguliers et avec un maillage libre pour un chargement macroscopique sphérique. On constate que les distributions de contrainte obtenues avec les maillages réguliers convergent vers la solution obtenue avec le maillage libre. Toutefois, le calcul avec un maillage régulier nécessite d'utiliser un maillage très fin pour retrouver la solution donnée par le maillage libre. Les deux méthodes de discrétisation des propriétés, par élément ou par point d'intégration, donnent des résultats sensiblement équivalents.

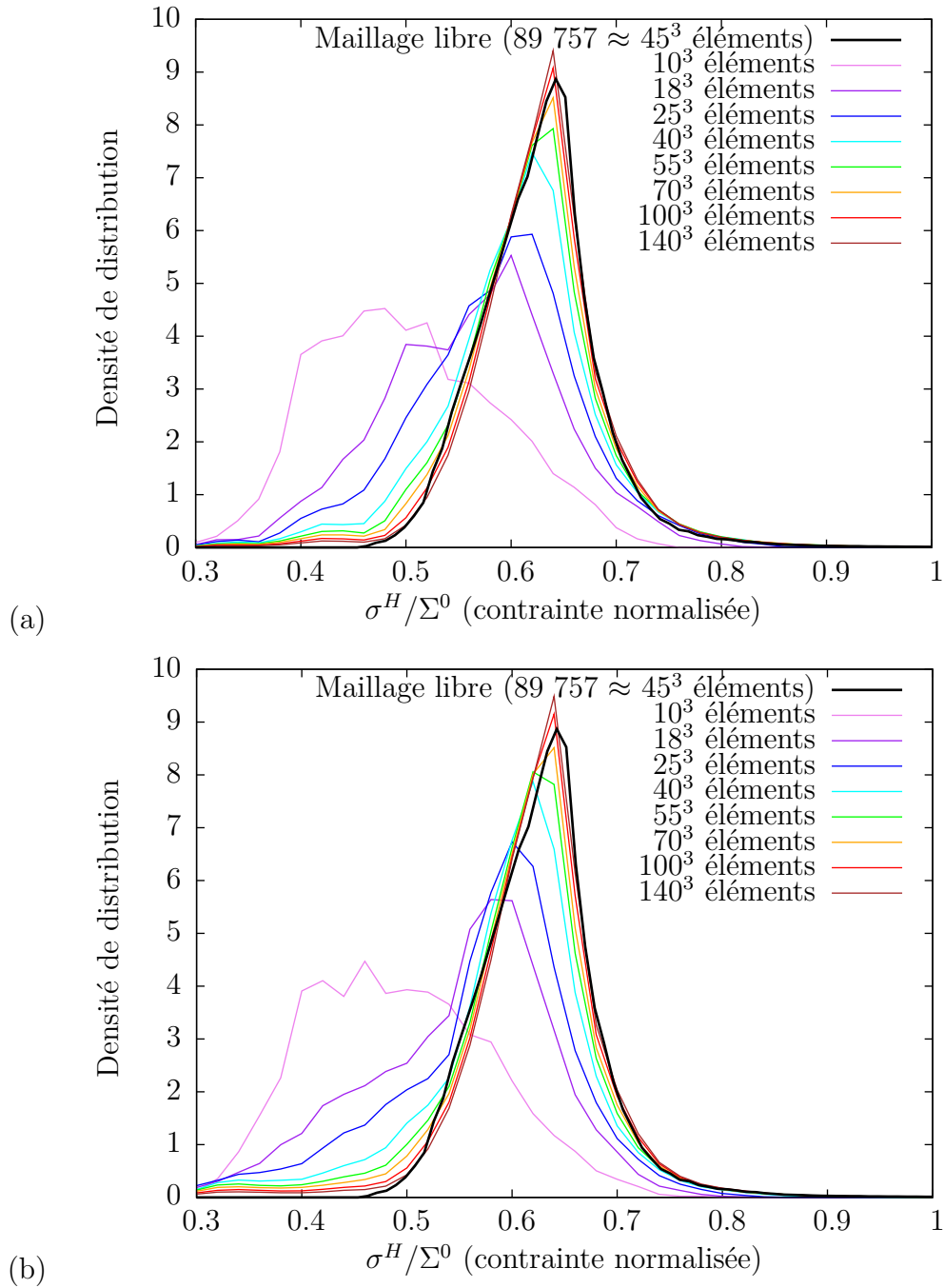


FIG. IV.6 – Distributions de la contrainte hydrostatique σ^H dans la matrice, normalisée par rapport à la contrainte moyenne Σ^0 , pour différents maillages réguliers et pour le maillage libre. Échantillon de taille 3D, chargement sphérique imposé en CLDH. Discretisation des propriétés par élément (a) et par point d'intégration (b).

IV.2.4 Effets de bords et méthode d'érosion

Mise en évidence des effets de bords

Afin d'observer l'influence des CL sur nos simulations, comparons les propriétés mécaniques apparentes de trois échantillons de taille 3D calculées avec des CL homogènes (CLDH et CLCH). Leurs valeurs moyennes et leurs écarts-types sont présentés dans le tableau IV.2. L'encadrement, très resserré, des modules d'élasticité apparents est dû au faible contraste entre les constituants.

TAB. IV.2 – Modules d'élasticité apparents calculés en CLDH et en CLCH : valeurs moyennes et écarts types pour trois échantillons de taille 3D.

Conditions aux limites	K^{app} (GPa)	G^{app} (GPa)
CLDH	10.3 (0.09)	7.86 (0.02)
CLCH	9.13 (0.09)	7.20 (0.02)
Écart relatif (%)	13	9.2

La différence entre les résultats obtenus pour ces deux types de CL provient essentiellement des bords de l'échantillon, comme le montre les isovaleurs de la figure IV.7. Cette figure présente la valeur absolue de la différence des champs de contrainte obtenus en CLDH et CLCH dans le cas de chargements sphérique et de cisaillement pur. Les figures D.4 et D.5, en annexe D.2 page 135, présentent les mêmes cartes d'isovaleurs pour des échantillons de taille plus importante. La contrainte moyenne est de 10 MPa dans les deux cas. Sur ces figures, nous pouvons observer que l'écart sur le champ de contrainte peut être supérieur à 5 MPa, soit 50 % de la valeur moyenne appliquée.

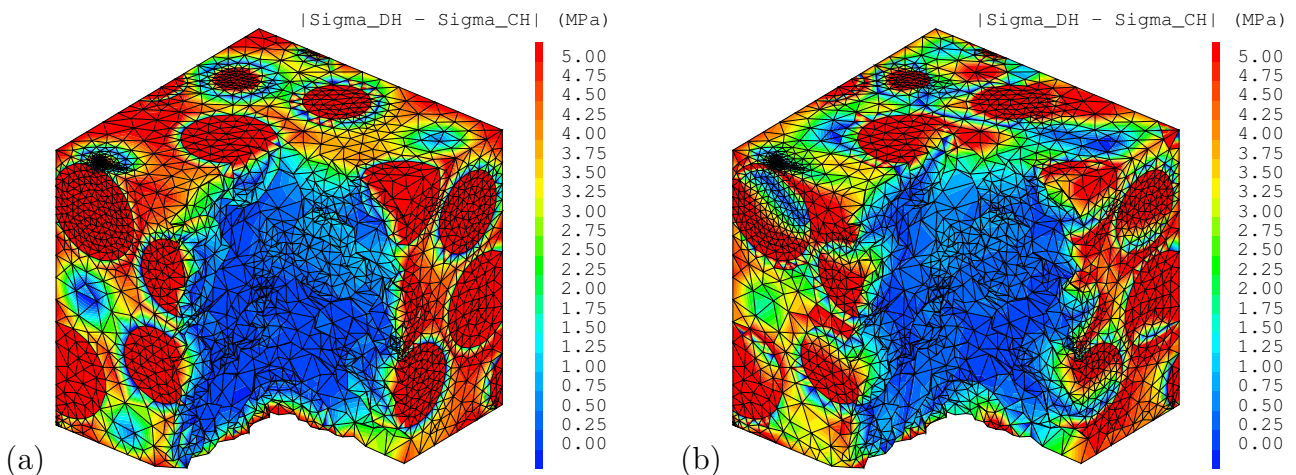


FIG. IV.7 – Écarts entre les champs de contrainte obtenus en CLDH et CLCH. Contrainte hydrostatique pour un chargement sphérique (a), contrainte de cisaillement xy pour un chargement en cisaillement xy (b). La contrainte moyenne est de 10 MPa.

L'influence de ces effets de bords diminue avec la taille des échantillons car le rapport surface/volume diminue également, d'où l'intérêt d'utiliser des échantillons de taille importante. Une alternative est d'utiliser des CL qui perturbent moins les solutions aux bords. Ainsi, les

CL périodiques fournissent une « meilleure » estimation des propriétés apparentes d'un volume élémentaire car elles suppriment artificiellement les bords du volume. Cependant, la mise en œuvre de ce type de conditions nécessite le plus souvent d'utiliser un maillage périodique, ce qui n'est pas toujours aisé, ni strictement représentatif de la microstructure.

Présentation de la méthode d'érosion

Afin de s'affranchir de ces effets de bord et obtenir une solution indépendante du type de CL utilisé, nous proposons une méthode que nous avons appelée « méthode d'érosion ». L'idée part du constat que, pour un échantillon numérique donné, les champs mécaniques obtenus pour différents types de CL diffèrent essentiellement sur les bords du domaine (cf. figure IV.7). La méthode d'érosion consiste à retirer des champs solutions $\{\underline{u}, \underline{\varepsilon}, \underline{\sigma}\}$, obtenus sur le maillage \mathcal{M} de l'échantillon, le domaine perturbé par l'application des CL, *i.e.* un voisinage plus ou moins étendu des bords de l'échantillon. Pour cela :

- On retire les éléments finis du maillage \mathcal{M} situés à une certaine distance des bords, appelée distance d'érosion et notée d_e . Le maillage restant est appelé maillage érodé \mathcal{M}_{d_e} .
- On réduit les champs solutions sur le maillage érodé, ce qui nous fournit une « solution érodée », notée $\{\underline{u}, \underline{\varepsilon}, \underline{\sigma}\}_{d_e}$, que l'on espère indépendante du type de CL appliquées.

Le maillage érodé \mathcal{M}_{d_e} est défini comme l'ensemble des éléments $El(\mathcal{M})$ et des nœuds $\underline{x}(\mathcal{M})$ du maillage \mathcal{M} dont la distance des nœuds aux bords du maillage est supérieure à la distance d'érosion d_e :

$$\mathcal{M}_{d_e} = \{(El(\mathcal{M}), \underline{x}(\mathcal{M})) \mid \mathcal{D}(\underline{x}, \partial\mathcal{M}) > d_e\} \quad (\text{IV.19})$$

où $\mathcal{D}(\underline{x}, \partial\mathcal{M})$ est la distance d'un nœud \underline{x} au bord du maillage $\partial\mathcal{M}$.

La figure IV.8 présente un maillage érodé pour plusieurs valeurs de d_e . Notons qu'une approche similaire à récemment été utilisée par FREUND *et al.* (2010); KARAKOÇ et FREUND (2010) pour des microstructures 2D en nid d'abeilles.

Les déformations et contraintes macroscopiques de la solution érodée sont définies sur le volume érodé :

$$\underline{\underline{E}}_{d_e} = \langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle_{\mathcal{M}_{d_e}} \quad \text{et} \quad \underline{\underline{\Sigma}}_{d_e} = \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_{\mathcal{M}_{d_e}}. \quad (\text{IV.20})$$

Les propriétés apparentes de la solution érodée sont calculées à partir de ces grandeurs macroscopiques. Les modules d'élasticité de la solution érodée sont ainsi calculés selon les deux équations (IV.2) et (IV.4) :

$$K_{d_e}^{\text{app}} = \frac{\text{Tr}(\underline{\underline{\Sigma}}_{d_e})}{3\text{Tr}(\underline{\underline{E}}_{d_e})} \quad \text{et} \quad G_{d_e}^{\text{app}} = \frac{1}{3} \left(\frac{\Sigma_{yz_{d_e}}}{2E_{yz_{d_e}}} + \frac{\Sigma_{xz_{d_e}}}{2E_{xz_{d_e}}} + \frac{\Sigma_{xy_{d_e}}}{2E_{xy_{d_e}}} \right). \quad (\text{IV.21})$$

L'analyse des solutions érodées montre que le comportement apparent devient indépendant des CL appliquées. La figure IV.9 présente l'évolution des modules d'élasticité apparents d'échantillons de taille 3D et 6D en fonction de la distance d'érosion utilisée. La figure IV.10 présente l'évolution de la conductivité apparente. Les modules d'élasticité apparents en CLDH et CLCH convergent vers une même valeur pour $d_e \geq 0.5D$. La conductivité thermique apparente obtenue en CLGH et CLFH converge pour $d_e \geq 0.6D$. Les valeurs des propriétés apparentes fluctuent de manière similaire pour un même échantillon. Ces fluctuations sont à relier avec celles de la fraction volumique de particules des maillages érodés, également tracée

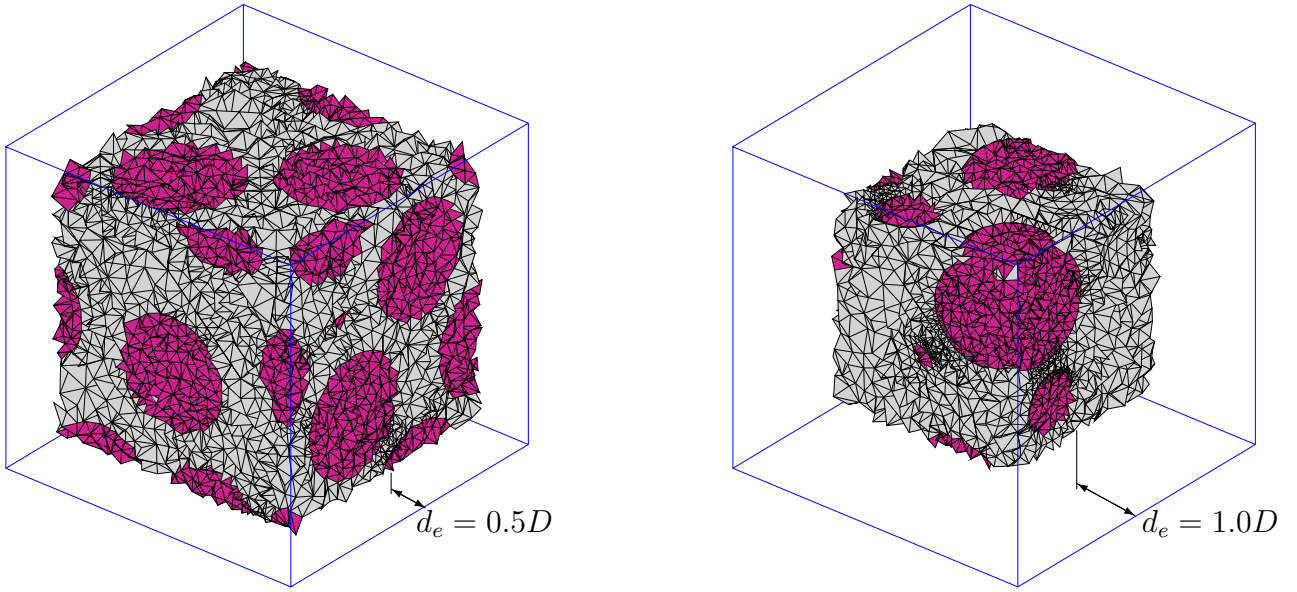


FIG. IV.8 – Sous-maillages d’un échantillon numérique de taille $3D$ pour plusieurs valeurs de la distance d’érosion d_e .

sur ces graphiques.

La distribution des contraintes au sein de la matrice devient également indépendante des CL appliquées à partir d’une certaine distance d’érosion. La figure IV.11 (a) présente les distributions de contraintes normalisées par rapport à la contrainte moyenne pour un échantillon de taille $8D$ soumis à un chargement sphérique en CLDH et en CLCH. La figure IV.11 (b) présente ces mêmes distributions calculées sur la solution érodée avec $d_e = 0.5D$ et normalisée par rapport à la contrainte moyenne de la solution érodée. On trouvera en annexe D.2 page 135 ces mêmes distributions de contraintes pour d’autres valeurs de d_e , ainsi que pour un chargement déviatorique. À partir d’une certaine distance d’érosion, les fonctions de distributions sont identiques en CLDH et CLCH.

Sur la figure IV.11 (a), nous pouvons remarquer la présence d’un pic sur la distribution de σ_{xx} dans l’échantillon complet pour le chargement sphérique appliqué en CLCH. Ce pic apparaît pour la valeur $\sigma_{xx} = \Sigma^0$ et n’est plus présent dès que l’on érode le maillage. Il correspond aux éléments finis situés sur les bords sur lesquels la contrainte macroscopique est imposée.

Afin d’évaluer quantitativement la pertinence de la méthode d’érosion, nous proposons de mesurer l’écart entre les fonctions de distribution des contraintes obtenues pour les deux CL et d’observer l’évolution de cet écart en fonction de la distance d’érosion. L’écart entre deux fonctions de densité de distribution $f_{CH}(\sigma_{ij})$ et $f_{DH}(\sigma_{ij})$ peut être évalué par l’intégrale du carré de leur différence :

$$\delta_{CL}^2(\sigma_{ij}) = \int_{-\infty}^{\infty} (f_{CH}(\sigma_{ij}) - f_{DH}(\sigma_{ij}))^2 d\sigma_{ij}. \quad (\text{IV.22})$$

Finalement, l’indicateur suivant permet de prendre en compte toutes les composantes du tenseur des contraintes :

$$\Delta_{CL}(\underline{\sigma}) = \sqrt{\delta_{CL}^2(\sigma_{11}) + \delta_{CL}^2(\sigma_{22}) + \delta_{CL}^2(\sigma_{33}) + \delta_{CL}^2(\sigma_{12}) + \delta_{CL}^2(\sigma_{13}) + \delta_{CL}^2(\sigma_{23})}. \quad (\text{IV.23})$$

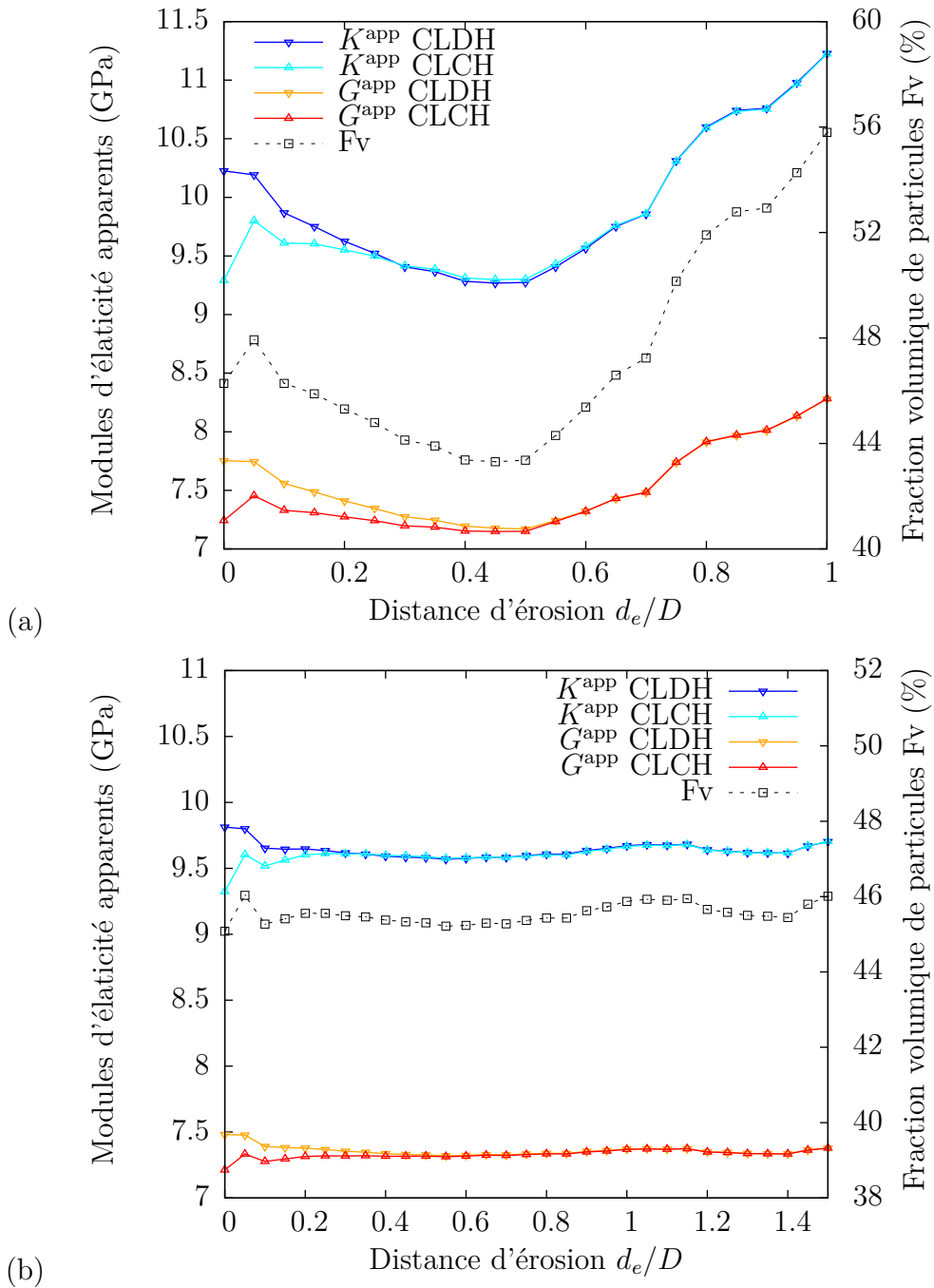


FIG. IV.9 – Évolution des modules d'élasticité apparent et de la fraction volumique de particules, échantillons de taille 3D (a) et 6D (b) en fonction de la distance d'érosion.

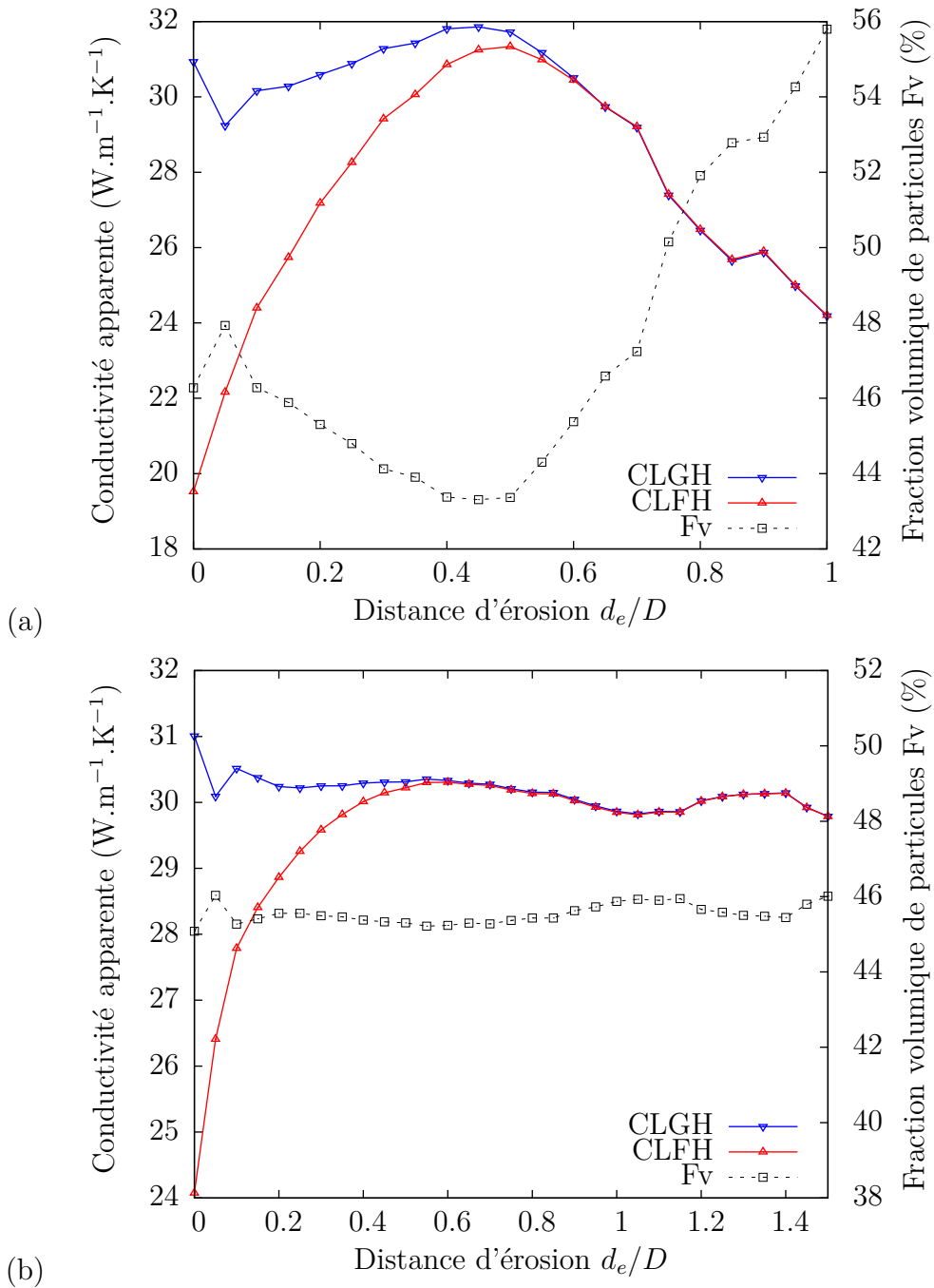


FIG. IV.10 – Évolution de la conductivité thermique apparente et de la fraction volumique de particules, échantillons de taille 3D (a) et 6D (b) en fonction de la distance d'érosion.

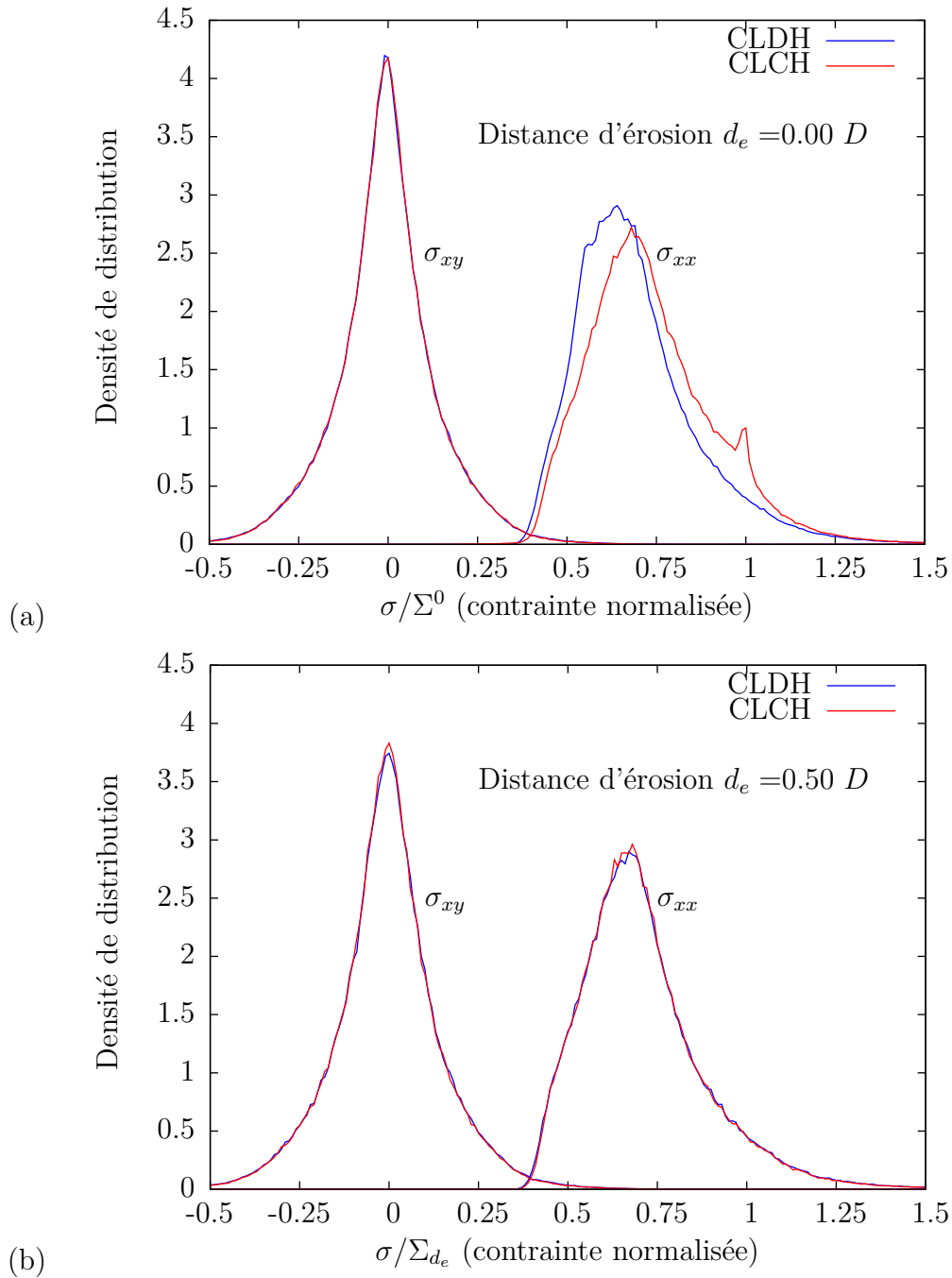


FIG. IV.11 – Distribution des contraintes σ_{xx} et σ_{xy} dans la matrice, normalisées par rapport à la contrainte moyenne, calculées sur le maillage complet (a) et à partir de la solution érodée d'une distance $d_e = 0.5D$ (b). Chargement sphérique imposé en CLDH et CLCH.

La figure IV.12 présente l'évolution de cet écart entre les distributions de contraintes dans la matrice, normalisées par rapport à la contrainte moyenne $\underline{\Sigma}_{d_e}$, en fonction de la distance d'érosion pour des échantillons de taille $3D$ à $8D$. La distance d'érosion $d_e = 0.5D$ est suffisante pour supprimer les effets de bords, quelle que soit la taille de l'échantillon numérique. Par la suite, nous utiliserons toujours $d_e = 0.5D$.

Validation de la méthode d'érosion

La restriction des champs solutions à un sous-domaine du domaine de résolution nécessite de vérifier deux conditions sur la solution érodée :

- les champs de déformation et de contrainte de la solution érodée doivent respecter la condition de macro-homogénéité de HILL, équation (II.7), sur l'équivalence entre le travail macroscopique et la moyenne du travail microscopique ;
- les grandeurs macroscopiques de la solution érodée doivent être analogues au chargement appliquée à l'échantillon. Par exemple, si l'on impose un chargement sphérique en CLCH, il est nécessaire que le tenseur des contraintes macroscopique de la solution érodé soit également sphérique pour pouvoir calculer le module de compressibilité (IV.21).

La condition de macro-homogénéité est vérifiée en calculant la valeur absolue de l'écart relatif entre l'énergie macroscopique et la moyenne de l'énergie microscopique pour une distance d'érosion donnée. Cet écart est noté Δ^{Hill} et s'écrit :

$$\Delta^{\text{Hill}}(d_e) = \left| \frac{\langle \underline{\underline{\varepsilon}} : \underline{\underline{\sigma}} \rangle_{V_{d_e}} - \underline{\underline{E}}_{d_e} : \underline{\underline{\Sigma}}_{d_e}}{\underline{\underline{E}}_{d_e} : \underline{\underline{\Sigma}}_{d_e}} \right|. \quad (\text{IV.24})$$

La figure IV.13 présente l'évolution de Δ^{Hill} en fonction de la distance d'érosion utilisée pour trois échantillons de taille $5D$ soumis à des chargements macroscopiques sphérique et déviatorique. Les chargements sont appliqués avec les CLCH, les résultats obtenus avec les CLDH étant identiques. Les écarts à la condition de macro-homogénéité restent inférieurs à 1.4 % pour des distances d'érosion allant jusqu'à $1.5D$ montrant ainsi que la condition de HILL est approximativement respectée.

Afin de vérifier que les tenseurs macroscopiques $\underline{\underline{E}}_{d_e}$ et $\underline{\underline{\Sigma}}_{d_e}$ sont semblables au chargement appliqué, nous proposons de calculer *l'écart de ces tenseurs à un tenseur sphérique* dans le cas d'un chargement sphérique et *l'écart à un tenseur déviatorique* dans le cas d'un chargement déviatorique² :

- l'écart relatif de la composante x_{ij} d'un tenseur $\underline{\underline{x}}$ à un tenseur sphérique est défini ainsi :

$$\delta^{\text{S}}(x_{ij}) = \left| \frac{3 \langle x_{ij} \rangle_{V_{d_e}}}{\langle x_{11} \rangle_{V_{d_e}} + \langle x_{22} \rangle_{V_{d_e}} + \langle x_{33} \rangle_{V_{d_e}}} \right| - \delta_{ij}, \quad (\text{IV.25})$$

où $\delta_{ij} = 1$ si $i = j$ et $\delta_{ij} = 0$ sinon.

- l'écart relatif de la composante x_{ij} d'un tenseur $\underline{\underline{x}}$ à un tenseur déviatorique est défini ainsi :

$$\delta^{\text{D}}(x_{ij}) = \left| \frac{3 \langle x_{ij} \rangle_{V_{d_e}}}{\langle x_{12} \rangle_{V_{d_e}} + \langle x_{13} \rangle_{V_{d_e}} + \langle x_{23} \rangle_{V_{d_e}}} \right| - (1 - \delta_{ij}). \quad (\text{IV.26})$$

²Nous considérons des tenseurs déviatoriques où toutes les composantes de cisaillement sont égales entre elles.

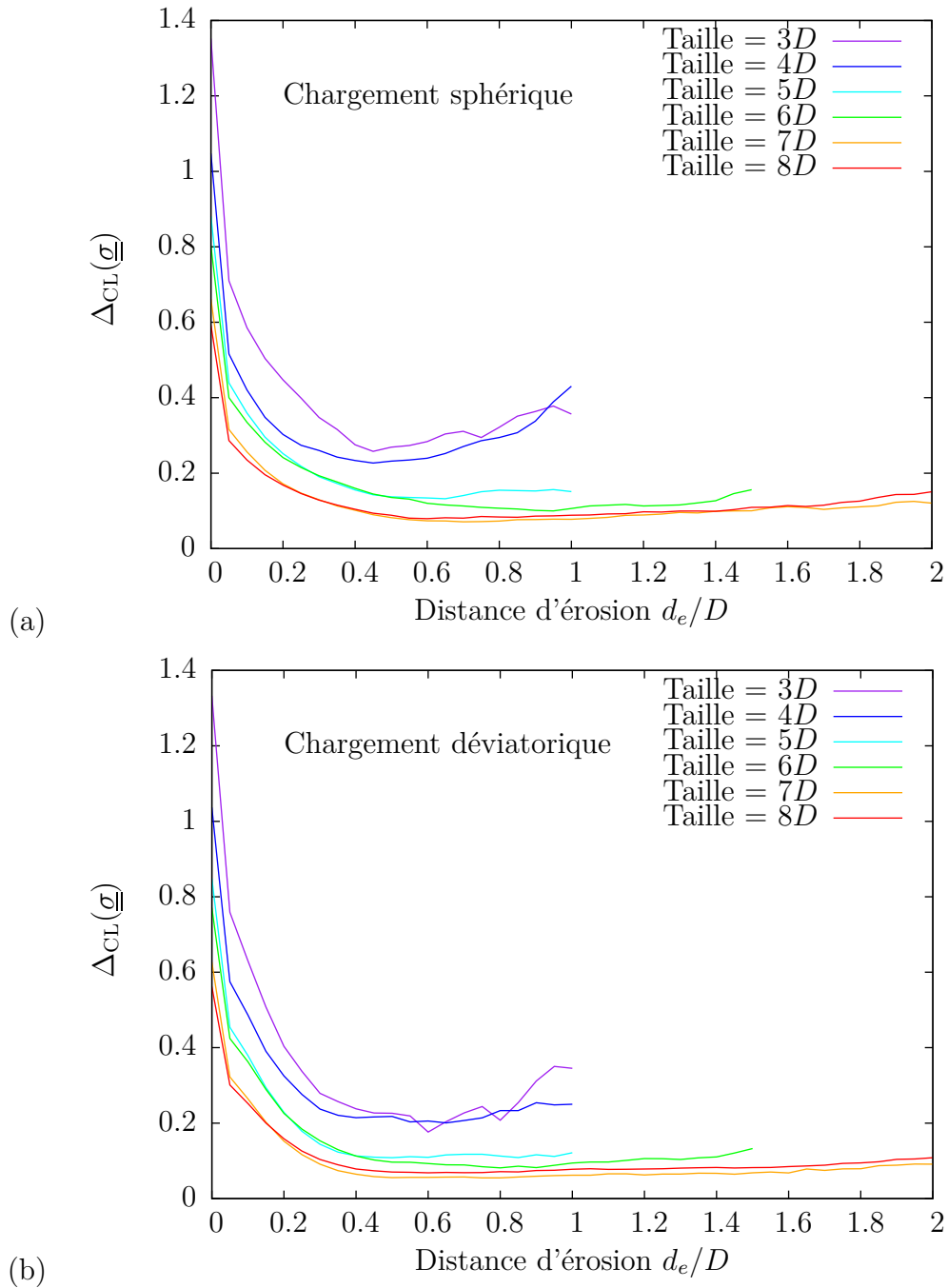
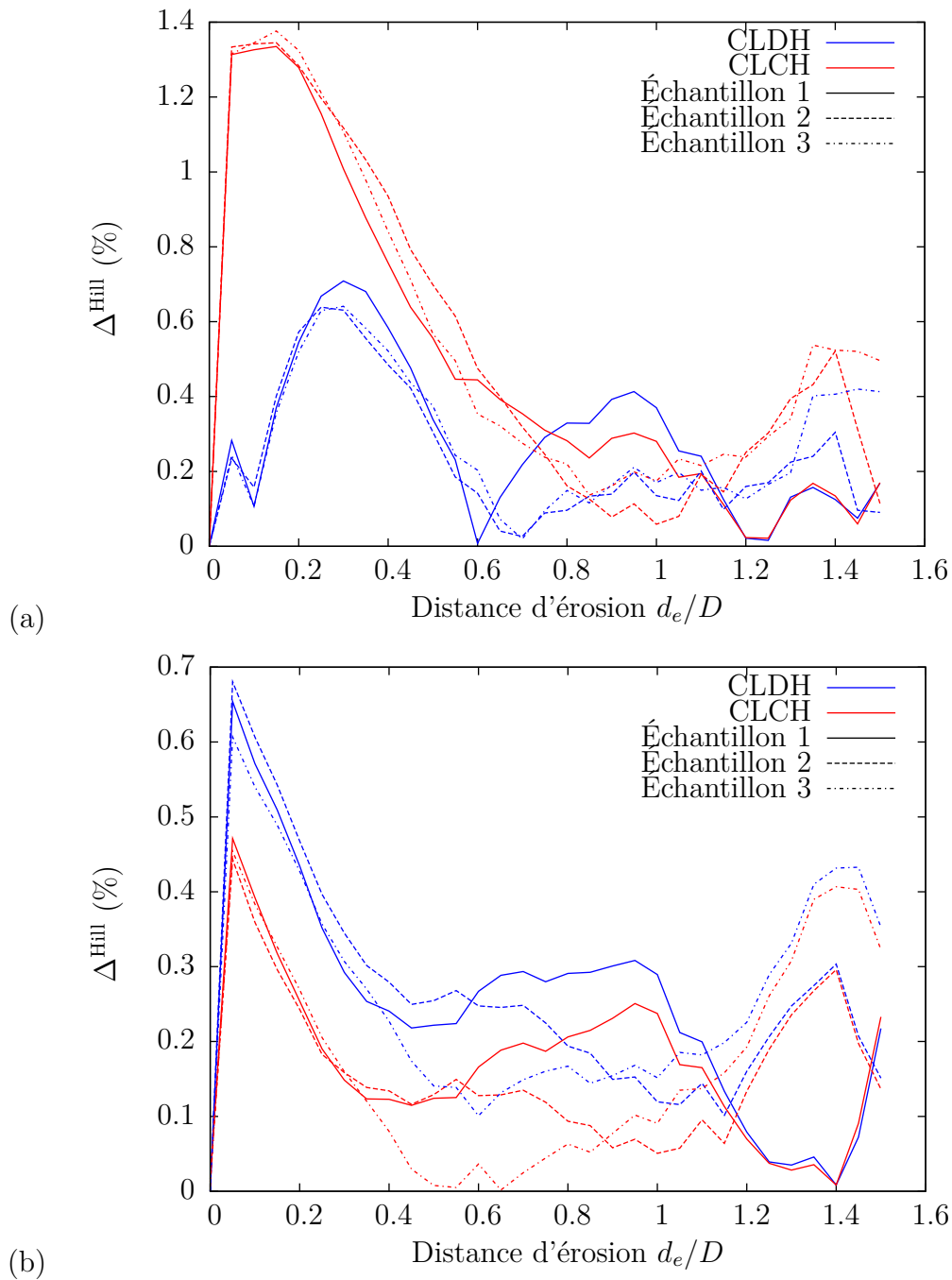


FIG. IV.12 – Évolution de l'écart entre les distributions de contrainte, dans la matrice, calculées avec les CLCH et les CLDH en fonction de la distance d'érosion pour un chargement sphérique (a) et déviatorique (b).



On définit alors l'écart d'un tenseur \underline{x} à un tenseur sphérique, respectivement déviatorique, comme la moyenne des écarts $\delta^S(x_{ij})$, ou $\delta^D(x_{ij})$, sur toutes les composantes :

$$\Delta^S(\underline{x}) = \frac{1}{6} \left[|\delta^S(x_{11})| + |\delta^S(x_{22})| + |\delta^S(x_{33})| + |\delta^S(x_{12})| + |\delta^S(x_{13})| + |\delta^S(x_{23})| \right] \quad (\text{IV.27})$$

$$\Delta^D(\underline{x}) = \frac{1}{6} \left[|\delta^D(x_{11})| + |\delta^D(x_{22})| + |\delta^D(x_{33})| + |\delta^D(x_{12})| + |\delta^D(x_{13})| + |\delta^D(x_{23})| \right]. \quad (\text{IV.28})$$

La figure IV.14 présente les valeurs moyennes de cet écart, pour toutes les réalisations, en fonction de la taille des échantillons numériques. L'écart au chargement macroscopique diminue en fonction de la taille des échantillons et reste relativement faible. Enfin, nous pouvons remarquer qu'en appliquant un chargement sphérique, les CLCH donnent un écart Δ^S plus faible que les CLDH. Inversement, en appliquant un chargement déviatorique, les CLDH donnent un écart Δ^D plus faible que les CLCH.

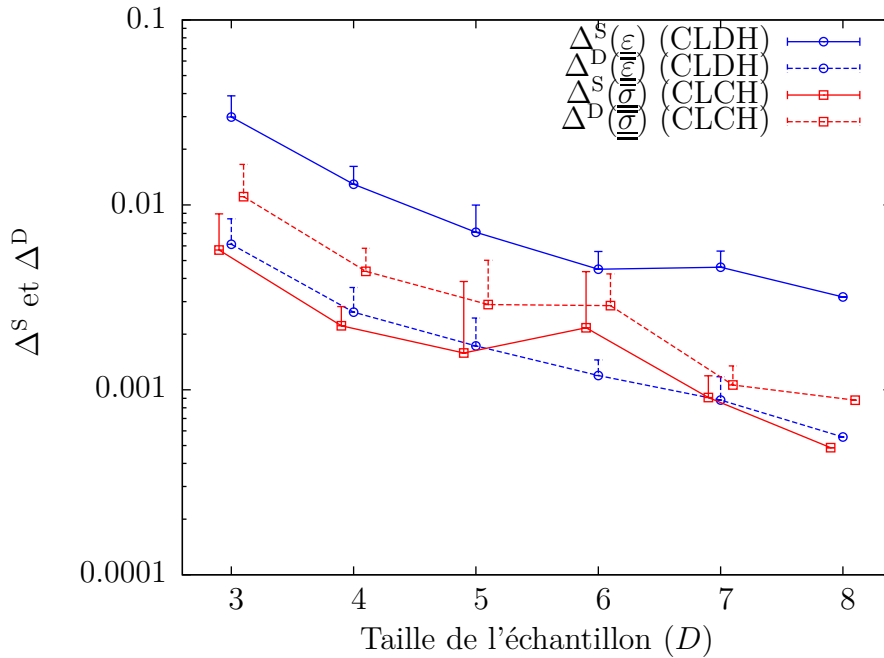


FIG. IV.14 – Évolution des écarts relatifs moyens au chargement appliqué Δ^S et Δ^D pour les champs de déformation et de contrainte en fonction de la taille des échantillons. Les résultats pour les CLCH sont décalés en abscisse par souci de lisibilité.

Assemblage des solutions érodées

La méthode d'érosion permettant de s'affranchir des effets des CL, on peut donc assembler plusieurs solutions érodées afin de caractériser le matériau sur un volume plus important que celui accessible avec un seul échantillon numérique. Le champ solution assemblé est formé par l'union des champs solutions obtenus pour chaque échantillon. Typiquement, le volume associé à la solution érodée obtenue à partir d'un échantillon de taille $8D$ est de l'ordre de $343D^3$ pour un problème représentant plus de 8.1 millions de ddl à résoudre ; celui associé à l'analyse de l'ensemble des 24 échantillons de taille $5D$ est de l'ordre de $1500D^3$ où chaque échantillon représente en moyenne 2.2 millions de ddl. Afin d'apprécier cette démarche, nous avons assemblé

les solutions érodées sur les échantillons de même taille et comparé les écarts entre les distributions des contraintes dans la matrice, obtenues en appliquant les deux CL homogènes. La figure IV.15 présente le champ de contrainte σ_{xx} , normalisé par rapport à la contrainte moyenne Σ_{de} obtenu en assemblant les solutions érodées de quatre échantillons de taille $5D$ soumis au même chargement sphérique en CLCH.

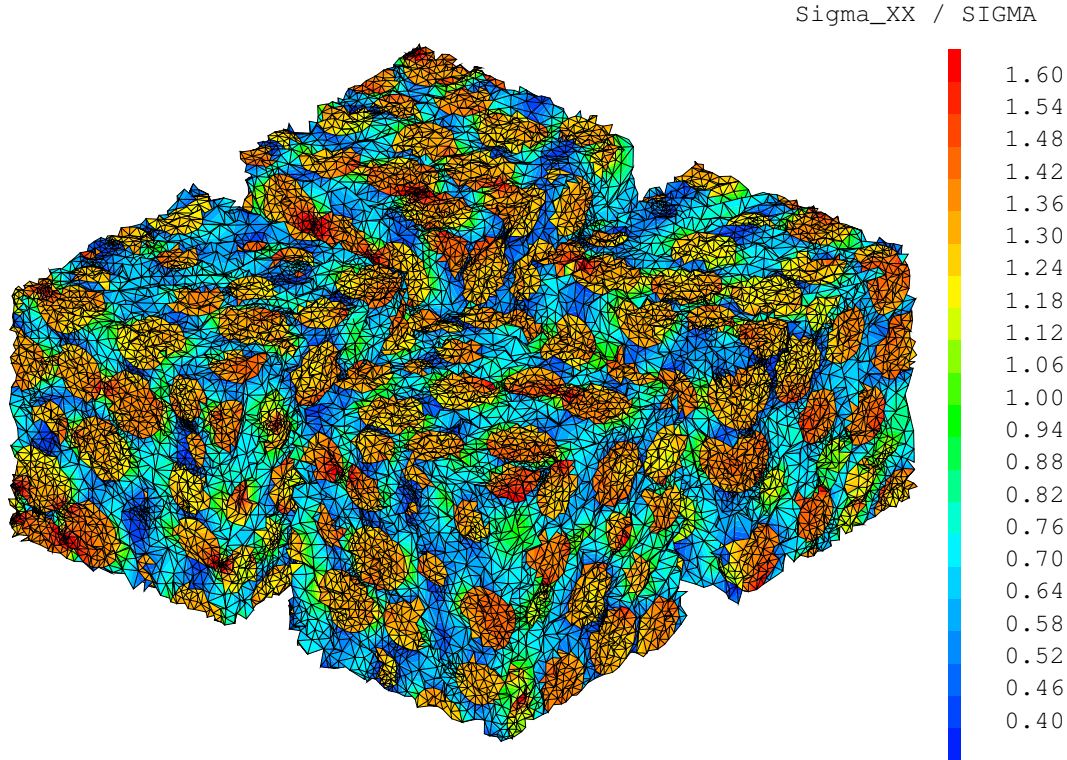


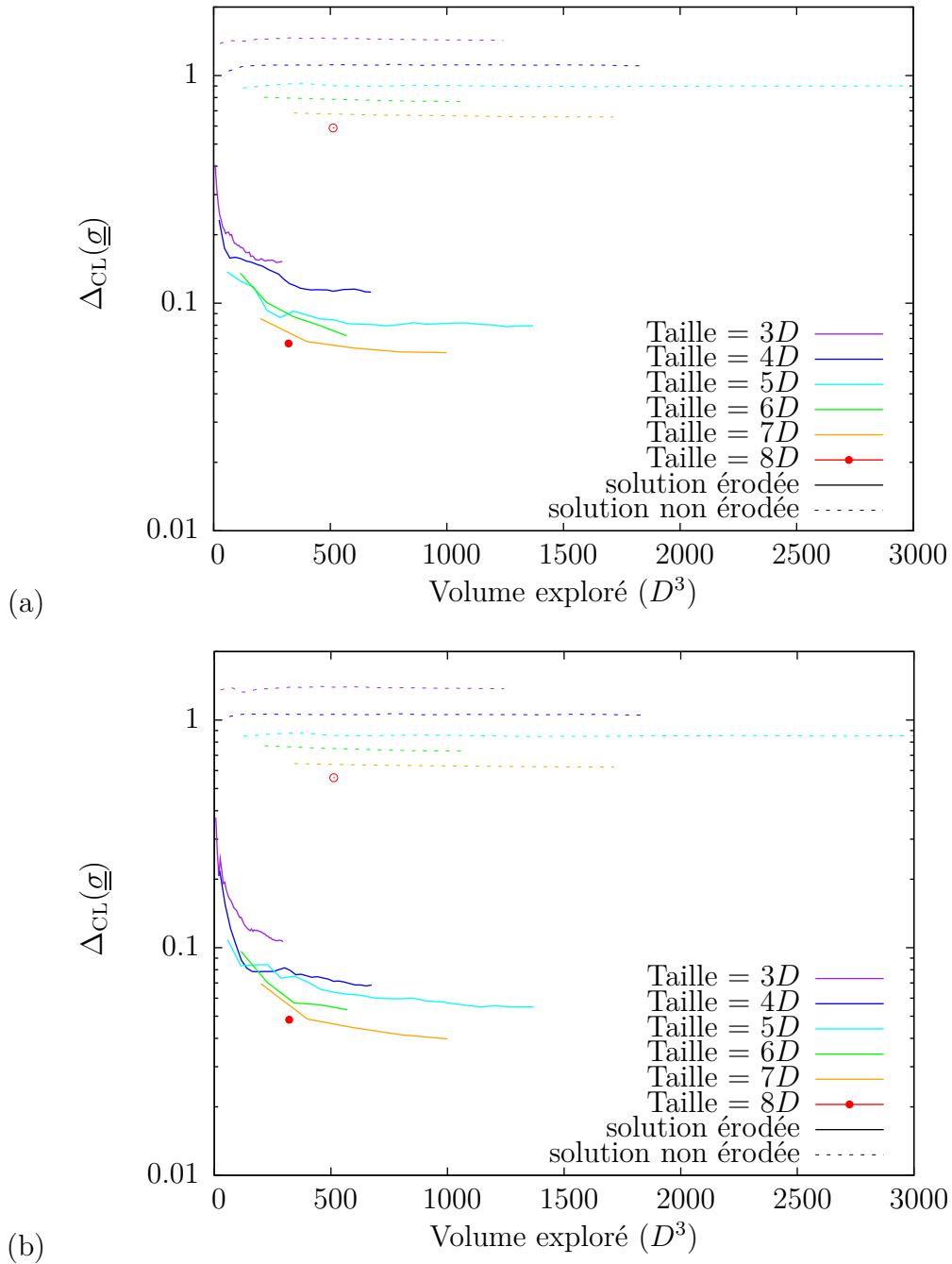
FIG. IV.15 – Champs de contrainte normalisé σ_{xx}/Σ_{de} obtenu par l’assemblage de quatre solutions érodées d’échantillons numériques de taille $5D$ soumis à un chargement hydrostatique en CLCH.

La figure IV.16 présente l’évolution de l’écart entre les distributions $\Delta_{CL}(\underline{\sigma})$ en fonction du volume de matière exploré. Les résultats sur les solutions non érodées sont également reportés. Deux tendances peuvent être remarquées :

- d’une part, pour les solutions non érodées, l’écart entre les CL diminue faiblement en fonction du volume de matière exploré et dépend fortement de la taille des échantillons utilisés ;
- d’autre part, pour les solutions érodées, cet écart diminue en fonction du volume exploré en étant à peu près du même ordre pour toutes les tailles des échantillons, c’est-à-dire qu’on caractérise la distribution des contraintes dans la matrice avec la même précision en assemblant de nombreux « petits » volumes ou quelques « grands » volumes.

IV.2.5 Validation des particules homogènes équivalentes

Les particules combustibles sont modélisées à l’aide de particules homogènes équivalentes (PHE) afin de faciliter la réalisation du maillage (cf. paragraphe III.2.4). Les propriétés homogénéisées des PHE, présentées dans le tableau III.2, sont données dans le cas où l’on suppose le noyau d’ UO_2 adhérent au buffer ou décollé. Le cas du noyau décollé ne porte que sur le



comportement mécanique de la particule. Afin de valider l'utilisation de PHE dans nos simulations, nous comparons les résultats de calculs réalisés en CLDH et CLGH sur des échantillons numériques où les couches d'enrobage des particules sont représentées (solution utilisée comme référence) et sur les mêmes échantillons en utilisant des PHE. Le tableau IV.3 présente les valeurs des propriétés élastiques et thermiques apparentes calculées pour trois échantillons numériques de taille $3D$. Le comportement moyen de la microstructure est correctement représenté à l'aide de PHE, que le noyau soit décollé ou adhérent (écart relatif inférieur à 2 %).

TAB. IV.3 – Propriétés mécaniques et thermiques apparentes calculées en CLDH et CLGH pour des PHE et pour la solution de référence (particules multi-couches). Valeurs moyennes et écarts-types pour trois échantillons de taille $3D$.

Propriété	K^{app} (GPa)		G^{app} (GPa)		Λ^{app} (W.m ⁻¹ .K ⁻¹)
	Adhérent	Déchaussé	Adhérent	Déchaussé	
PHE	10.3 (0.09)	4.26 (0.01)	7.86 (0.02)	3.04 (0.04)	31.93 (0.44)
Référence	10.1 (0.12)	4.28 (0.04)	7.77 (0.04)	3.28 (0.08)	31.95 (0.44)
Écart relatif (%)	2.0	0.47	1.2	7.3	0.066

L'estimation de la distribution des contraintes dans la matrice est également analysée. Pour cela, nous comparons les distributions calculées dans un échantillon de taille $7D$, modélisé avec des PHE, à celles obtenues sur le même échantillon où les couches des particules sont représentées (solution de référence). En raison de la difficulté à mailler les particules intersectant les bords, nous représentons ces dernières par des PHE et seules les particules internes sont représentées avec leurs couches d'enrobage (cf. figure IV.17 (a)). Afin de réduire l'influence de ces PHE sur la solution de référence, les résultats sont analysés à partir de la solution érodée d'une distance égale au diamètre des particules (cf. figure IV.17 (b)). L'échantillon est soumis à un chargement sphérique et à un chargement déviatorique. La figure IV.18 présente les distributions des contraintes de traction et de cisaillement normalisées pour cet échantillon pour les deux types de modélisation en supposant le noyau adhérent. Nous avons également tracé la distribution des contraintes dans les particules à titre indicatif. Le cas du noyau décollé est présenté sur la figure IV.19.

L'analyse des courbes des figures IV.18 et IV.19 montre que :

- Si le noyau d' UO_2 est adhérent, les contraintes dans la matrice sont correctement estimées en utilisant des PHE pour le chargement sphérique. Pour le chargement déviatorique, les distributions sont légèrement plus resserrées que pour la solution de référence.
- Si le noyau d' UO_2 est décollé, les contraintes dans la matrice sont correctement estimées pour le chargement sphérique. En revanche, dans le cas du chargement déviatorique, les distributions obtenues par les PHE sont significativement différentes de la solution de référence, en particulier sur les composantes de cisaillement.

Pour les particules (dans le cas du noyau adhérent), on note que les distributions de la solution de référence font apparaître trois modes, correspondant à la superposition des distributions dans chacune des couches de la particule.

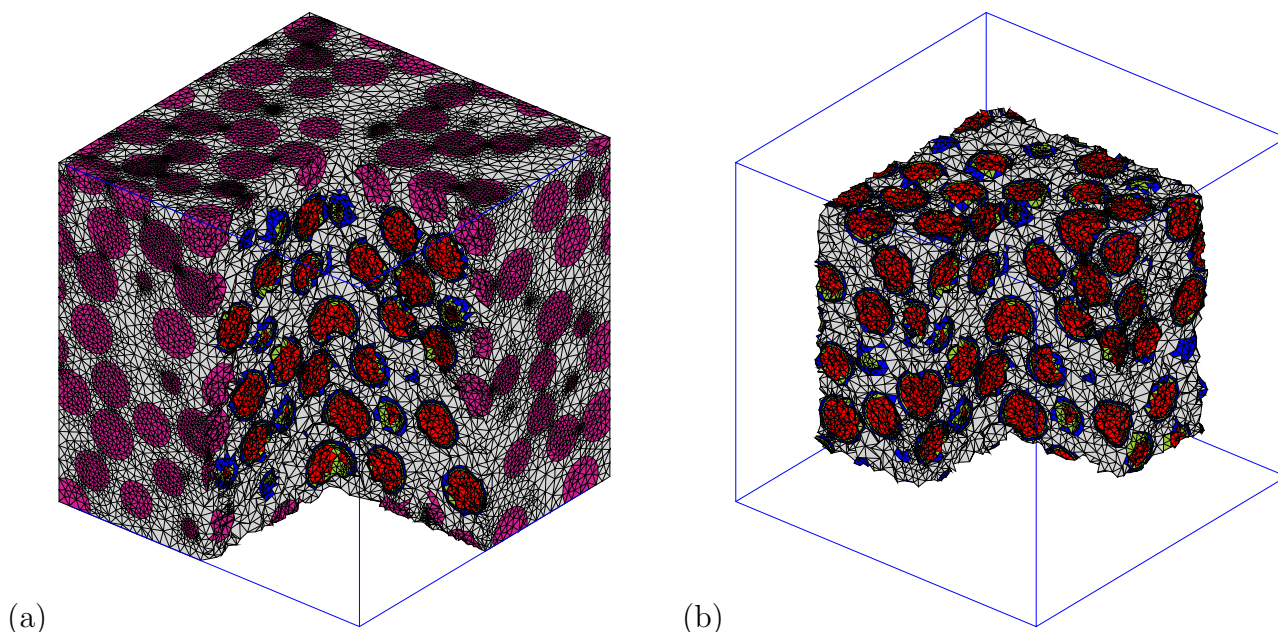


FIG. IV.17 – Coupe d’un maillage d’un échantillon de taille $7D$ où les particules internes sont représentées avec leurs couches d’enrobage et les particules intersectant les faces du cube par des PHE (a). Le même maillage, érodé d’un diamètre de particule (b).

Dans le cas où le noyau d’ UO_2 est adhérent au buffer, la modélisation des particules combustibles par des PHE est donc valide. Cette hypothèse de noyau adhérent sera conservée par la suite et nous utiliserons des PHE. Si l’on souhaite prendre en compte la décohésion du noyau d’ UO_2 , il apparaît nécessaire de représenter les couches d’enrobage des particules combustibles dans le maillage.

IV.3 Caractérisation du combustible à particules

La caractérisation du comportement thermo-élastique du combustible a été faite sur tous les échantillons numériques réalisés (cf. tableau III.3) en appliquant des CL homogènes. Les particules combustibles sont modélisées par des PHE et le noyau d’ UO_2 est supposé adhérent au buffer. Les champs mécaniques et thermiques obtenus ont été analysés après érosion d’une distance $d_e = 0.5D$. Dans ce paragraphe nous présentons les résultats sur les propriétés apparentes des échantillons et analysons les champs de contrainte locaux au sein de la matrice pour des chargements élémentaires.

IV.3.1 Propriétés thermo-élastiques apparentes

La figure IV.20 (a) présente les valeurs (moyenne et écart-type sur toutes les réalisations de taille identique) du module de compressibilité apparent en fonction de la taille des échantillons numériques et selon le type de CL appliquées. Les valeurs obtenues par la méthode d’érosion³ sont également présentées. Dans ce cas, nous détaillons les valeurs obtenues pour chaque échantillon. L’évolution de la fraction volumique moyenne de particules, dans les sous-maillages érodés, est tracée selon le second axe des ordonnées du graphique. Enfin, l’estimation du module

³Les valeurs présentées sont calculées à partir de la solution en CLDH.

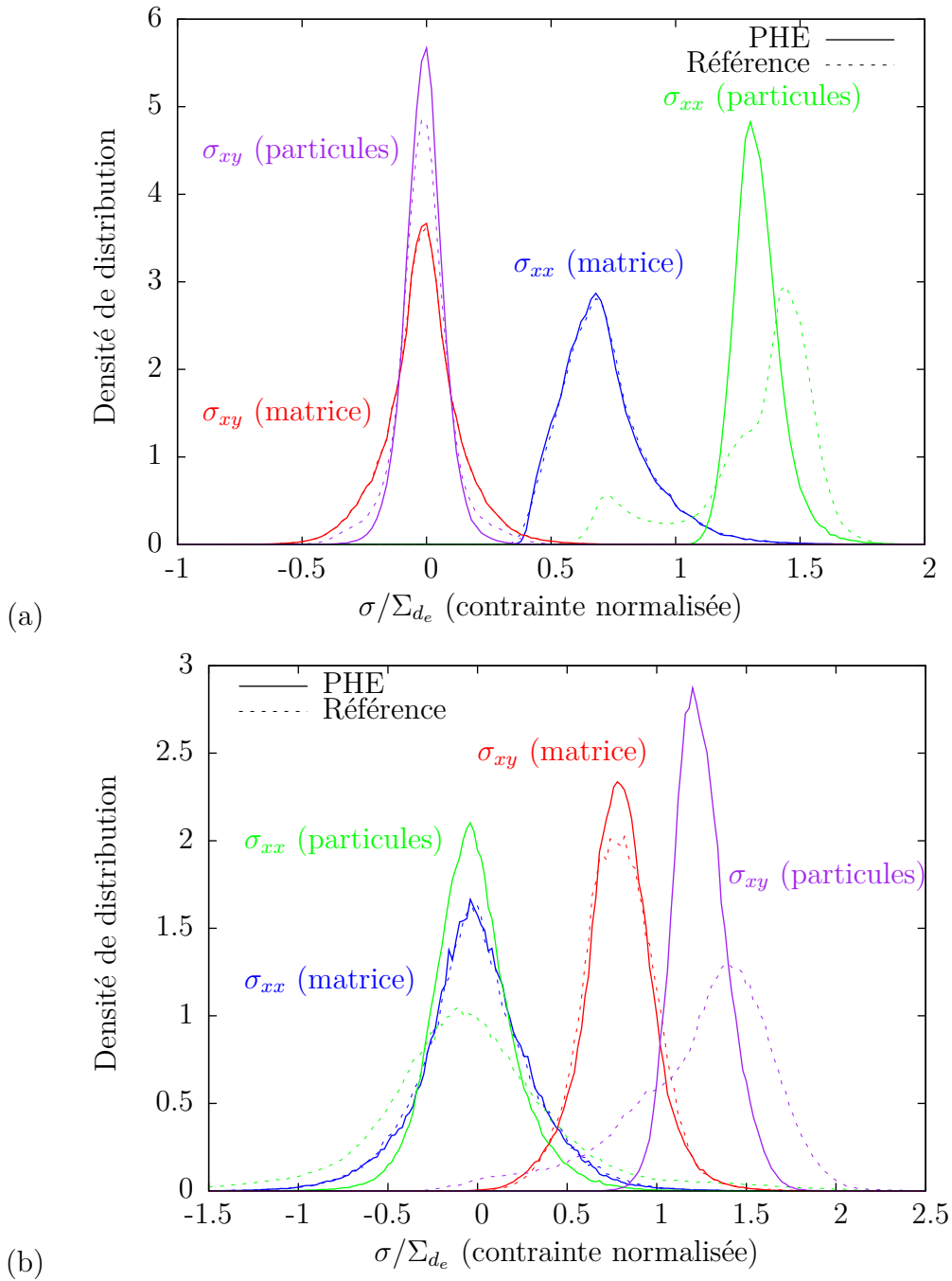


FIG. IV.18 – Distributions des contraintes σ_{xx} et σ_{xy} dans la matrice et les particules, normalisées par rapport à la contrainte moyenne Σ_{de} , selon le type de représentation des particules. Le noyau d'UO₂ est supposé adhérent au buffer. Chargement macroscopique sphérique (a) et déviatorique (b).

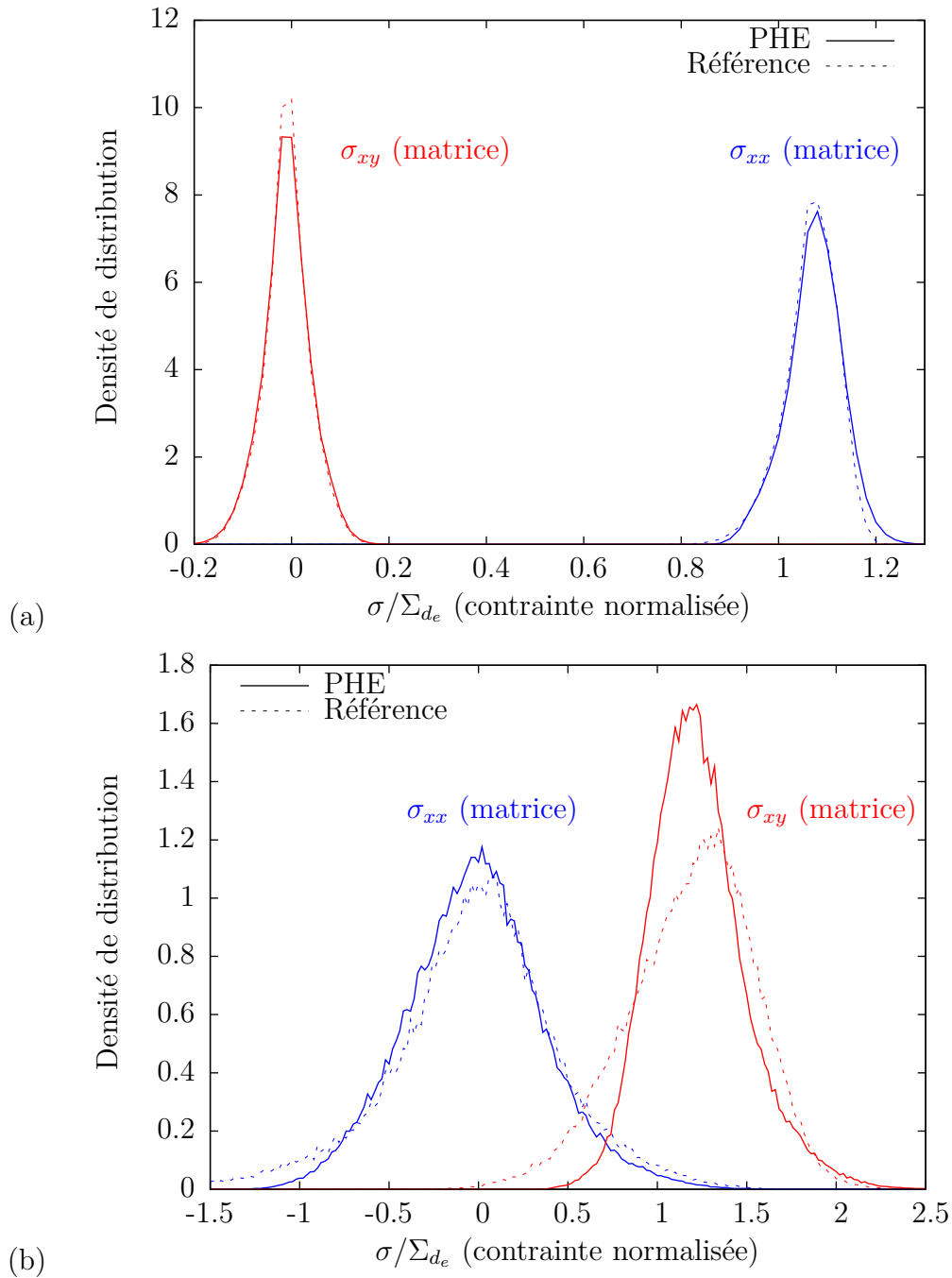


FIG. IV.19 – Distributions des contraintes σ_{xx} et σ_{xy} dans la matrice, normalisées par rapport à la contrainte moyenne Σ_{de} , selon le type de représentation des particules. Le noyau d'UO₂ est supposé décollé du buffer. Chargement macroscopique sphérique (a) et déviatorique (b).

de compressibilité effectif par le modèle auto-cohérent 3-phases, pour les valeurs moyennes de fraction volumique de particules dans les maillages érodés, est donnée à titre indicatif.

L'encadrement du comportement apparent, donné par les CL homogènes, se resserre lorsque la taille des échantillons augmente. Cet encadrement est relativement précis (l'écart relatif est inférieur à 10 % sur les échantillons de taille $3D$) du fait du faible contraste entre les modules de compressibilité des constituants. Les propriétés apparentes moyennes, obtenues par la méthode d'érosion, sont quasiment identiques quelle que soit la taille des échantillons et les faibles variations sont à relier aux variations de fraction volumique des particules.

La figure IV.20 (b) présente les valeurs des modules de compressibilité apparents des échantillons en fonction de la fraction volumique de particules. On observe que les propriétés apparentes sont corrélées à la fraction volumique de particules. Cependant, les résultats obtenus par les CL homogènes évoluent avec la taille des échantillons. Ce n'est pas le cas avec les résultats obtenus par la méthode d'érosion puisque les échantillons de taille $3D$ fournissent un module apparent identique à celui de l'échantillon de taille $8D$.

Les figures IV.21 et IV.22 présentent les résultats analogues aux précédents pour le module de cisaillement apparent et la conductivité thermique apparente. Les commentaires sont similaires à ceux sur le module de compressibilité, à ceci près que l'encadrement par les CL homogènes sur la conductivité est plus large que pour les modules d'élasticité : l'écart relatif est proche de 40 % pour les échantillons de taille $3D$ et de 20 % pour l'échantillon de taille $8D$. Ceci est dû au contraste plus prononcé sur les conductivités des constituants que sur les modules élastiques. L'encadrement offert par les CLGH et les CLFH est donc très sensible à la taille des échantillons, ce qui montre l'intérêt de la méthode d'érosion qui offre une estimation du comportement effectif stable pour toutes les tailles d'échantillon. Notons enfin que les valeurs des modules élastiques apparents obtenus à partir des solutions érodées correspondent à peu près à la moyenne de celles données par les CLDH et les CLCH, alors que pour la conductivité thermique, les valeurs obtenues à partir des solutions érodées sont très proches des celles obtenues par les CLGH.

La figure IV.23 présente les valeurs des coefficients de dilatation apparents déterminés à partir des calculs élastiques sous chargement sphérique (cf. IV.1.1) sur les solutions érodées. L'estimation par le modèle auto-cohérent 3-phases est également donnée à titre indicatif. Les propriétés thermo-élastiques apparentes sont en bon accord avec les estimations du modèle auto-cohérent 3-phases. Nous pouvons remarquer que les modules élastiques et le coefficient de dilatation thermique apparents sont systématiquement inférieurs à l'estimation auto-cohérente. L'inverse est constaté pour la conductivité thermique.

IV.3.2 Distribution des contraintes dans la matrice

Les fonctions de distribution des contraintes dans la matrice sont analysées pour des chargements macroscopiques élémentaires : traction uniaxiale, chargement sphérique et cisaillement pur. Les données sont obtenues sur les sous-maillages érodés de l'échantillon numérique de taille $8D$ soumis à des CLCH. Les figures IV.24, IV.25 et IV.26 présentent les courbes de distribution des contraintes dans la matrice pour ces trois chargements macroscopiques élémentaires, ainsi que les cartes de contrainte dans le maillage érodé. Sur ces figures, nous constatons que, malgré

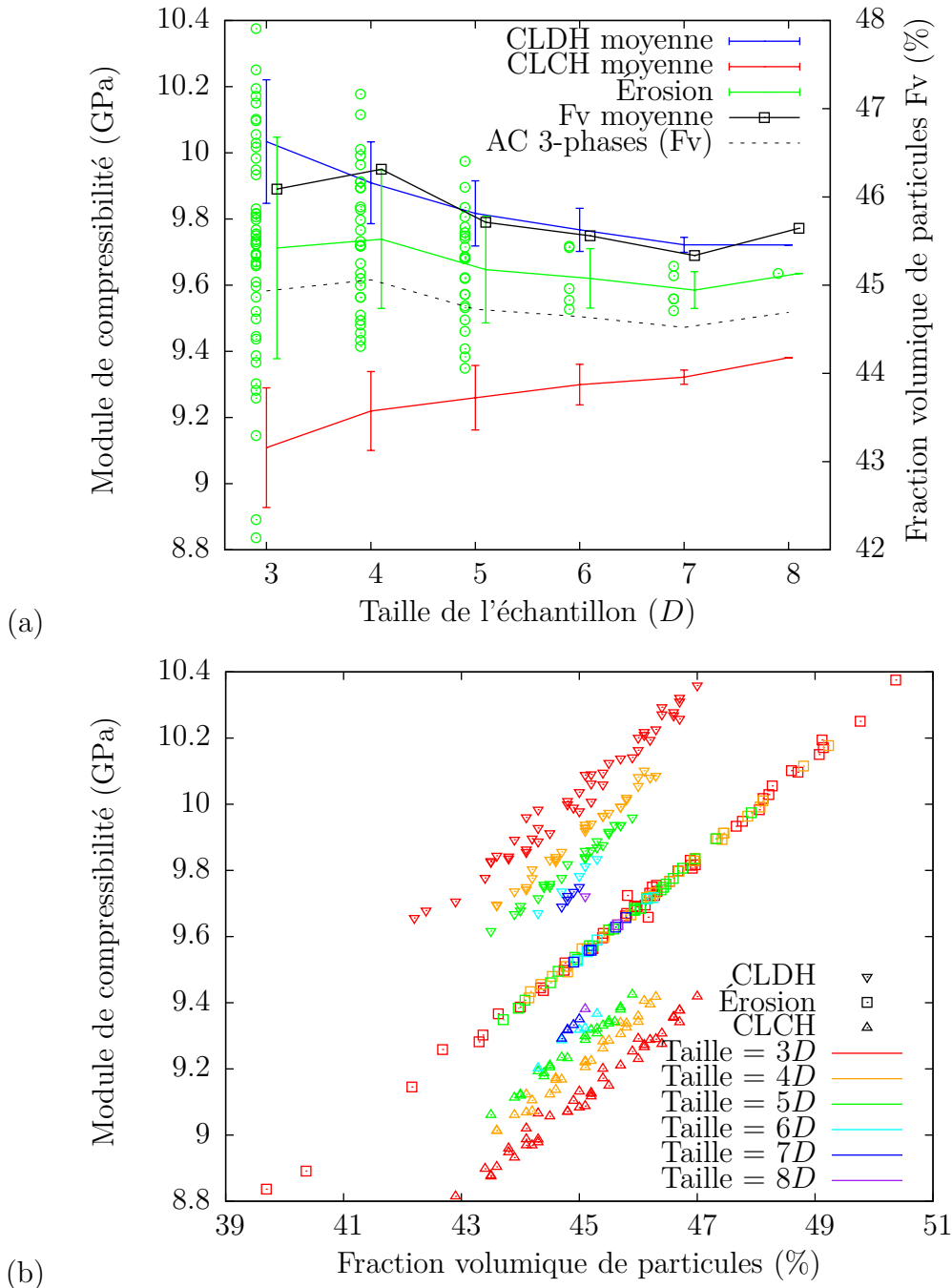


FIG. IV.20 – Évolution du module de compressibilité apparent en fonction de la taille des échantillons numériques (a) et en fonction de la fraction volumique de particules (b). Les résultats pour la méthode d'érosion de la figure (a) sont décalés en abscisse par souci de lisibilité.

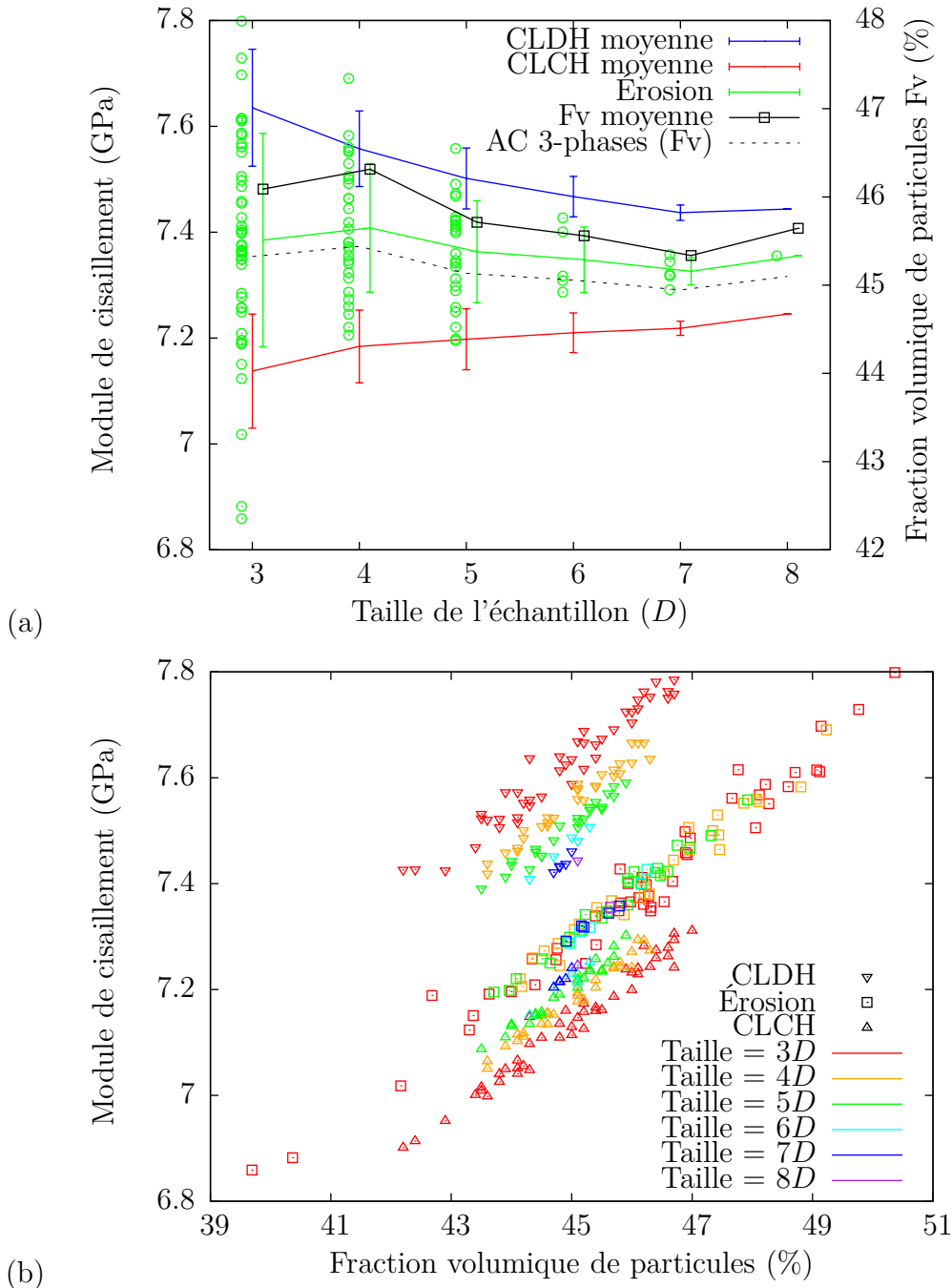


FIG. IV.21 – Évolution du module de cisaillement apparent en fonction de la taille des échantillons numériques (a) et en fonction de la fraction volumique de particules (b). Les résultats pour la méthode d'érosion de la figure (a) sont décalés en abscisse par souci de lisibilité.

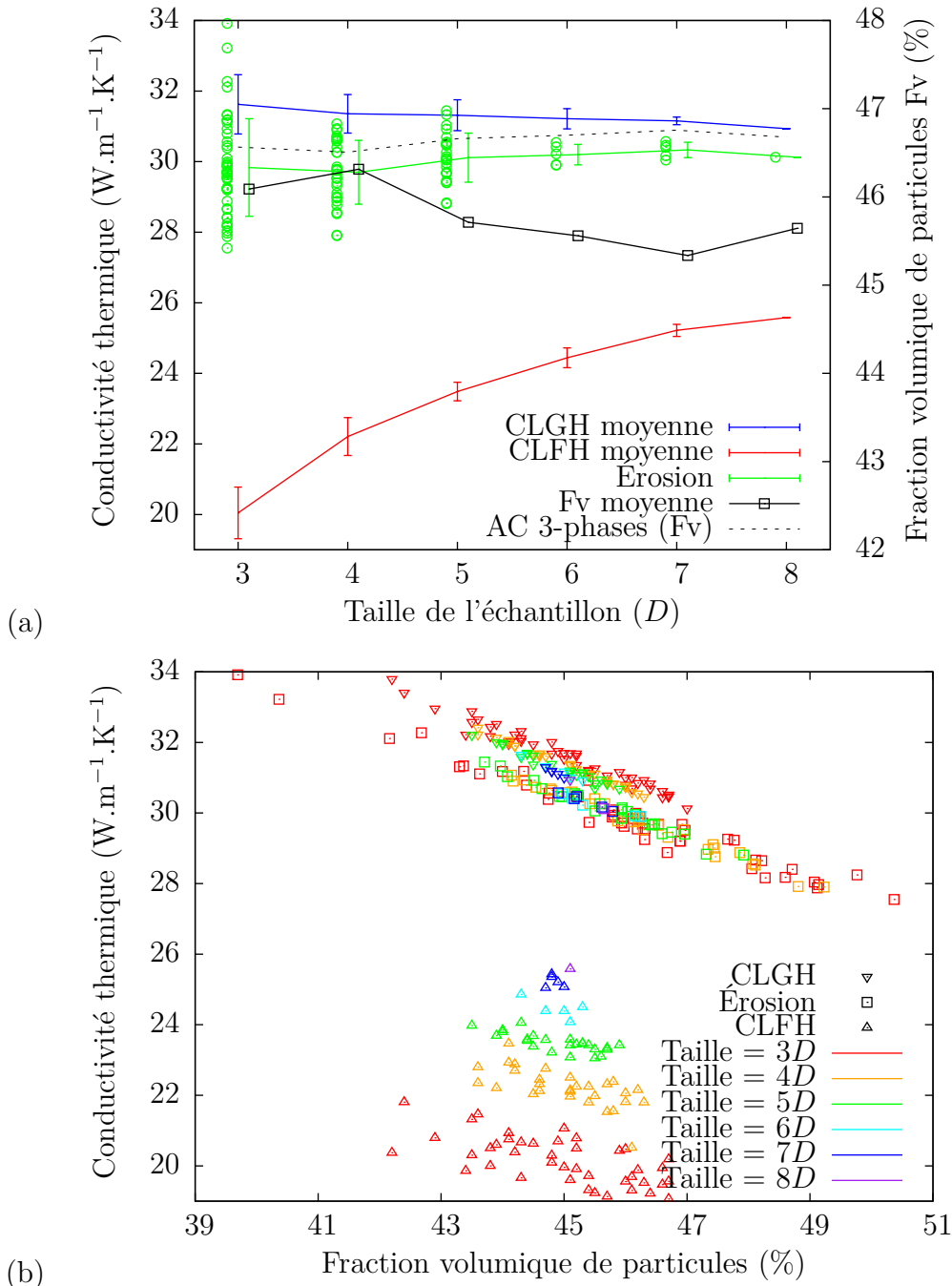


FIG. IV.22 – Évolution de la conductivité thermique apparente en fonction de la taille des échantillons numériques (a) et en fonction de la fraction volumique de particules (b). Les résultats pour la méthode d'érosion de la figure (a) sont décalés en abscisse par souci de lisibilité.

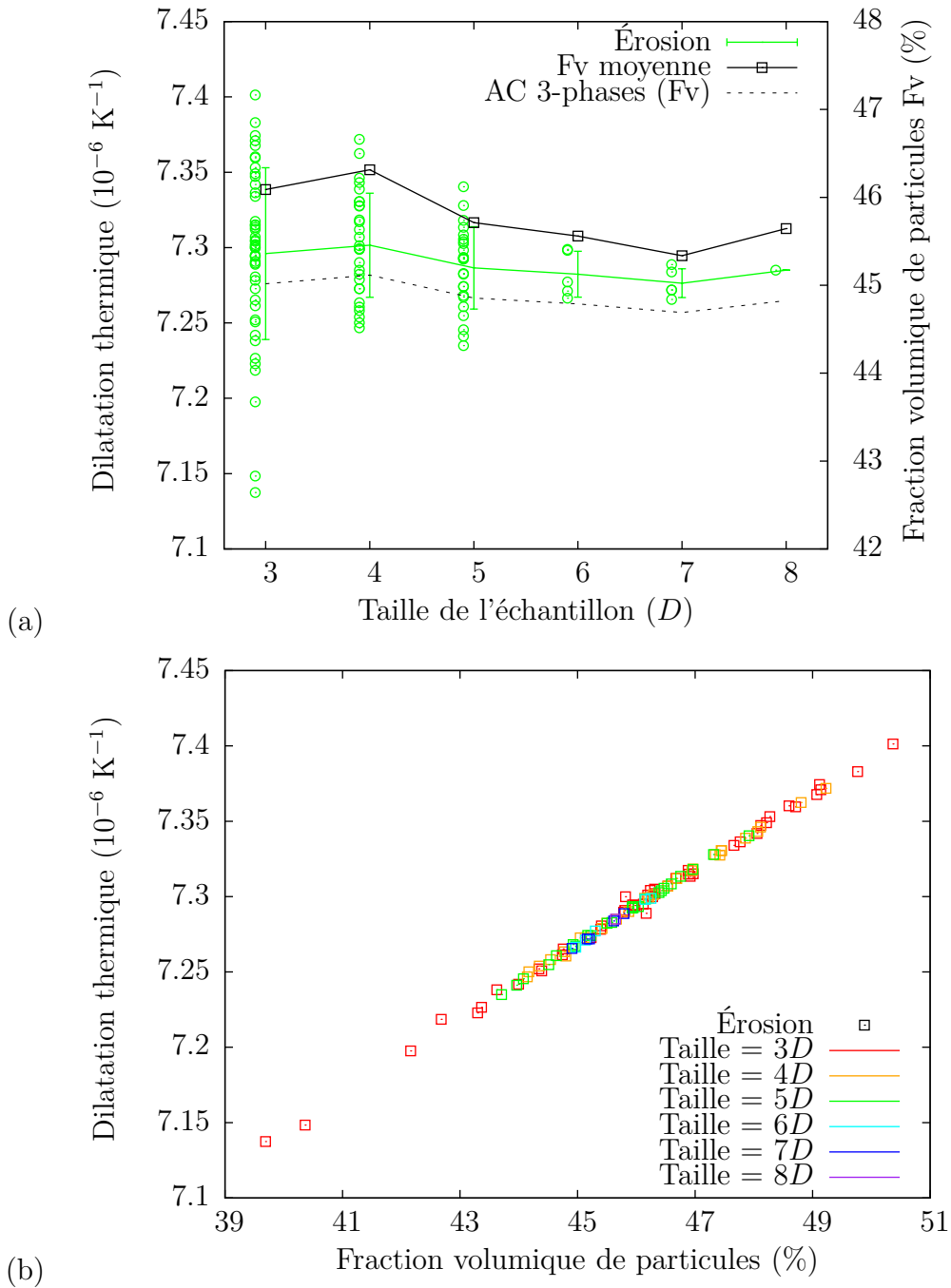


FIG. IV.23 – Évolution du coefficient de dilatation thermique apparent en fonction de la taille des échantillons numériques (a) et en fonction de la fraction volumique de particules (b).

le faible contraste entre les modules d'élasticité des particules et de la matrice, les distributions sont relativement étalées. À titre d'exemple, lorsque l'échantillon est soumis à un chargement macroscopique sphérique, les contraintes de cisaillement dans la matrice sont nulles en moyenne mais peuvent atteindre, localement, plus de 40 % de la contrainte moyenne appliquée. Cette importante dispersion des contraintes s'explique sans doute par la fraction volumique élevée de particules : les cartes de contrainte montrent que les valeurs les plus élevées sont localisées dans les ligaments de faible épaisseur.

IV.4 Conclusions

La caractérisation du comportement thermo-élastique du combustible à particules a été réalisée en soumettant nos échantillons numériques à des chargements thermiques et mécaniques élémentaires. Une étude de sensibilité au maillage a permis de déterminer un paramètre de taille de maille optimal ($f_m = 0.3$) et nous a conduit à utiliser des éléments finis tétraédriques quadratiques. La modélisation des particules combustibles est simplifiée en utilisant des particules homogènes équivalentes dont la validité a pu être vérifiée.

Nous avons mis en évidence l'influence du type de CL utilisé sur les champs solutions en utilisant les CL homogènes en déformation et en contrainte. Outre les différences sur les propriétés apparentes, les différences entre les champs mécaniques locaux sont principalement situées sur les bords des échantillons. Nous proposons une méthode « d'érosion » permettant de s'affranchir de ces effets de bords. Nous avons pu vérifier que les solutions érodées respectent approximativement la condition de macro-homogénéité de HILL et que les champs macroscopiques érodés restent similaires aux chargements imposés. Ces conditions ont été vérifiées pour le cas étudié : d'autres contrastes et d'autres microstructures peuvent conduire à un résultat différent. Cette méthode permet d'accroître la représentativité des échantillons de petite taille en particulier si l'on assemble les champs solutions de plusieurs réalisations afin d'explorer un volume de matière plus important.

Les propriétés thermo-élastiques apparentes obtenues grâce à cette méthode sont en bon accord avec celles données par le modèle auto-cohérent 3-phases. Ce modèle décrit donc correctement le comportement effectif du combustible. Cependant, il ne permet pas de rendre compte de la variabilité des champs mécaniques locaux au sein de la matrice. C'est l'objet du travail présenté dans le chapitre suivant.

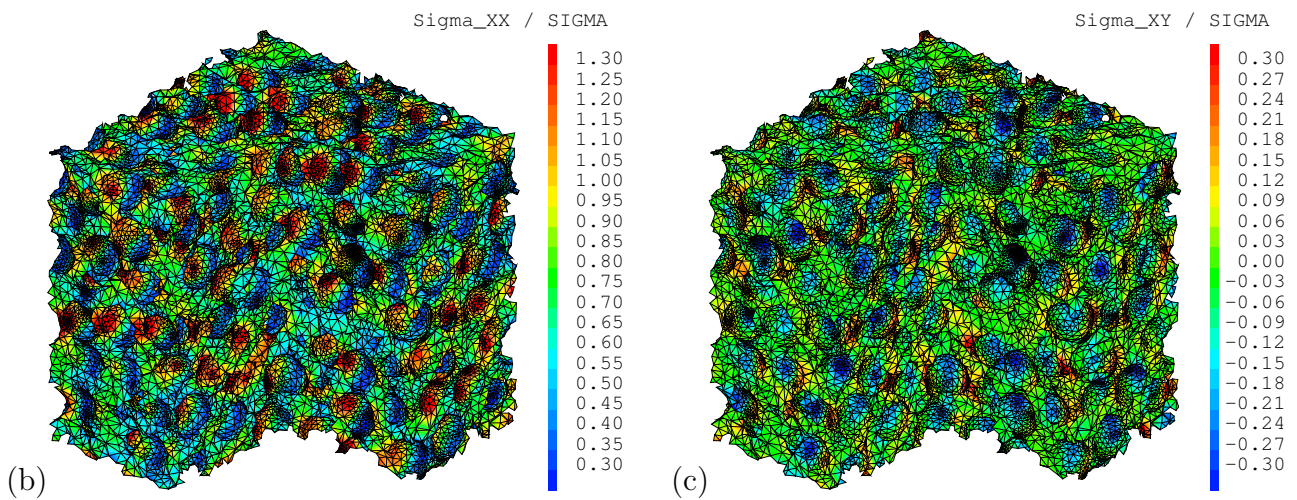
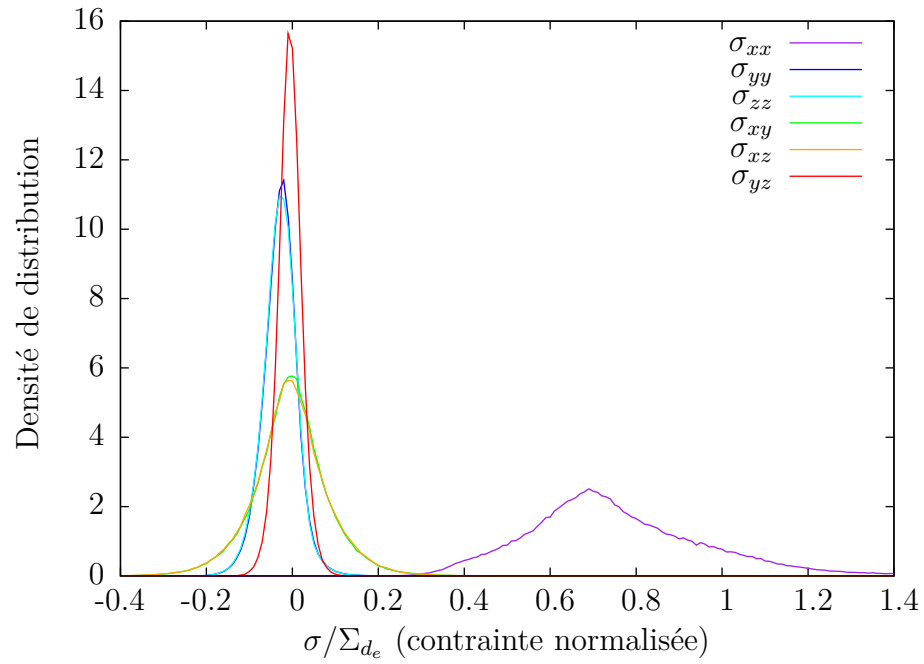
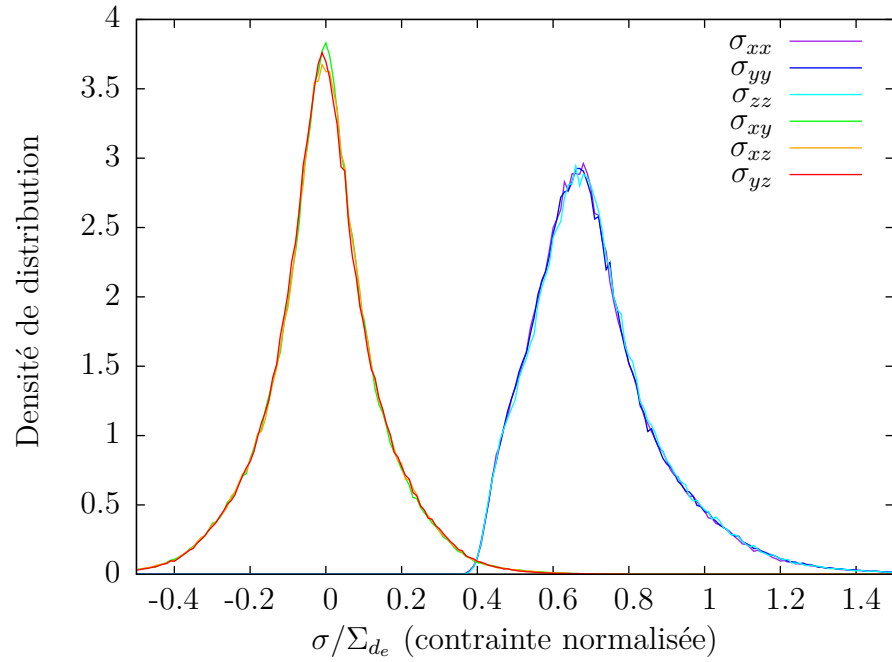
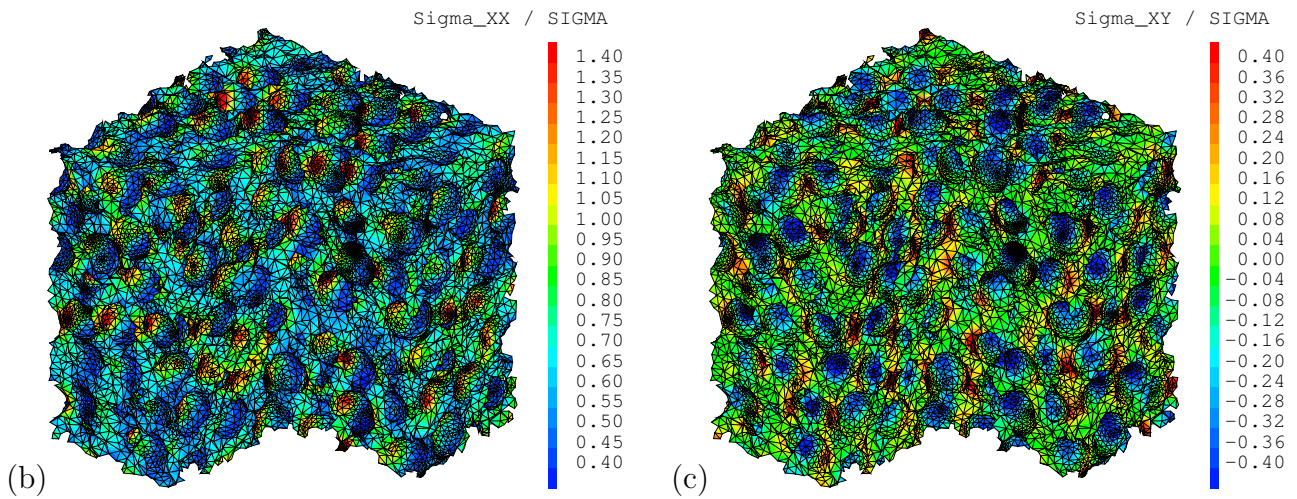


FIG. IV.24 – Distribution des contraintes dans la matrice, normalisées par rapport à la contrainte moyenne Σ_{de} (a) et cartes des contraintes de traction σ_{xx}/Σ_{de} (b) et de cisaillement σ_{xy}/Σ_{de} (c), calculées sur le maillage érodé. Chargement de traction uniaxiale selon la direction x .



(a)



(b)

(c)

FIG. IV.25 – Distribution des contraintes dans la matrice, normalisée par rapport à la contrainte moyenne Σ_{de} (a) et cartes des contraintes de traction σ_{xx}/Σ_{de} (b) et de cisaillement σ_{xy}/Σ_{de} (c), calculées sur le maillage érodé. Chargement sphérique.

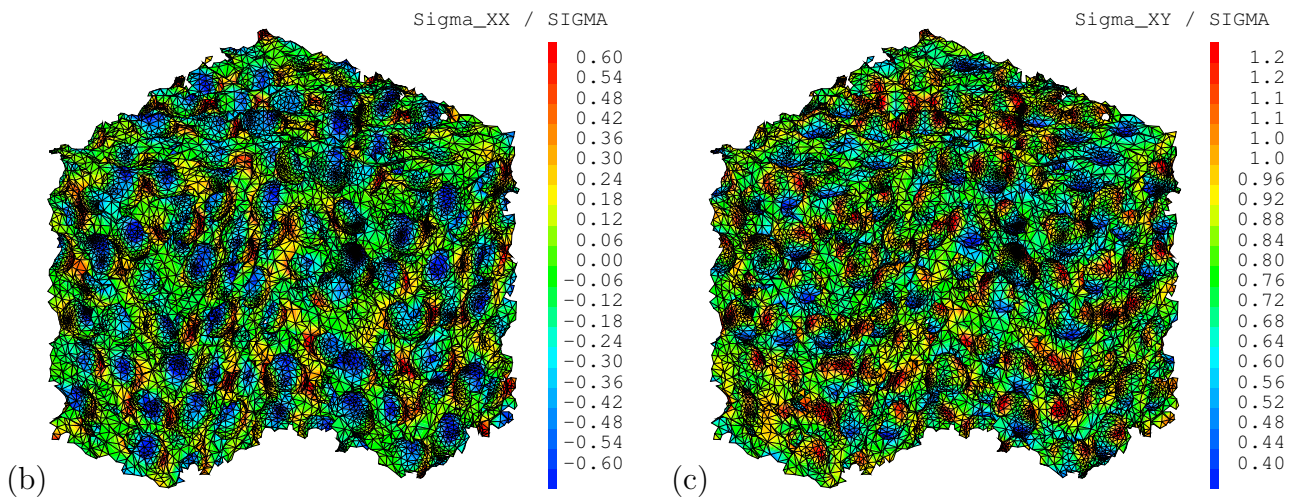
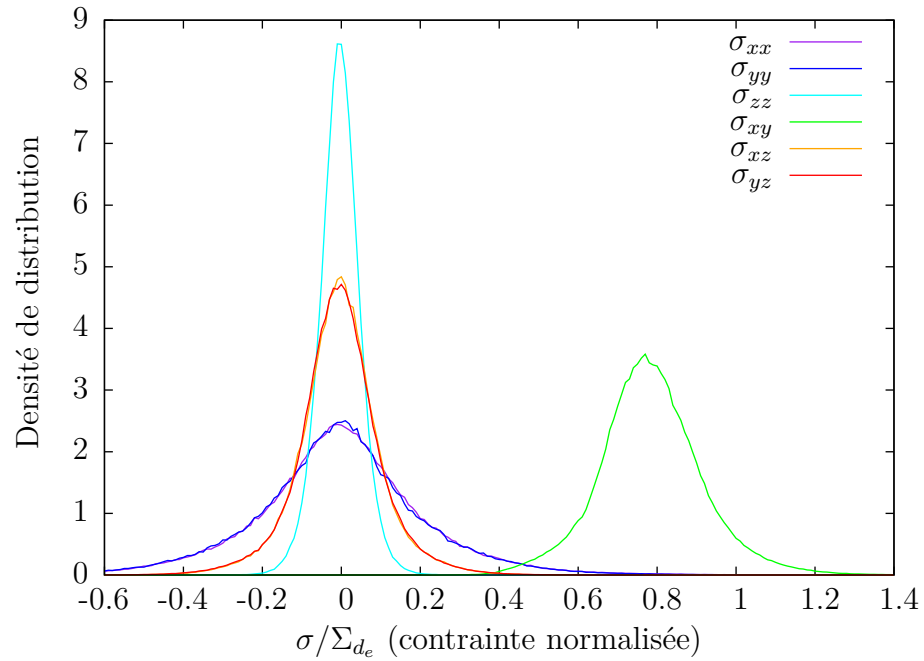


FIG. IV.26 – Distribution des contraintes dans la matrice, normalisées par rapport à la contrainte moyenne Σ_{de} (a) et cartes des contraintes de traction σ_{xx}/Σ_{de} (b) et de cisaillement σ_{xy}/Σ_{de} (c), calculées sur le maillage érodé. Chargement de cisaillement pur xy .

Chapitre V

Modélisation par changement d'échelles du combustible à particules

Ce chapitre présente la modélisation par changement d'échelles développée pour le combustible à particule. Les résultats précédents montrent que le modèle auto-cohérent 3-phases permet d'estimer correctement les propriétés thermo-élastiques effectives du combustible à particules. Les travaux de BLANC (2009) portant sur la modélisation de combustibles à particules présentant une fraction volumique de particules plus faible, exposent des résultats analogues en utilisant le modèle auto-cohérent $(n + 1)$ -phases. Cependant, les résultats du chapitre précédent montrent également que, dans la matrice, la distribution des contraintes peut être très dispersée. Ce type de modèle, fournissant une estimation des contraintes et déformations moyennes par phases, n'est donc pas suffisant pour analyser la tenue mécanique du combustible, via celle de la matrice.

L'objectif est d'enrichir cette modélisation afin d'estimer la dispersion des contraintes dans la matrice pour tout chargement macroscopique. Deux idées ont été explorées. La première consiste à superposer plusieurs schémas d'homogénéisation classiques en considérant une distribution de valeurs de fractions volumiques de particules. Ce modèle fournit alors une distribution de coefficients de localisation des contraintes dans la matrice. La seconde méthode consiste à caractériser les moments statistiques d'ordre 1 et 2 des contraintes à partir des solutions calculées par éléments finis. Le choix d'une loi de distribution multivariée permet ensuite de construire un échantillon statistique de l'état de contrainte local pour un état de contrainte macroscopique quelconque.

V.1 Superposition de schémas

V.1.1 Principe du modèle

Nous faisons l'hypothèse que la dispersion des contraintes au sein de la microstructure est liée à la variabilité de la fraction volumique des particules. En effet, les zones fortement chargées dans la matrice sont les zones où les ligaments sont les plus fins, là où les particules sont proches les unes des autres. Nous proposons de reconstruire la distribution des contraintes à partir de la distribution de fraction volumique de particules par superposition de schémas auto-cohérents 3-phases.

La distribution de fraction volumique de particules des échantillons numériques est obtenue en calculant la fraction volumique de particule dans chaque polyèdre de VORONOÏ. La figure V.1 présente la distribution de fraction volumique de particules calculée sur l'échantillon numérique de taille $8D$ où l'on a retiré les cellules situées sur les bords.

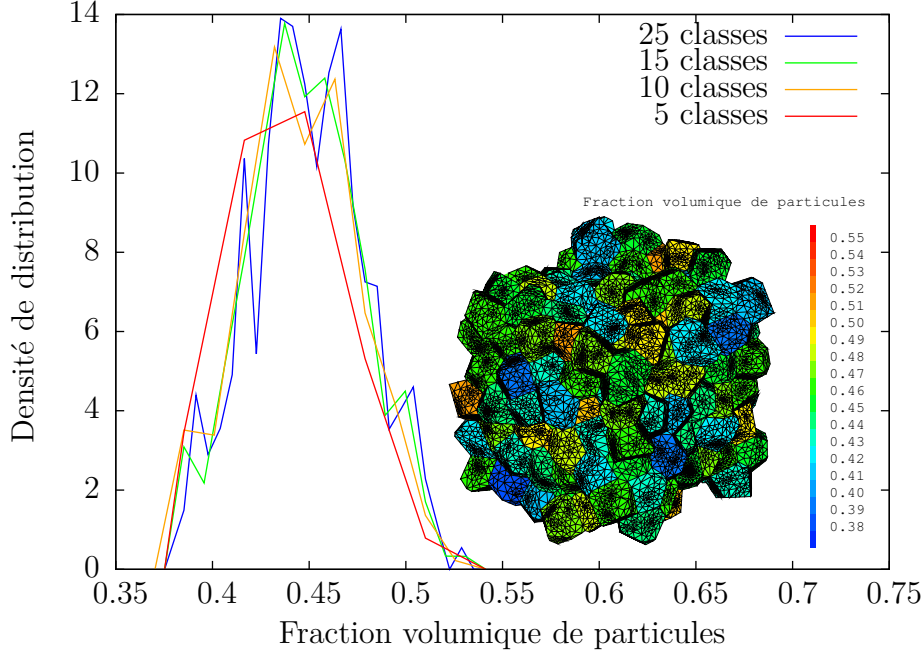


FIG. V.1 – Distribution de la fraction volumique de particules calculée sur un échantillon de taille $8D$ à partir des fractions volumiques de particules dans chaque cellule de VORONOÏ. Plusieurs nombres de classes sont utilisés.

Le modèle de changement d'échelles proposé est basé sur un double changement d'échelles et sa construction est illustrée par la figure V.2. Notons n le nombre de classes de fraction volumique de particules. Le modèle est construit en deux étapes :

- La distribution de fraction volumique de particules nous fournit la proportion volumique p_i de matrice présentant une fraction volumique $f v_i$ de particules. Pour chaque classe i , on estime, à l'aide du modèle auto-cohérent 3-phases, le milieu homogène équivalent MHE_i à l'ensemble des polyèdres de VORONOÏ présentant une fraction volumique de particules $f v_i$. Pour chaque MHE_i , nous obtenons deux modules d'élasticité effectifs ${}^{AC3}K_i$ et ${}^{AC3}G_i$, ainsi que deux coefficients de localisation des contraintes dans la matrice : ${}^{AC3}B_{m_i}^K$ et ${}^{AC3}B_{m_i}^J$, représentant, respectivement, les termes de localisation des parties sphériques et déviatoriques des contraintes. La contrainte moyenne dans la matrice s'écrit alors :

$$\underline{\underline{\sigma}}_{m_i} = \left({}^{AC3}B_{m_i}^K \mathbb{K} + {}^{AC3}B_{m_i}^J \mathbb{J} \right) : \underline{\underline{\sigma}}_{\text{MHE}_i} \quad (\text{V.1})$$

où \mathbb{K} et \mathbb{J} sont les tenseurs d'ordre 4 permettant de projeter les parties sphériques et déviatoriques des tenseurs d'ordre 2 symétriques.

- Le MHE global est obtenu en appliquant le modèle auto-cohérent « classique » au milieu constitué de tous les MHE_i , de proportion volumique p_i . On assimile chaque MHE_i à une inclusion sphérique plongée dans le MHE recherché. Le modèle fournit alors les modules

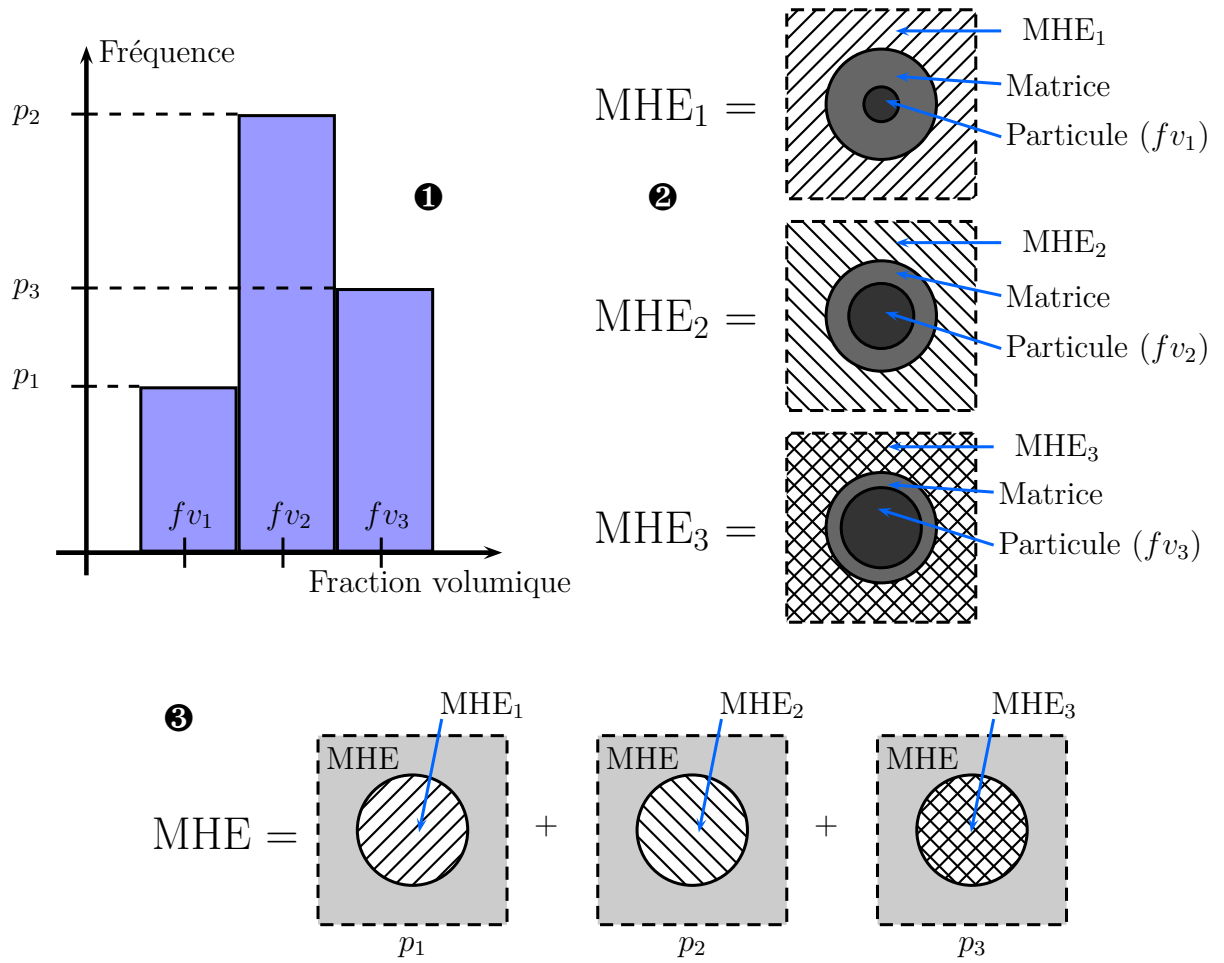


FIG. V.2 – Illustration du principe du modèle de changement d'échelles.

d'élasticité effectifs ${}^{AC}K$ et ${}^{AC}G$, ainsi que n coefficients de localisation des contraintes dans chacun des MHE_i : ${}^{AC}B_{MHE_i}^K$ et ${}^{AC}B_{MHE_i}^J$. La contrainte moyenne dans le MHE_i est alors donnée par :

$$\underline{\underline{\sigma}}_{MHE_i} = \left({}^{AC}B_{MHE_i}^K \mathbb{K} + {}^{AC}B_{MHE_i}^J \mathbb{J} \right) : \underline{\underline{\Sigma}}. \quad (V.2)$$

Le milieu particules/matrice est donc modélisé comme un milieu constitué de n phases ayant la même morphologie, chacune d'elles représentant un milieu hétérogène particules/matrice de fraction volumique de particules distincte. Le modèle permet de localiser les contraintes dans chaque MHE_i (à l'aide de ${}^{AC}B_{MHE_i}^K$ et ${}^{AC}B_{MHE_i}^J$), puis dans chaque phase « matrice » des MHE_i (à l'aide de ${}^{AC3}B_{m_i}^K$ et ${}^{AC3}B_{m_i}^J$), ce qui fournit une distribution de coefficients de localisation des contraintes dans la matrice. Finalement, pour un chargement macroscopique $\underline{\underline{\Sigma}}$, la contrainte dans la matrice de la classe i est donnée en combinant les équations (V.1) et (V.2) :

$$\underline{\underline{\sigma}}_{m_i} = \left(B_{m_i}^K \mathbb{K} + B_{m_i}^J \mathbb{J} \right) : \underline{\underline{\Sigma}} \quad (V.3)$$

avec $B_{m_i}^K = {}^{AC3}B_{m_i}^K \cdot {}^{AC}B_{MHE_i}^K$ et $B_{m_i}^J = {}^{AC3}B_{m_i}^J \cdot {}^{AC}B_{MHE_i}^J$.

V.1.2 Résultats

La distribution des coefficients de localisation de la partie sphérique des contraintes B_i^K obtenue par ce modèle peut être comparée à celle obtenue à partir des calculs de microstructures.

Le tableau V.1 présente les valeurs des coefficients de localisation de la contrainte hydrostatique dans la matrice calculées pour cinq classes de fraction volumique de particules et la figure V.3 présente la distribution de ce coefficient obtenue par le modèle et par la simulation. La distribution des B_m^K obtenue par le modèle est trop resserrée et ne représente pas la dispersion de celle obtenue par le calcul.

TAB. V.1 – Valeurs des coefficients de localisation de la contrainte hydrostatique intervenants dans le modèle par superposition de motifs en utilisant cinq classes de fraction volumique de particules.

fv_i (%)	p_i	$B_{m_i}^K$
40.1	0.108	0.726
43.2	0.339	0.730
46.3	0.362	0.736
49.4	0.165	0.737
52.6	0.0242	0.745

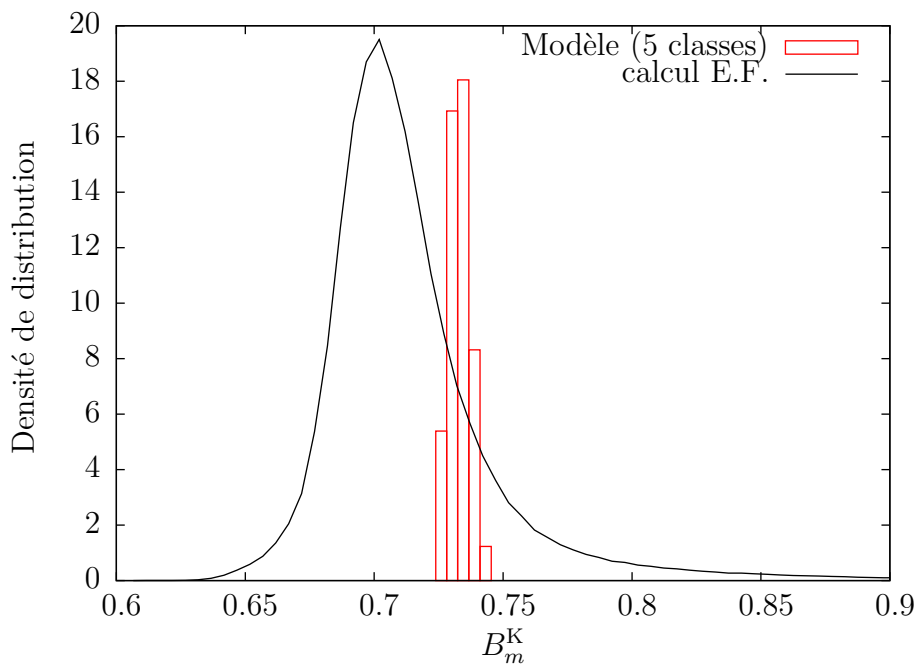


FIG. V.3 – Distributions du coefficient B_m^K de localisation de la contrainte hydrostatique dans la matrice. L'amplitude de la distribution obtenue par le modèle est divisée par 5 dans un souci de lisibilité.

En conclusion, ce type de modèle ne permet pas d'estimer correctement la distribution des contraintes dans la matrice. D'une part, l'hypothèse initiale que la dispersion des contraintes est liée à la variabilité de la fraction volumique de particules est sans doute trop simpliste. D'autre part, même si la superposition de schémas peut rendre compte de l'hétérogénéité du paramètre microstructural dont est fonction le modèle, à savoir la fraction volumique de particules, le schéma utilisé ne prend pas en compte correctement les interactions mécaniques entre particules. Or, l'hétérogénéité des contraintes est sans doute fortement due aux interactions mécaniques entre particules pour la fraction volumique considérée.

V.2 Identification d'une approche statistique d'ordre 2

L'hétérogénéité des contraintes dans la matrice, dont le volume est noté V_m , peut être caractérisée statistiquement par sa valeur moyenne $\underline{\underline{\sigma}}_m = \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_{V_m}$, ou son moment d'ordre 1, ainsi que par son moment d'ordre 2 pour la dispersion : $\langle \underline{\underline{\sigma}} \otimes \underline{\underline{\sigma}} \rangle_{V_m}$. Nous proposons d'identifier, à partir des calculs réalisés sur nos échantillons numériques, des opérateurs permettant de localiser ces deux moments statistiques pour tout chargement macroscopique.

V.2.1 Tenseurs de localisation moyens par phase

Les moments d'ordre 1 sont donnés par les tenseurs de localisation moyens par phase. Les équations V.4 à V.7 présentent les valeurs des tenseurs de localisation des déformations, \mathbb{A}_m , \mathbb{A}_p , et des contraintes, \mathbb{B}_m , \mathbb{B}_p , moyens dans la matrice et les particules¹, déterminés à partir de la solution érodée de l'échantillon de taille $8D$ en appliquant six chargements linéairement indépendants (tractions simples dans chacune des directions de l'espace et cisaillements purs sur chacune des faces parallèles de l'échantillon). La valeur ~ 0 correspond à un résultat numérique inférieur à $5 \text{ E}-3$.

$$\mathbb{A}_m = \left[\begin{array}{ccc|ccc} \mathbf{1.35} & \mathbf{0.0381} & \mathbf{0.0374} & \sim 0 & \sim 0 & \sim 0 \\ \mathbf{0.0395} & \mathbf{1.35} & \mathbf{0.0393} & \sim 0 & \sim 0 & \sim 0 \\ \mathbf{0.0397} & \mathbf{0.0403} & \mathbf{1.35} & \sim 0 & \sim 0 & \sim 0 \\ \hline \sim 0 & \sim 0 & \sim 0 & \mathbf{1.31} & \sim 0 & \sim 0 \\ \sim 0 & \sim 0 & \sim 0 & \sim 0 & \mathbf{1.31} & \sim 0 \\ \sim 0 & \sim 0 & \sim 0 & \sim 0 & \sim 0 & \mathbf{1.31} \end{array} \right] \quad (\text{V.4})$$

$$\mathbb{A}_p = \left[\begin{array}{ccc|ccc} \mathbf{0.587} & \mathbf{-0.0453} & \mathbf{-0.0444} & \sim 0 & \sim 0 & \sim 0 \\ \mathbf{-0.0449} & \mathbf{0.588} & \mathbf{-0.0448} & \sim 0 & \sim 0 & \sim 0 \\ \mathbf{-0.0445} & \mathbf{-0.0452} & \mathbf{0.585} & \sim 0 & \sim 0 & \sim 0 \\ \hline \sim 0 & \sim 0 & \sim 0 & \mathbf{0.632} & \sim 0 & \sim 0 \\ \sim 0 & \sim 0 & \sim 0 & \sim 0 & \mathbf{0.632} & \sim 0 \\ \sim 0 & \sim 0 & \sim 0 & \sim 0 & \sim 0 & \mathbf{0.630} \end{array} \right] \quad (\text{V.5})$$

$$\mathbb{B}_m = \left[\begin{array}{ccc|ccc} \mathbf{0.765} & \mathbf{-0.0231} & \mathbf{-0.0232} & \sim 0 & \sim 0 & \sim 0 \\ \mathbf{-0.0234} & \mathbf{0.764} & \mathbf{-0.0229} & \sim 0 & \sim 0 & \sim 0 \\ \mathbf{-0.0242} & \mathbf{-0.0229} & \mathbf{0.767} & \sim 0 & \sim 0 & \sim 0 \\ \hline \sim 0 & \sim 0 & \sim 0 & \mathbf{0.789} & \sim 0 & \sim 0 \\ \sim 0 & \sim 0 & \sim 0 & \sim 0 & \mathbf{0.789} & \sim 0 \\ \sim 0 & \sim 0 & \sim 0 & \sim 0 & \sim 0 & \mathbf{0.791} \end{array} \right] \quad (\text{V.6})$$

$$\mathbb{B}_p = \left[\begin{array}{ccc|ccc} \mathbf{1.28} & \mathbf{0.0301} & \mathbf{0.0318} & \sim 0 & \sim 0 & \sim 0 \\ \mathbf{0.0301} & \mathbf{1.28} & \mathbf{0.0297} & \sim 0 & \sim 0 & \sim 0 \\ \mathbf{0.0306} & \mathbf{0.0300} & \mathbf{1.28} & \sim 0 & \sim 0 & \sim 0 \\ \hline \sim 0 & \sim 0 & \sim 0 & \mathbf{1.25} & \sim 0 & \sim 0 \\ \sim 0 & \sim 0 & \sim 0 & \sim 0 & \mathbf{1.25} & \sim 0 \\ \sim 0 & \sim 0 & \sim 0 & \sim 0 & \sim 0 & \mathbf{1.25} \end{array} \right]. \quad (\text{V.7})$$

Ces valeurs peuvent être comparées aux résultats donnés par le modèle auto-cohérent 3-phases. Le tableau V.2 présente les valeurs des coefficients des tenseurs de localisation obtenus à

¹La notation de VOIGT est utilisée avec $\underline{\underline{\varepsilon}} \equiv^t [\varepsilon_{xx} \ \varepsilon_{yy} \ \varepsilon_{zz} \ \varepsilon_{xy} \ \varepsilon_{xz} \ \varepsilon_{yz}]$ et $\underline{\underline{E}} \equiv^t [E_{xx} \ E_{yy} \ E_{zz} \ E_{xy} \ E_{xz} \ E_{yz}]$.

TAB. V.2 – Coefficients de localisation des déformations et des contraintes moyennes donnés par le modèle auto-cohérent 3-phases.

	Matrice	Particules
A^K	1.43	0.485
A^J	1.32	0.622
B^K	0.731	1.32
B^J	0.799	1.24

partir de ce modèle, ce qui donne les tenseurs de localisation des déformations et des contraintes suivants :

$$\mathbb{A}_m^{\text{AC3}} = \left[\begin{array}{ccc|ccc} \mathbf{1.36} & \mathbf{0.0367} & \mathbf{0.0367} & 0 & 0 & 0 \\ \mathbf{0.0367} & \mathbf{1.36} & \mathbf{0.0367} & 0 & 0 & 0 \\ \mathbf{0.0367} & \mathbf{0.0367} & \mathbf{1.36} & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & \mathbf{1.32} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{1.32} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{1.32} \end{array} \right] \quad (\text{V.8})$$

$$\mathbb{A}_p^{\text{AC3}} = \left[\begin{array}{ccc|ccc} \mathbf{0.576} & \mathbf{-0.0457} & \mathbf{-0.0457} & 0 & 0 & 0 \\ \mathbf{-0.0457} & \mathbf{0.576} & \mathbf{-0.0457} & 0 & 0 & 0 \\ \mathbf{-0.0457} & \mathbf{-0.0457} & \mathbf{0.576} & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & \mathbf{0.622} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{0.622} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{0.622} \end{array} \right] \quad (\text{V.9})$$

$$\mathbb{B}_m^{\text{AC3}} = \left[\begin{array}{ccc|ccc} \mathbf{0.776} & \mathbf{-0.0227} & \mathbf{-0.0227} & 0 & 0 & 0 \\ \mathbf{-0.0227} & \mathbf{0.776} & \mathbf{-0.0227} & 0 & 0 & 0 \\ \mathbf{-0.0227} & \mathbf{-0.0227} & \mathbf{0.776} & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & \mathbf{0.799} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{0.799} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{0.799} \end{array} \right] \quad (\text{V.10})$$

$$\mathbb{B}_p^{\text{AC3}} = \left[\begin{array}{ccc|ccc} \mathbf{1.27} & \mathbf{0.0267} & \mathbf{0.0267} & 0 & 0 & 0 \\ \mathbf{0.0267} & \mathbf{1.27} & \mathbf{0.0267} & 0 & 0 & 0 \\ \mathbf{0.0267} & \mathbf{0.0267} & \mathbf{1.27} & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & \mathbf{1.24} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{1.24} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{1.24} \end{array} \right] \quad (\text{V.11})$$

Les valeurs obtenues par calcul éléments finis sont en bon accord avec celles du modèle auto-cohérent 3-phases. L'écart relatif maximum sur les termes diagonaux est inférieur à 2 %.

V.2.2 Matrice de variance-covariance

Afin de caractériser la variance des contraintes, nous nous intéressons au moment statistique d'ordre 2 centré sur la moyenne :

$$\begin{aligned}\mathbb{V}_m &= \left\langle \left(\underline{\underline{\sigma}} - \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_{V_m} \right) \otimes \left(\underline{\underline{\sigma}} - \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_{V_m} \right) \right\rangle_{V_m} \\ &= \left\langle \left(\underline{\underline{\sigma}} - \underline{\underline{\sigma}}_m \right) \otimes \left(\underline{\underline{\sigma}} - \underline{\underline{\sigma}}_m \right) \right\rangle_{V_m}.\end{aligned}\tag{V.12}$$

Le tenseur \mathbb{V}_m , d'ordre 4, est la matrice de variance-covariance des composantes du tenseur des contraintes. L'équation précédente s'écrit, en notation indicielle :

$$\begin{aligned}V_{mijkl} &= \left\langle (\sigma_{ij} - \sigma_{mij})(\sigma_{kl} - \sigma_{mkl}) \right\rangle_{V_m} \\ &= Cov(\sigma_{ij}, \sigma_{kl})_{V_m}.\end{aligned}\tag{V.13}$$

Les termes diagonaux correspondent aux variances de chacune des composantes :

$$Cov(\sigma_{ij}, \sigma_{ij})_{V_m} = Var(\sigma_{ij})_{V_m}.\tag{V.14}$$

\mathbb{V}_m peut être représenté par une matrice 6×6 :

$$\mathbb{V}_m = \begin{bmatrix} Var(\sigma_{11}) & Cov(\sigma_{11}, \sigma_{22}) & Cov(\sigma_{11}, \sigma_{33}) & Cov(\sigma_{11}, \sigma_{12}) & Cov(\sigma_{11}, \sigma_{13}) & Cov(\sigma_{11}, \sigma_{23}) \\ & Var(\sigma_{22}) & Cov(\sigma_{22}, \sigma_{33}) & Cov(\sigma_{22}, \sigma_{12}) & Cov(\sigma_{22}, \sigma_{13}) & Cov(\sigma_{22}, \sigma_{23}) \\ & & Var(\sigma_{33}) & Cov(\sigma_{33}, \sigma_{12}) & Cov(\sigma_{33}, \sigma_{13}) & Cov(\sigma_{33}, \sigma_{23}) \\ & & & Var(\sigma_{12}) & Cov(\sigma_{12}, \sigma_{13}) & Cov(\sigma_{12}, \sigma_{23}) \\ & & & & Var(\sigma_{13}) & Cov(\sigma_{13}, \sigma_{23}) \\ & & & & & Var(\sigma_{23}) \end{bmatrix}.\tag{V.15}$$

À partir de la matrice de variance-covariance, il est possible de calculer la matrice de corrélation linéaire entre les composantes des contraintes. Le coefficient de corrélation linéaire entre deux variables σ_{ij} et σ_{kl} , noté $Corr(\sigma_{ij}, \sigma_{kl})$, est défini comme le rapport de la covariance et de la racine carrée du produit des variances :

$$Corr(\sigma_{ij}, \sigma_{kl}) = \frac{Cov(\sigma_{ij}, \sigma_{kl})}{\sqrt{Var(\sigma_{ij})Var(\sigma_{kl})}}.\tag{V.16}$$

Ce coefficient, compris entre -1 et 1, indique si les composantes sont linéairement corrélées. La valeur 1, respectivement -1, indique que l'une des variables est une fonction affine croissante, respectivement décroissante, de l'autre variable. La valeur 0 indique que les deux variables ne sont pas linéairement corrélées.

V.2.3 Localisation de la matrice de variance-covariance

L'expression (V.12) peut être transformée en introduisant le tenseur de localisation des contraintes \mathbb{B} et sa moyenne dans la matrice $\mathbb{B}_m = \langle \mathbb{B} \rangle_{V_m}$:

$$\begin{aligned}
 \mathbb{V}_m &= \langle (\underline{\underline{\sigma}} - \underline{\underline{\sigma}}_m) \otimes (\underline{\underline{\sigma}} - \underline{\underline{\sigma}}_m) \rangle_{V_m} \\
 &= \langle (\mathbb{B} : \underline{\underline{\Sigma}} - \mathbb{B}_m : \underline{\underline{\Sigma}}) \otimes (\mathbb{B} : \underline{\underline{\Sigma}} - \mathbb{B}_m : \underline{\underline{\Sigma}}) \rangle_{V_m} \\
 &= \langle ((\mathbb{B} - \mathbb{B}_m) : \underline{\underline{\Sigma}}) \otimes ((\mathbb{B} - \mathbb{B}_m) : \underline{\underline{\Sigma}}) \rangle_{V_m} \\
 &= \langle ({}^t\underline{\underline{\Sigma}} : ({}^t\mathbb{B} - {}^t\mathbb{B}_m)) \otimes ((\mathbb{B} - \mathbb{B}_m) : \underline{\underline{\Sigma}}) \rangle_{V_m} \\
 &= {}^t\underline{\underline{\Sigma}} : \underbrace{\langle ({}^t\mathbb{B} - {}^t\mathbb{B}_m) \otimes (\mathbb{B} - \mathbb{B}_m) \rangle_{V_m}}_{\mathbb{Y}_m} : \underline{\underline{\Sigma}} \\
 &= {}^t\underline{\underline{\Sigma}} : \mathbb{Y}_m : \underline{\underline{\Sigma}},
 \end{aligned} \tag{V.17}$$

où \mathbb{Y}_m est un tenseur d'ordre 8 de localisation du moment centré d'ordre 2 des contraintes dans la matrice.

Nous avons identifié le tenseur de localisation \mathbb{Y}_m à partir des résultats de caractérisation des échantillons numériques. \mathbb{Y}_m ne dépend que de \mathbb{B} , il suffit donc de déterminer en tout point d'un échantillon le tenseur de localisation \mathbb{B} , ce qui est fait en appliquant six chargements linéairement indépendants. Nous avons alors validé cette identification en estimant la matrice de variance-covariance \mathbb{V}_m pour deux chargements macroscopiques distincts : un chargement de traction équi-biaxiale $\underline{\underline{\Sigma}}^{\textcircled{1}}$ et un chargement arbitraire $\underline{\underline{\Sigma}}^{\textcircled{2}}$:

$$\underline{\underline{\Sigma}}^{\textcircled{1}} = \begin{bmatrix} 10 & 0 & 0 \\ & 10 & 0 \\ Sym & & 0 \end{bmatrix} \text{ MPa} \quad \underline{\underline{\Sigma}}^{\textcircled{2}} = \begin{bmatrix} 10 & -20 & 0 \\ & -30 & 70 \\ Sym & & 0 \end{bmatrix} \text{ MPa}. \tag{V.18}$$

La figure V.4 présente les densités de distribution des contraintes dans la matrice induites par les chargements ① et ②. Dans les deux cas, la matrice de variance-covariance \mathbb{V}_m est estimée à partir du tenseur \mathbb{Y}_m identifié sur la solution érodée de l'échantillon numérique de taille $8D$. Cette matrice est comparée à celle obtenue à partir du calcul par éléments finis et en utilisant l'équation (V.12). Les matrices des erreurs relatives de \mathbb{V}_m pour les deux chargements sont présentées avec trois chiffres significatifs :

$$Err(\mathbb{V}_m^{\textcircled{1}}) = \begin{bmatrix} 4.20 & 6.65 & 4.90 & 5.71 & 4.60 & 5.60 \\ & 9.11 & 8.35 & 7.98 & 3.02 & 8.32 \\ & & 6.65 & 6.77 & 0.0854 & 10.7 \\ & Sym & & 6.66 & 1.55 & 8.59 \\ & & & & 4.15 & 12.8 \\ & & & & & 9.21 \end{bmatrix} \cdot 10^{-3} \tag{V.19}$$

$$Err(\mathbb{V}_m^{\textcircled{2}}) = \begin{bmatrix} 6.23 & 6.70 & 8.57 & 9.44 & 6.84 & 7.43 \\ & 8.70 & 9.04 & 6.74 & 6.88 & 8.76 \\ & & 9.04 & 11.7 & 6.86 & 8.69 \\ & Sym & & 8.64 & 13.2 & 6.99 \\ & & & & 8.64 & 8.24 \\ & & & & & 8.81 \end{bmatrix} \cdot 10^{-3}. \tag{V.20}$$

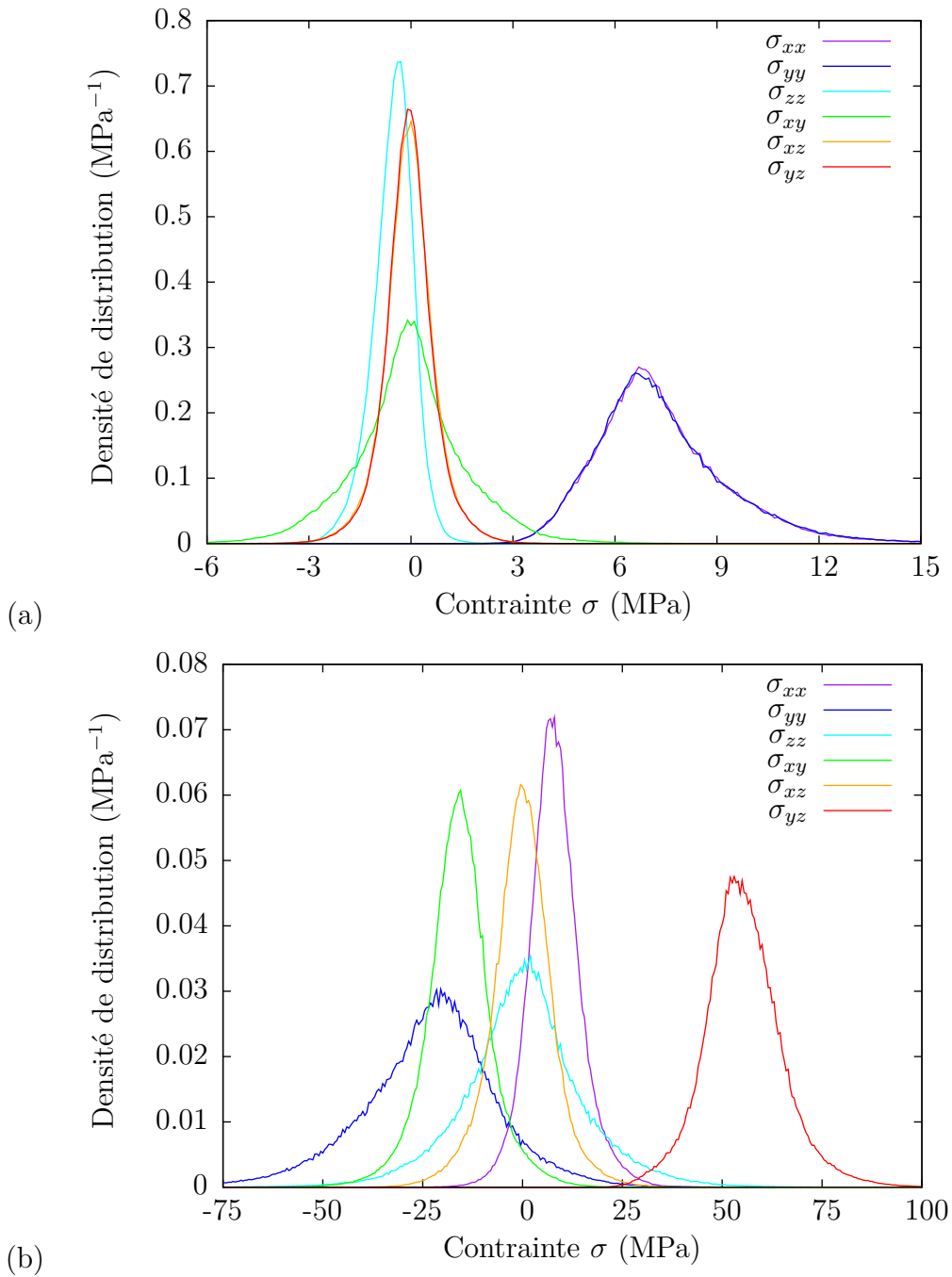


FIG. V.4 – Distribution des contraintes dans la matrice pour les chargement ① (a) et ② (b).

Les erreurs relatives maximales sont de l'ordre de 1 %. L'opérateur de localisation \mathbb{Y}_m a donc été correctement identifié.

V.2.4 Estimation de la distribution des contraintes dans la matrice par une loi normale multivariée

Considérons un point d'une structure soumis à une contrainte macroscopique $\underline{\underline{\Sigma}}$. Grâce aux tenseurs de localisation \mathbb{B}_m et \mathbb{Y}_m , il est possible de déterminer le tenseur des contraintes moyen dans la matrice $\underline{\underline{\sigma}}_m = \mathbb{B}_m : \underline{\underline{\Sigma}}$, ainsi que la matrice de variance-covariance des contraintes $\mathbb{V}_m = {}^t \underline{\underline{\Sigma}} : \mathbb{Y}_m : \underline{\underline{\Sigma}}$ induits par ce chargement. La donnée d'une loi de distribution permet alors d'estimer la distribution des contraintes, au sein de la matrice. Nous faisons le choix de la loi normale multivariée de paramètres statistiques $\underline{\underline{\sigma}}_m$ et \mathbb{V}_m .

Afin de simplifier les notations, nous assimilons le tenseur des contraintes $\underline{\underline{\sigma}}$ à un vecteur de 6 variables aléatoires noté $\underline{\sigma} = {}^t[\sigma_{11}, \sigma_{22}, \sigma_{33}, \sigma_{12}, \sigma_{13}, \sigma_{23}]$. De même, le tenseur \mathbb{V}_m est assimilé à une matrice 6×6 notée $\underline{\underline{V}}_m$. La fonction densité de distribution de la loi normale multivariée s'écrit :

$$f(\underline{\sigma}) = \frac{1}{(2\pi)^3 \sqrt{\det(\underline{\underline{V}}_m)}} \exp\left(-\frac{1}{2} {}^t(\underline{\sigma} - \underline{\sigma}_m) \cdot \underline{\underline{V}}_m^{-1} \cdot (\underline{\sigma} - \underline{\sigma}_m)\right). \quad (\text{V.21})$$

Nous avons comparé ces distributions gaussiennes aux distributions de référence obtenues par la simulation dans le cas de deux chargements macroscopiques élémentaires : une traction simple selon x (TS) et un cisaillement simple dans le plan xy (CS). La figure V.5 présente la distribution des contraintes dans la matrice pour ces deux chargements. Sur ces figures, nous constatons que les distributions estimées approchent correctement celles issues du calcul par éléments finis. Toutefois, nous constatons également que la loi normale ne permet pas de décrire correctement la dissymétrie des distributions, ni leur pointicité. Le choix d'une autre loi de distribution ou la prise en compte des moments statistiques d'ordre 3 ou 4 permettrait d'améliorer cela.

Les équations V.22 et V.23 présentent les matrices de corrélation linéaire pour ces deux chargements élémentaires.

$$Corr(TS) = \begin{bmatrix} 1 & 0.34 & 0.39 & 0.0041 & 0.017 & 0.056 \\ & 1 & 0.03 & -0.023 & -0.0055 & 0.062 \\ & & 1 & 0.045 & -0.018 & -0.013 \\ & Sym & & 1 & 0.0071 & 0.020 \\ & & & & 1 & 0.067 \\ & & & & & 1 \end{bmatrix} \quad (\text{V.22})$$

$$Corr(CS) = \begin{bmatrix} 1 & 0.82 & 0.26 & -0.036 & -0.037 & -0.030 \\ & 1 & 0.25 & -0.029 & -0.025 & -0.059 \\ & & 1 & -0.0078 & 0.0050 & 0.0027 \\ & Sym & & 1 & 0.027 & -0.010 \\ & & & & 1 & 0.013 \\ & & & & & 1 \end{bmatrix}. \quad (\text{V.23})$$

Dans le cas du chargement en traction, les composantes du tenseur des contraintes ne sont quasiment pas corrélées entre elles, mis à part les contraintes de traction dans les directions y

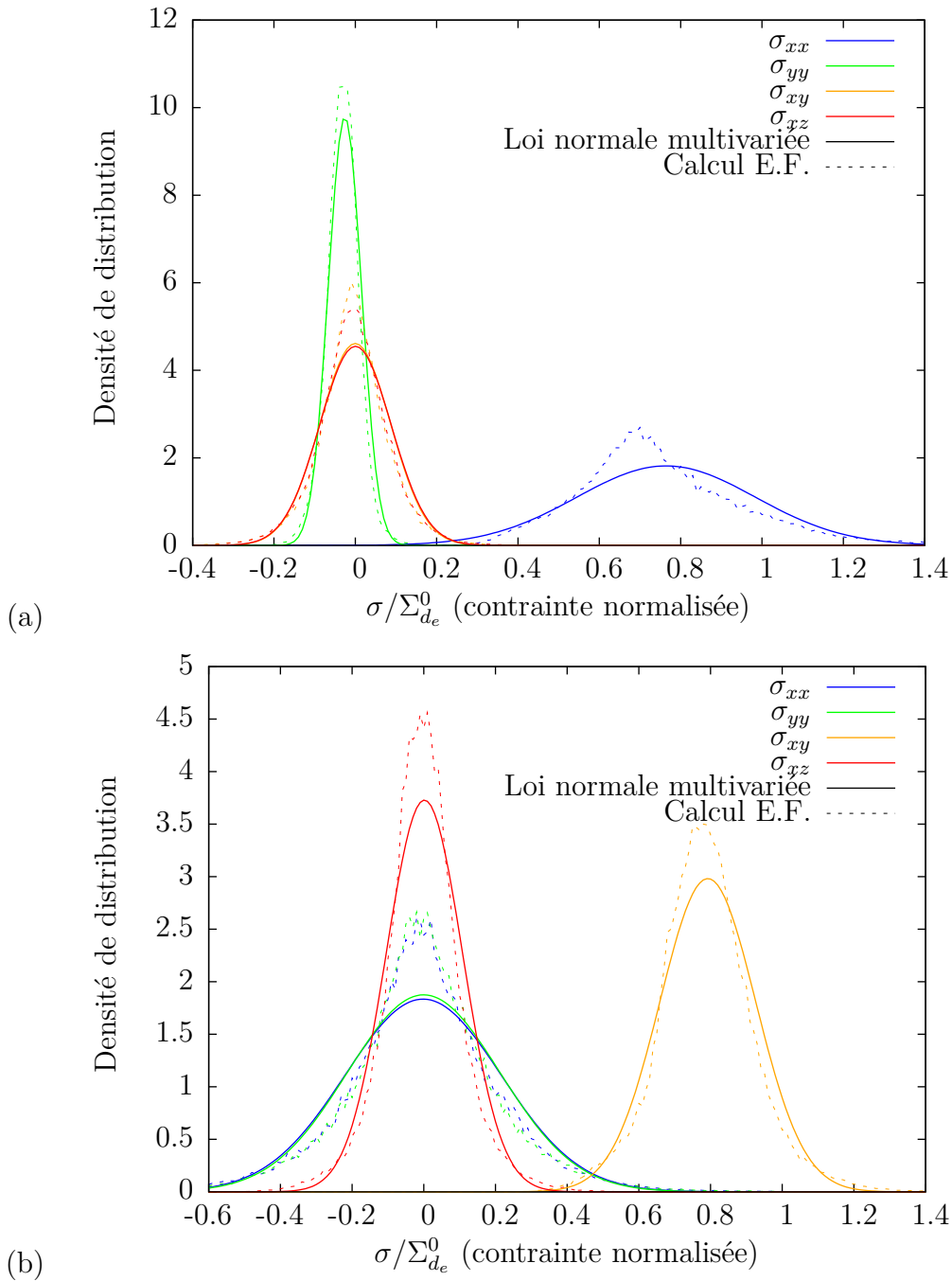


FIG. V.5 – Distributions des contraintes dans la matrice, normalisées par rapport à la contrainte moyenne, pour les chargement de traction simple (a) et de cisaillement simple (b). Les fonctions de distribution données par la loi normale multivariée sont comparées à celles obtenues par le calcul par éléments finis.

et z qui sont légèrement corrélées à la contrainte imposée : le coefficient est égal respectivement à 0.34 et 0.39. Dans le cas du chargement en cisaillement, seules les contraintes de traction sont corrélées et notamment la contrainte dans la direction x avec celle dans la direction y où le coefficient est égal à 0.82. Enfin, nous pouvons noter que la contrainte de cisaillement imposée σ_{xy} n'est que très faiblement corrélée aux autres composantes.

V.2.5 Éléments de mise en œuvre dans un calcul de structure

Dans ce paragraphe, nous précisons comment mettre en œuvre l'approche multi-échelles statistique précédente dans un calcul de structure. La démarche est illustrée par la figure V.6.

- À partir d'un calcul par éléments finis d'une structure constituée du MHE, il s'agit d'extraire, en chaque point d'intégration, le tenseur des contraintes macroscopique $\underline{\underline{\Sigma}}$.
- Il est alors possible de localiser, au niveau d'un point d'intégration, la contrainte moyenne dans la matrice $\underline{\underline{\sigma}}_m$ et la matrice de variance-covariance \mathbb{V}_m des contraintes à l'aide des tenseurs \mathbb{B}_m et \mathbb{Y}_m .
- Nous pouvons, ensuite, générer un échantillon statistique d'états de contrainte locaux dans la matrice suivant la loi normale multivariée de paramètres $\underline{\underline{\sigma}}_m$ et \mathbb{V}_m . Ces états de contrainte peuvent être attribués aux points d'intégration d'un maillage simple.
- Enfin, on applique un critère de dimensionnement sur cet échantillon d'états de contrainte. La proportion volumique de cet échantillon dépassant ce critère, pondérée par la loi de distribution, fournit alors la proportion de matrice endommagée au point d'intégration de la structure considéré.

Si la mise en œuvre de ce post-traitement n'est pas immédiate, elle est tout de même parfaitement envisageable avec les moyens de calcul actuels.

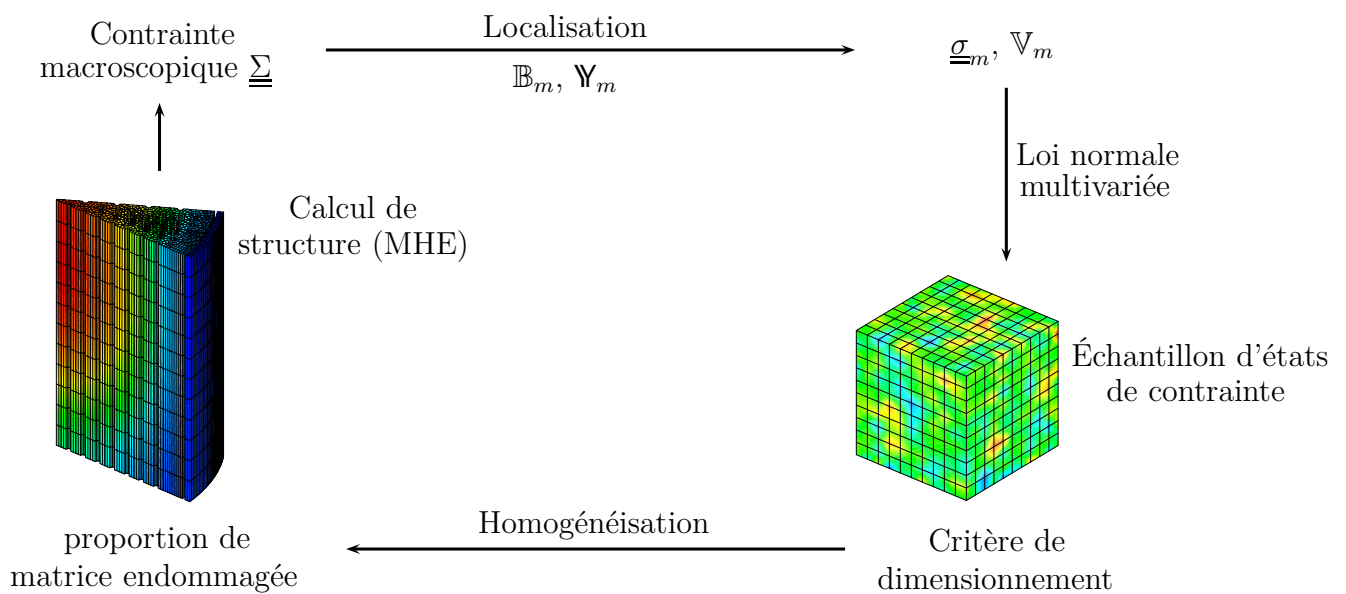


FIG. V.6 – Illustration de la mise en œuvre de l'approche statistique de changement d'échelles dans un calcul de structure.

V.3 Conclusions et perspectives

L'approche par superposition de schémas, basée sur la distribution de fraction volumique de particules, ne permet pas d'estimer la dispersion des champs mécaniques dans la matrice. Les schémas utilisés sont basés sur la solution analytique d'une inclusion sphérique plongée dans un milieu infini et ne prennent pas en compte correctement les interactions mécaniques entre particules, qui jouent très certainement un rôle prépondérant étant donnée la forte fraction volumique de particules considérée.

Nous avons alors mis en œuvre une approche statistique et identifié les tenseurs de localisation des contraintes moyennes par phase et du moment centré d'ordre 2, traduisant la variance des contraintes. L'utilisation d'une loi de distribution normale multivariée permet de reconstruire les distributions de contraintes à partir de ces deux moments statistiques. Les distributions ainsi obtenues sont en bon accord avec celles issues du calcul de microstructure. Cette approche statistique nous a donc permis d'atteindre notre objectif. Toutefois, elle ne s'appuie pas sur des informations morphologiques de la microstructure, ce qui limite son emploi à son domaine d'identification.

L'application de cette démarche à un calcul de structure nécessite encore de poursuivre ce travail afin de prendre en compte le couplage thermo-mécanique à l'échelle locale. En intégrant les déformations thermiques $\underline{\underline{\varepsilon}}_j^{th}$ de chaque phase dans la relation de localisation, la déformation totale dans la phase i peut s'écrire sous la forme suivante :

$$\underline{\underline{\varepsilon}}_i = \mathbb{A}_i : \left(\underline{\underline{E}} - \underline{\underline{E}}^{th} \right) + \mathbb{D}_{ij} : \underline{\underline{\varepsilon}}_j^{th} \quad (\text{V.24})$$

où \mathbb{A}_i est le tenseur de localisation des déformations et \mathbb{D}_{ij} est le tenseur d'influence de la déformation thermique de la phase j sur la phase i . Il reste donc à identifier les composantes des tenseurs \mathbb{D}_{ij} et les termes d'un tenseur de localisation de la matrice de variance-covariance. Dans le cas d'un champ de température uniforme, ce travail ne doit pas présenter de difficultés particulières. Dans le cas contraire, qui nous concerne car les particules sont des sources de chaleur, cette tâche sera sans doute plus délicate à réaliser.

Chapitre VI

Conclusions générales et perspectives

VI.1 Conclusions

Ce travail de thèse avait pour objet la modélisation multi-échelles d'un combustible nucléaire réfractaire constitué de particules sphériques en proportion volumique élevée, enrobées dans une matrice de graphite. Il s'agissait d'obtenir les propriétés thermiques et mécaniques du matériau combustible afin que des calculs de dimensionnement de réacteur puissent être réalisés. L'hétérogénéité du matériau induit des fluctuations des variables mécaniques et la seule valeur moyenne de ces variables ne suffit pas pour le dimensionnement. Ainsi, nous devons étudier une approche multi-échelles permettant d'obtenir non seulement les propriétés moyennes du matériau, la valeur moyenne des variables mécaniques dans les phases, mais également la distribution de ces variables. Cette étude a été réalisée sur la base de calculs de microstructures. La difficulté majeure provenait de la forte fraction volumique des particules réparties aléatoirement dans la matrice. En effet, cette forte fraction volumique rend difficile la génération de microstructures et oblige à rendre compte des interactions mécaniques entre particules dans le modèle de changement d'échelles. Dans le cadre d'une approche exclusivement numérique, la démarche adoptée s'est naturellement divisé en trois étapes :

- générer des échantillons numériques du matériau ;
- caractériser leur comportement thermo-mécanique ;
- développer un modèle de changement d'échelles permettant de rendre compte de cette caractérisation.

La modélisation de la microstructure a consisté à générer des sphères de rayon constant réparties aléatoirement dans un volume élémentaire cubique de manière à approcher au plus près la fraction volumique de 45 %. Deux méthodes ont été utilisées ; premièrement, la méthode RSA modifiée, qui a nécessité d'importants développements numériques, s'est révélée sensible aux paramètres d'entrée de l'algorithme pour de telles fractions volumiques ; deuxièmement, un algorithme basé sur la dynamique moléculaire, qui a finalement été choisi pour la suite du travail. La microstructure des échantillons numériques a été caractérisée grâce à des outils que nous avons développés dans CAST3M. On peut ainsi obtenir le covariogramme, ou les moments d'inertie, dans les 3 directions de l'espace, ce qui nous a permis de vérifier l'isotropie spatiale de la distribution de sphères. Une attention particulière a été portée à la réalisation des maillages des microstructures. La technique de maillage libre développée s'appuie sur la partition de l'espace en cellules de VORONOÏ à partir des centres des particules. La partition de VORONOÏ a pu être réalisée grâce à une procédure développée dans CAST3M lors de travaux antérieurs.

Elle permet d'adapter la taille des éléments du maillage et de le raffiner dans les ligaments de matrice. Nous avons ainsi généré une centaine d'échantillons numériques de différentes tailles. La principale difficulté concerne le maillage des couches d'enrobage des particules intersectant un ou plusieurs bords du cube. La solution proposée consiste à utiliser des particules homogènes dont les propriétés thermo-mécaniques sont équivalentes à celles de la particule mutli-couches.

Concernant le calcul de microstructures, nous avons caractérisé le comportement thermo-élastique de l'ensemble des échantillons numériques. Les différents paramètres des simulations numériques ont été analysés, ce qui a notamment permis de valider l'utilisation de particules homogènes équivalentes, ainsi que l'hypothèse d'isotropie du comportement apparent. L'étude de la sensibilité au maillage nous a fait opter pour des éléments finis quadratiques. Nous avons également observé l'influence du type de conditions aux limites et mis en évidence que les différences entre les solutions calculées avec des conditions aux limites homogènes en contrainte ou en déformation ne sont significatives que sur les bords des échantillons. Nous proposons alors une méthode pour s'affranchir des effets de bords qui consiste à analyser la solution sur un sous-maillage des échantillons, obtenu par érosion du maillage global. Pour toutes les tailles d'échantillons numériques, la solution érodée respecte approximativement la condition de macro-homogénéité de HILL et le chargement moyen dans le sous-maillage érodé est identique au chargement appliqué à l'échantillon. Les propriétés apparentes et les distributions des contraintes calculées sont ainsi indépendantes du type de conditions aux limites. Cette méthode nous a permis d'estimer les propriétés thermo-élastiques effectives du matériau composite. La méthode révèle notamment son intérêt pour l'estimation de la conductivité thermique effective puisque l'encadrement obtenu par les deux conditions aux limites homogènes est relativement large. Nous avons enfin observé que la distribution des contraintes dans la matrice est très dispersée malgré le faible contraste entre les propriétés mécaniques des constituants.

Concernant la modélisation par changement d'échelles, nous avons exploré deux voies pour retrouver les hétérogénéités intra-phases des champs mécaniques. La première consistait à superposer des motifs du modèle auto-cohérent 3-phases avec différentes valeurs de fraction volumique de particules. La distribution des contraintes dans la matrice donnée par ce modèle a été comparée à la distribution des contraintes obtenue par les calculs de microstructure. La méthode de superposition de schémas s'est révélée inadaptée car elle sous-estime très largement la dispersion des contraintes dans la matrice. Ce résultat est sans doute lié à la formulation de la solution du schéma auto-cohérent 3-phases qui ne prend pas correctement en compte les interactions mécaniques entre particules. La seconde voie a été de caractériser la distribution des contraintes par ses moments d'ordre 1 (contrainte moyenne) et 2 (matrice de variance-covariance). Nous avons identifié les composantes des tenseurs de localisation de ces deux moments statistiques et proposons de reproduire la distribution des contraintes grâce à une loi normale multivariée. Cette démarche peut être mise en œuvre dans un calcul de structure en déterminant, en un point donné soumis à un état de contrainte macroscopique, les différents états de contrainte locaux dans la matrice et la proportion de matrice dépassant un critère de dimensionnement.

Enfin, de part leur caractère générique, la plupart des outils développés lors de ce travail : génération, maillage et caractérisation de microstructures, post-traitement des distributions de variables mécaniques et des tenseurs de localisation, pourra être utilisée dans d'autres modélisations de microstructures.

VI.2 Perspectives

Ce travail doit être poursuivi sur quatre points. Premièrement, si la modélisation multi-échelles proposée permet d'estimer correctement la distribution des variables mécaniques locales, elle ne s'appuie pas sur des caractéristiques morphologiques de la microstructure, ce qui la limite à la fraction volumique de particules envisagée et fait qu'elle ne peut être employée comme outil d'aide à l'élaboration de ce type de combustible. L'analyse de la variation des composantes des tenseurs de localisation en fonction de la fraction volumique de particules serait une méthode simple à mettre en œuvre pour y parvenir. Une démarche plus prometteuse, mais aussi plus ambitieuse, serait de poursuivre l'étude des relations entre morphologie et contraintes locales, en s'appuyant sur des motifs morphologiques simples mais faisant intervenir plusieurs particules.

Deuxièmement, la modélisation des particules combustibles, dans les calculs de microstructures, peut être améliorée en représentant explicitement les couches d'enrobage dans le maillage. Ce travail a déjà été initié en maillant les couches des particules situées à l'intérieur des échantillons numériques et en utilisant des particules homogènes équivalentes pour les particules situées sur les bords des cubes élémentaires. Ces maillages permettraient d'analyser le cas où le noyau d' UO_2 est décollé du buffer et de prendre en compte l'endommagement ou la rupture éventuelles des interfaces particules/matrice ou noyau/enrobage.

Troisièmement, la problématique liée au fait que les noyaux d' UO_2 sont sources de chaleur n'a pas été abordée. Or, cela engendre des fluctuations locales du champ de température, d'où une hétérogénéité des dilatations thermiques qui s'ajoute à l'hétérogénéité des champs mécaniques.

Quatrièmement, le problème de structure que représentent les assemblages combustibles du réacteur est quelque peu plus compliqué que ce qui a été envisagé jusqu'ici. D'une part, la microstructure de ces assemblages doit être marquée par des effets de parois puisqu'elle est constituée de particules millimétriques occupant une section hexagonale de 30 mm de côté, percée en son centre d'un canal de 10 mm de diamètre. D'autre part, ces assemblages sont soumis à des gradients de température importants. Il serait donc nécessaire d'analyser la réponse des échantillons numériques à ces gradients de température.

Bibliographie

- BAYART A.S. Modélisation multi-échelle d'un assemblage riveté aéronautique - vers un modèle de fragilisation structurale. Thèse de doctorat, Université de Valenciennes et du Hainaut Cambrésis (2005).
- BELYTSCHKO T., PARIMI C., MOËS N., SUKUMAR N. et USUI S. Structured extended finite element methods for solids defined by implicit surfaces. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* **56** (2003) pages 609–635.
- BENVENISTE Y. A new approach to the application of Mori-Tanaka's theory in composite materials. *Mechanics of Materials* **6** (1987) pages 147–157.
- BERVEILLER M. et ZAOUÏ A. An extension of the self-consistent scheme to plasticity-flowing polycrystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **26** (1979) pages 325–344.
- BÖHM H.J. et HAN W. Comparisons between three-dimensional and two-dimensional multi-particle unit cell models for particle reinforced metal matrix composites. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* **9** (2001) pages 47–65.
- BLANC V. Modélisation du comportement thermomécanique des combustibles à particules par une approche multi-échelle. Thèse de doctorat, Université de Provence (2009).
- BONAL J.P. Graphites et composites carbone/carbone pour les réacteurs à haut rendement. Rapport CEA/DEN/SAC/DMN/SEMI/LM2E/RT/01-041, CEA (2001).
- BORNERT M. Morphologie microstructurale et comportement mécanique ; caractérisations expérimentales, approches par bornes et estimations autocohérentes généralisées. Thèse de doctorat, École nationale des Ponts et Chaussées (1996).
- BORNERT M., BRETHEAU T. et GILORMINI P. *Homogénéisation en mécanique des matériaux 1 - Matériaux aléatoires élastiques et milieux périodiques*. Hermès, Paris (2001a).
- BORNERT M., BRETHEAU T. et GILORMINI P. *Homogénéisation en mécanique des matériaux 2 - Comportements non linéaires et problèmes ouverts*. Hermès, Paris (2001b).
- BORNERT M., HERVÉ E., STOLZ C. et ZAOUÏ A. Self-consistent approaches and strain heterogeneities in two-phase elastoplastic materials. *Applied Mechanics Reviews* **47** (1994) pages 66–76.
- BORNERT M., STOLZ C. et ZAOUÏ A. Morphologically representative pattern-based bounding in elasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **44** (1996) pages 307–331.
- CAILLETAUD G. et PILVIN P. Utilisation de modèles polycristallins pour le calcul par éléments finis. *Revue Européenne des Éléments Finis* **3** (1994) pages 515–541.

- CHABOCHE J.L., KRUCH S., MAIRE J.F. et POTTIER T. Towards a micromechanics based inelastic and damage modeling of composites. *International Journal of Plasticity* **17** (2001) pages 411–439.
- CHRISTENSEN R.M. et LO K.H. Solutions for effective shear properties in three phase sphere and cylinder models. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **27** (1979) pages 315–330.
- COOPER D.W. Random-sequential-packing simulations in three dimensions for spheres. *Physical Review A* **38** (1988) pages 522–524.
- DONEV A., TORQUATO S. et STILLINGER F.H. Neighbor list collision-driven molecular dynamics simulation for nonspherical hard particles. I. algorithmic details. *Journal of Computational Physics* **202** (2005a) pages 737–764.
- DONEV A., TORQUATO S. et STILLINGER F.H. Neighbor list collision-driven molecular dynamics simulation for nonspherical hard particles. II. applications to ellipses and ellipsoids. *Journal of Computational Physics* **202** (2005b) pages 765–793.
- DVORAK G.J. On uniform fields in heterogeneous media. *Proceeding of the Royal Society A* **431** (1990) pages 89–110.
- DVORAK G.J. Transformation fields analysis of inelastic composite materials. *Proceeding of the Royal Society A* **437** (1992) pages 311–327.
- DVORAK G.J. et BENVENISTE Y. On transformation strains and uniform fields in multiphase elastic media. *Proceeding of the Royal Society A* **437** (1992) pages 291–310.
- ESCLEINE J.M. Réflexions sur les évolutions possibles des matériaux de la particule HTR. Rapport CEA/DEN/CAD/DEC/SESC/LC2I DO 248, CEA (2005).
- ESHELBY J.D. The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion and related problems. *Proceeding of the Royal Society A* **421** (1957) pages 376–396.
- EVANS J.W. Random and cooperative sequential adsorption. *Reviews of Modern Physics* **65** (1993) pages 1281–1329.
- FEDER J. Random sequential adsorption. *Journal of Theoretical Biology* **87** (1980) pages 237–254.
- FEDER J. et GIAEVER I. Adsorption of ferritin. *Journal of Colloid and Interface Science* **78** (1980) pages 144–154.
- FINEGOLD L. et DONNELL J.T. Maximum density of random placing of membrane particles. *Nature* **278** (1979) pages 443–445.
- FOREST S. Milieux continus généralisés et matériaux hétérogènes. Habilitation à diriger les recherches, École Nationale Supérieure des Mines de Paris (2004).
- FRANÇOIS D., PINEAU A. et ZAOUI A. *Comportement mécanique des matériaux, Élasticité et Plasticité*. Hermès, Paris, seconde édition (1995).

- FREUND J., TUHKURI J. et HUGHES M. Micro-stress statistics of honeycomb material. In *IV European Conference on Computational Mechanics, France* (2010).
- GHAMRI A. Modélisation du comportement thermo-mécanique d'un combustible nucléaire à particules. Rapport de stage de deuxième année, École Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique, CEA (2009).
- GÉLÉBART L., CHATEAU C. et BORNERT M. Conditions aux limites mixtes normales. In *19^e Congrès Français de Mécanique, Marseille* (2009).
- GONZALEZ J.J., HEMMER P.C. et HOYE J.S. Cooperative effects in random sequential polymer reactions. *Chemical Physics* **3** (1974) pages 228–238.
- GOSMAIN L. et BONAL J.P. Le graphite dans les réacteurs à haute température 2^e partie : le comportement du graphite sous irradiation. Note technique CEA/DEN/SAC/-DMN/SEMI/LM2E/NT/03-045/B, CEA (2001).
- GUSEV A.A. Representative volume element size for elastic composites - a numerical study. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **45** (1997) pages 1449–1459.
- GUSEV A.A., HINE P.J. et WARD I.M. Fiber packing and elastic properties of a transversely random unidirectional glass/epoxy composite. *Composites Science and Technology* **60** (2000) pages 535–541.
- HASHIN Z. The elastic moduli of heterogeneous materials. *Journal of Applied Mechanics, Transactions of the ASME* **29** (1962) pages 143–150.
- HASHIN Z. et SHTRIKMAN S. Note on a variational approach to the theory of composite elastic materials. *Journal of the Franklin Institute* **271** (1961) pages 336–341.
- HASHIN Z. et SHTRIKMAN S. A variational approach to the theory of the effective magnetic permeability of multiphase materials. *Journal of Applied Physics* **33** (1962) pages 3125–3131.
- HASHIN Z. et SHTRIKMAN S. A variational approach to the theory of the elastic behaviour of multiphase materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **11** (1963) pages 127–140.
- HAZANOV S. et AMIEUR M. On overall properties of elastic heterogeneous bodies smaller than the representative volume. *International Journal of Engineering Science* **33** (1995) pages 1289–1301.
- HAZANOV S. et HUET C. Order relationships for boundary conditions effect in heterogeneous bodies smaller than the representative volume. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **42** (1994) pages 1995–2011.
- HERVÉ E. Thermal and thermoelastic behaviour of multiply coated inclusion-reinforced composites. *International Journal of Solids and Structures* **39** (2002) pages 1041–1058.
- HERVÉ E. et ZAOUI A. N-layered inclusion-based micromechanical modelling. *International Journal of Engineering Science* **31** (1993) pages 1–10.
- HILL R. Continuum micro-mechanics of elastoplastic polycrystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **13** (1965) pages 89–101.

- HINRICHSEN E.L., FEDER J. et JØSSANG T. Geometry of random sequential adsorption. *Journal of Statistical Physics* **44** (1986) pages 793–827.
- HINRICHSEN E.L., FEDER J. et JØSSANG T. Random packing of disks in two dimensions. *Physical Review A* **41** (1990) pages 4199–4209.
- HUTCHINSON J.W. Elastic-plastic behaviour of polycrystalline metals and composites. *Proceeding of the Royal Society A* **319** (1976) pages 247–272.
- JEAN A. Étude d'un élastomère chargé, de la nanostructure au macro-comportement. Thèse de doctorat, École Nationale Supérieure des Mines de Paris (2009).
- JEULIN D. *Morphology of Condensed Matter*, chapter Spatial statistics and micromechanics of materials. Springer, Netherlands (2002), pages 3–36.
- JORDEY W.S. et TORY E.M. Computer simulation of close random packing of equal spheres. *Physical review A* **32** (1985) pages 2347–2351.
- KANIT T., FOREST S., GALLIET I., MOUNOURY V. et JEULIN D. Determination of the size of the representative volume element for random composites : statistical and numerical approach. *International Journal of Solids and Structures* **40** (2003) pages 3647–3679.
- KARAKOÇ A. et FREUND J. Failure initiation statistics on wood-like cellular structures. In *IV European Conference on Computational Mechanics, France* (2010).
- KARI S., BERGER H., RODRIGUEZ-RAMOS R. et GABBERT U. Computational evaluation of effective material properties of composites reinforced by randomly distributed spherical particles. *Composite Structures* **77** (2007) pages 223–231.
- LEJEAIL Y. Étude du dimensionnement thermomécanique de structures en céramique. Application avec le code Cast3M à des blocs combustibles en graphite dans un cœur HTGR. Note technique CEA/DEN/CAD/DER/SESI/LCSI/NT DO 32 22/10/04, CEA (2004).
- LIPPMANN N., STEINKOPFF T., SCHMAUDER S. et GUMBSCH P. 3D-finite-element-modelling of microstructures with the method of multiphase elements. *Computational Materials Science* **9** (1997) pages 28–35.
- LORENSEN W. et CLINE H. Marching cubes : a high resolution 3d surface reconstruction algorithm. In *SIGGRAPH* (1987), pages 163–169.
- LUBACHEVSKY B.D. et STILLINGER F.H. Geometric properties of random disk packings. *Journal of Statistical Physics* **60** (1990) pages 561–583.
- LUBACHEVSKY B.D., STILLINGER F.H. et PINSON E.N. Disks vs. spheres : contrasting properties of random packings. *Journal of Statistical Physics* **64** (1991) pages 501–524.
- MASSON R., BORNERT M., SUQUET P. et ZAOUÏ A. An affine formulation for the prediction of the effective properties of nonlinear composites and polycrystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **48** (2000) pages 1203–1227.
- MICHEL J.C., GALVANETTO U. et SUQUET P. *Continuum Thermomechanics*, volume 76, chapter Constitutive relations involving internal variables based on a micromechanical analysis. Springer, Netherlands (2000), pages 301–312.

- MICHEL J.C. et SUQUET P. Nonuniform transformation field analysis. *International Journal of Solids and Structures* **40** (2003) pages 6937–6955.
- MISHNAEVSKY L. Three-dimensional numerical testing of microstructures of particle reinforced composites. *Acta Materialia* **52** (2004) pages 4177–4188.
- MOËS N., CLOIREC M., CARTRAUD P. et REMACLE J.F. A computational approach to handle complex microstructure geometries. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* **192** (2003) pages 3163–3177.
- MOËS N., DOLBOW J. et BELYTSCHKO T. A finite element method for crack growth without remeshing. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* **46** (1999) pages 131–150.
- MORI T. et TANAKA K. Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions. *Acta Metallurgica* **21** (1973) pages 571–574.
- MURA T. *Micromechanics of Defects in Solids (second edition)*. Martinus Nijhoff, Netherlands (1987).
- ÖZDEMİR I., BREKELMANS W.A.M. et GEERS M.G.D. Computational homogenization for heat conduction in heterogeneous solids. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* **73** (2008) pages 185–204.
- PASCAL S. Approche par changement d'échelles du comportement thermomécanique de combustibles à particules. Rapport CEA/DEN/SAC/DM2S/SEMT/LM2S/RT/05-008/A, CEA (2005).
- PASCAL S. Étude thermomécanique d'un réacteur spatial. Rapport CEA/DEN/SAC/DM2S/SEMT/LM2S/RT/06-009/A, CEA (2006).
- PASCAL S. Étude thermomécanique du réacteur nucléaire d'OPUS : rapport d'avancement 2007. Rapport CEA/DEN/SAC/DM2S/SEMT/LM2S/RT/07-031/A, CEA (2007).
- PASCAL S. Étude thermomécanique du réacteur nucléaire d'OPUS : une solution innovante pour le combustible de la version 500 kWe. Rapport CEA/DEN/SAC/DM2S/SEMT/LM2S/RT/08-025/A, CEA (2008).
- PELLETIER M. et MARTIN D. HTR-F Project : selection of properties and models for the coated particle : Fuel kernel. Note technique CEA/DEN/CAD/DEC/SESC/LSC/NT/03-029, CEA (2003).
- PELLETIER M., NABIELEK H., ABRAM T. et MARTIN D. HTR-F Project : selection of properties and models for the coated particle - PyC and SiC. Note technique CEA/DEN/CAD/DEC/SESC/LSC/NT/03-028, CEA (2003).
- PETTI D., BUONGIORNO J., MAKI J., HOBBS R. et MILLER G. Key differences in the fabrication, irradiation and high temperature accident testing of US and German TRISO-coated particle fuel, and their implications on fuel performance. *Nuclear Engineering and Design* **222** (2003) pages 281–297.

- PIERARD O., LLORCA J., SEGURADO J. et DOGHRI I. Micromechanics of particle-reinforced elasto-viscoplastic composites : Finite element simulations versus affine homogenization. *International Journal of Plasticity* **23** (2007) pages 1041–1060.
- PILVIN P. Une approche inverse pour l'identification d'un modèle polycristallin élastoviscoplastique. In *3^e Colloque National en Calculs des Structures, Giens*. Presses Académiques de l'Ouest (1997), pages 207–212.
- POTTIER T. Modélisation multiéchelle du comportement et de l'endommagement de composites à matrice métallique. Thèse de doctorat, École Nationale Supérieure des Ponts et Chaussées (1998).
- QI B. Simulation numérique du comportement mécanique de composites à particules. Rapport de stage de master 2, École Centrale Paris, CEA (2006).
- RINTOUL M.D. et TORQUATO S. Reconstruction of the structure of dispersions. *Journal of Colloid and Interface Science* **186** (1997) pages 467–476.
- RÉNYI A. On a one-dimensional problem concerning random space filling. *Publications of Mathematical Institute of Hungarian Academy of Sciences* **3** (1958) pages 109–127.
- ROUSSETTE S. Analyse par champs de transformation de matériaux élastoviscoplastiques multiphasés - application aux combustibles mox. Thèse de doctorat, Université de la Méditerranée Aix-Marseille II (2005).
- SAUERLAND H. et FRIES T.P. Free-surface flows with the X-FEM : a comparison with interface tracking in the classical FEM. In *XFEM 2009, Proceedings of the International Conference on Extended Finite Element Methods - Recent Developments and Applications* (2009), pages 187–190.
- SEGURADO J., GONZALEZ C. et LLORCA J. A numerical investigation of the effect of particle clustering on the mechanical properties of composite. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **51** (2003) pages 2355–2369.
- SEGURADO J. et LLORCA J. A numerical approximation to the elastic properties of sphere-reinforced composites. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **50** (2002) pages 2107–2121.
- SEGURADO J. et LLORCA J. A new three-dimensional interface finite element to simulate fracture in composites. *International Journal of Solids and Structures* **41** (2004) pages 2977–2993.
- SEGURADO J. et LLORCA J. A computational micromechanics study of the effect of interface decohesion on the mechanical behavior of composites. *Acta Materialia* **53** (2005) pages 4931–4942.
- SEGURADO J. et LLORCA J. Computational micromechanics of composites : The effect of particle spatial distribution. *Mechanics of Materials* **38** (2006) pages 873–883.
- SHERWOOD J.D. Packing of spheroids in three-dimensional space by random sequential addition. *Journal of Physics A : Mathematical and General* **30** (1997) pages L839–L843.

- STEINKOPFF T. Rezoning scheme for the simulation of discrete void formation in coarse two-phase materials. *Computational Materials Science* **1** (1993) pages 289–296.
- STEINKOPFF T. et SAUTTER M. 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** (1995a) pages 10–14.
- STEINKOPFF T. et SAUTTER M. 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** (1995b) pages 15–22.
- STOLZ C. et ZAOUI A. Analyse morphologique et approches variationnelles du comportement d'un milieu élastique hétérogène. *Comptes rendus de l'Académie des Sciences* **312** (1991) pages 143–150.
- TANEMURA M. On random complete packing by discs. *Annals of the Institute of Statistical Mathematics* **31B** (1979) pages 351–365.
- TANEMURA M. On random complete parking of spheres in 2D and 3D spaces. In *Proceedings of the International Roundtable Congress. 50-th Anniversary of Japan Statistical Society* (1981), pages 216–229.
- TANEMURA M. On the density of strict random complete parking by discs : research memorandum. *The Institute of Statistical Mathematics* **339** (1988a) pages 1–24.
- TANEMURA M. Random packing and random tessellation in relation to the dimension of space. *Journal of Microscopy* **151** (1988b) pages 247–255.
- TANEMURA M. et HASEGAWA M. Geometrical models of territory I. Models for synchronous and asynchronous settlement of territories. *Journal of Theoretical Biology* **82** (1980) pages 477–496.
- TORQUATO S. Random heterogeneous media : microstructure and improved bounds on effective properties. *Applied Mechanics Reviews* **44** (1991) pages 37–76.
- TORQUATO S. Effective stiffness tensor of composite media : I. Exact series expansions. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **45** (1997) pages 1421–1448.
- TORQUATO S. Effective stiffness tensor of composite media : II. Application to isotropic dispersions. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **46** (1998) pages 1411–1440.
- TORQUATO S. *Random Heterogeneous Materials - Microstructure and Macroscopic Properties*. Springer (2002).
- VISSCHER W.M. et BOLSTERLI M. Random packing of equal and unequal spheres in two and three dimensions. *Nature* **239** (1972) pages 504–507.
- WIDOM B. Random sequential addition of hard spheres to a volume. *The Journal of Chemical Physics* **44** (1966) pages 3888–3894.
- ZAOUI A. Matériaux hétérogènes et composites (2000). Cours de l'École Polytechnique, Ma-jeu-re 1, option « matériaux et structures ».

ZAOUI A. et MASSON R. Micromechanics-based modeling of plastic polycrystals : an affine formulation. *Material Science and Engineering A* **285** (2000) pages 418–424.

Annexe A

Modèles de changement d'échelles en mécanique non linéaire

A.1 Modèle de Kröner

KRÖNER a étendu le schéma auto-cohérent à l'élasto-plasticité pour décrire le comportement des polycristaux (BORNERT *et al.*, 2001b). L'idée est de supposer que chaque famille de grains de même orientation cristalline se comporte comme une inclusion ellipsoïdale, uniformément plastifiée ($\underline{\underline{\varepsilon}}_i^p$), plongée dans une matrice infinie, également uniformément plastifiée ($\underline{\underline{E}}^p$), possédant les propriétés du MHE. La résolution du schéma auto-cohérent conduit à la loi de localisation suivante :

$$\underline{\underline{\sigma}}_i - \underline{\underline{\Sigma}} = -\mathbb{C} : (\mathbb{I} - \mathbb{S}^E) (\underline{\underline{\varepsilon}}_i^p - \underline{\underline{E}}^p). \quad (\text{A.1})$$

Si les inclusions sont considérées sphériques, l'expression précédente se ramène à :

$$\underline{\underline{\sigma}}_i - \underline{\underline{\Sigma}} = -2\mu(1 - \beta) (\underline{\underline{\varepsilon}}_i^p - \underline{\underline{E}}^p), \quad (\text{A.2})$$

où $\beta = \frac{2(4-5\nu)}{15(1-\nu)}$ et où μ est le module de cisaillement isotrope. Ce modèle s'avère trop raide car il suppose que l'accommodation des déformations entre la matrice et l'inclusion se fait de manière purement élastique.

A.2 Formulation incrémentale de Hill

HILL (1965) propose de résoudre le problème posé par le modèle de KRÖNER en utilisant une linéarisation incrémentale de la loi d'écoulement dans le cas de l'élasto-plasticité :

$$\underline{\underline{\dot{\sigma}}}_i = \mathbb{L}_i : \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}_i, \quad (\text{A.3})$$

où \mathbb{L}_i est le module tangent (supposé uniforme) de la phase i correspondant à l'état de déformation moyen $\underline{\underline{\varepsilon}}_i$. Il s'agit d'une loi « multi-branche », dont l'expression dépend de l'état actuel du matériau, ainsi que du type de chargement (deux expressions différentes en charge ou en décharge plastique). Cependant, chaque branche est linéarisable selon cette formulation incrémentale. On se ramène ainsi à un problème d'homogénéisation linéaire incrémental : sa résolution se fait pas à pas, l'état mécanique local étant connu au début de chaque pas et sa résolution sur un pas se faisant comme pour un problème d'homogénéisation linéaire (BORNERT *et al.*, 2001b). Pour une vitesse de déformation macroscopique $\underline{\underline{\dot{E}}}^0$ imposée, la vitesse de

déformation locale est obtenue par la relation de localisation :

$$\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}_i = \mathbb{A}_i : \underline{\underline{\dot{E}}}^0. \quad (\text{A.4})$$

La vitesse de contrainte macroscopique est alors définie par :

$$\underline{\underline{\dot{\Sigma}}} = \langle \underline{\underline{\dot{\sigma}}}_i \rangle = \langle \mathbb{L}_i : \mathbb{A}_i \rangle : \underline{\underline{\dot{E}}}^0 = \mathbb{L}^{\text{eff}} : \underline{\underline{\dot{E}}}^0, \quad (\text{A.5})$$

où \mathbb{L}^{eff} est le module tangent effectif. La résolution du problème auto-cohérent de KRÖNER par l'approche incrémentale de HILL aboutit à la loi de localisation suivante, qui fournit une meilleure estimation de l'accommodation plastique :

$$\underline{\underline{\dot{\sigma}}}_i - \underline{\underline{\dot{\Sigma}}} = -\mathbb{L}^* : \left(\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}_i - \underline{\underline{\dot{E}}}^p \right), \quad (\text{A.6})$$

avec $\mathbb{L}^* = \mathbb{L}^{\text{eff}} : \left((\mathbb{S}^E)^{-1} - \mathbb{I} \right)$, le tenseur de HILL.

A.3 Formulation sécante

HUTCHINSON (1976) a étendu la formulation incrémentale de HILL au cas de la viscoplasticité des polycristaux. En choisissant un comportement en loi puissance pour le monocristal et un schéma d'homogénéisation linéaire auto-cohérent, HUTCHINSON montre que la mise en œuvre de la formulation incrémentale mène au même résultat que celle d'une formulation sécante (BORNERT *et al.*, 2001b).

BERVEILLER et ZAOUÏ (1979) proposent une version simplifiée de l'approche de HILL dans le cas d'un chargement radial et monotone et pour un comportement macroscopique isotrope. Comme dans le modèle de KRÖNER, on considère que chaque grain i peut être modélisé par une inclusion sphérique, uniformément plastifiée ($\underline{\underline{\epsilon}}_i^p$), entourée d'un milieu infini, également uniformément plastifiée ($\underline{\underline{E}}^p$), possédant les propriétés du MHE et un comportement élasto-plastique de type HENCKY-MISES. La loi de localisation obtenue est semblable à celle de KRÖNER avec la présence d'un terme d'accommodation α :

$$\underline{\underline{\sigma}}_i - \underline{\underline{\Sigma}} = -2\mu(1 - \beta)\alpha \left(\underline{\underline{\epsilon}}_i^p - \underline{\underline{E}}^p \right), \quad (\text{A.7})$$

avec $\frac{1}{\alpha} = 1 + \frac{3}{2}\mu \frac{p(\underline{\underline{E}}^p)}{J_2(\underline{\underline{\Sigma}})}$, où $p(\underline{\underline{E}}^p) = \sqrt{\frac{2}{3}\underline{\underline{E}}^p : \underline{\underline{E}}^p}$ est la déformation plastique équivalente cumulée et $J_2(\underline{\underline{\Sigma}}) = \sqrt{\frac{3}{2}\underline{\underline{\Sigma}}^d : \underline{\underline{\Sigma}}^d}$, $\underline{\underline{\Sigma}}^d$ étant la partie déviatorique de $\underline{\underline{\Sigma}}$.

Le coefficient α décroît progressivement de 1 vers 0 lorsque la déformation plastique équivalente cumulée croît. Ainsi, la contrainte a tendance à s'homogénéiser à mesure que la déformation macroscopique augmente. La formulation sécante présente l'intérêt de simplifier la résolution du problème d'homogénéisation : elle permet d'estimer directement la réponse globale à une sollicitation macroscopique donnée sans passer par un traitement pas à pas. Cependant, contrairement à la formulation incrémentale (où les états locaux et globaux avant chaque pas sont connus), elle nécessite de déterminer les champs mécaniques locaux qui sont solutions d'un système d'équations implicites. La résolution requiert donc, tout de même, une procédure numérique pour le calcul des champs locaux (BORNERT *et al.*, 2001b).

A.4 Loi en β

On citera également une méthode dérivée de celle de BERVEILLER et ZAOUI (1979), intitulée « loi en β » (CAILLETAUD et PILVIN, 1994; PILVIN, 1997), où la contrainte $\underline{\underline{\sigma}}_i$ est proportionnelle, non plus à la une différence entre déformations plastiques microscopiques et macroscopiques, mais à celle entre deux variables d'accommodation, notées $\underline{\underline{\beta}}_i$ et $\underline{\underline{\beta}}$, qui évoluent de façon non linéaire en fonction de la déformation plastique :

$$\underline{\underline{\sigma}}_i - \underline{\underline{\Sigma}} = -\mathbb{C} : (\mathbb{I} - \mathbb{S}^E) : (\underline{\underline{\beta}}_i - \underline{\underline{\beta}}), \quad (\text{A.8})$$

avec :

$$\underline{\underline{\beta}} = \sum_i c_i \underline{\underline{\beta}}_i, \quad (\text{A.9})$$

et où la loi d'évolution des variables $\underline{\underline{\beta}}_i$ est écrite de manière à retrouver le modèle de KRÖNER au début de l'écoulement plastique, puis à restituer une accommodation non-linéaire des déformations lorsque la plasticité se généralise au sein du matériau :

$$\dot{\underline{\underline{\beta}}}_i = \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}_i^p - Dp(\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}_i^p) (\underline{\underline{\beta}}_i - \delta \underline{\underline{\varepsilon}}_i^p). \quad (\text{A.10})$$

Dans le cas où l'on considère une distribution spatiale isotrope des familles de grains, le terme $\mathbb{C} : (\mathbb{I} - \mathbb{S}^E)$ de l'équation (A.8) devient $2\mu(1-\beta)$. Les paramètres D et δ peuvent être identifiés de manière à assurer un caractère auto-cohérent au schéma ou à partir de calculs d'agrégats polycristallins.

A.5 Formulation affine

Il est également possible de linéariser le comportement selon la méthode affine développée par MASSON *et al.* (2000); ZAOUI et MASSON (2000). Le comportement non linéaire de chaque phase i ($\underline{\underline{\sigma}}_i = f_i(\underline{\underline{\varepsilon}}_i)$) est remplacé, pour une déformation de référence $\underline{\underline{\varepsilon}}_i^{(0)}$, par un comportement linéaire caractérisé par un tenseur des modules tangents $\mathbb{L}_i^{(0)}$ et une précontrainte $\underline{\underline{\tau}}_i^{(0)}$:

$$\underline{\underline{\sigma}}_i = \mathbb{L}_i^{(0)} : \underline{\underline{\varepsilon}}_i + \underline{\underline{\tau}}_i^{(0)}, \quad (\text{A.11})$$

avec : $\mathbb{L}_i^{(0)} = \frac{df_i}{d\underline{\underline{\varepsilon}}_i}(\underline{\underline{\varepsilon}}_i^{(0)})$, la matrice tangente pour la déformation de référence $\underline{\underline{\varepsilon}}_i^{(0)}$ et $\underline{\underline{\tau}}_i^{(0)} = f_i(\underline{\underline{\varepsilon}}_i^{(0)}) - \mathbb{L}_i^{(0)} : \underline{\underline{\varepsilon}}_i^{(0)}$ l'ordonnée à l'origine correspondante.

Le problème peut donc être traité par analogie à un problème thermo-élastique linéaire où la précontrainte $\underline{\underline{\tau}}_i^{(0)}$ peut être identifié au terme $-\underline{\underline{\kappa}}_i \Delta T_i$ de la contrainte d'origine thermique (II.67). Le comportement macroscopique s'exprime alors selon l'équation suivante :

$$\underline{\underline{\Sigma}} = \mathbb{L}^{(0)\text{hom}} : \underline{\underline{E}} + \underline{\underline{T}}^{(0)}, \quad (\text{A.12})$$

avec : $\mathbb{L}^{(0)\text{hom}} = \langle \mathbb{L}_i^{(0)} : \mathbb{A}_i^{(0)} \rangle_V$ et $\underline{\underline{T}}^{(0)} = \langle \underline{\underline{\tau}}_i^{(0)} : \mathbb{A}_i^{(0)} \rangle_V$.

Chaque milieu non linéaire peut donc être remplacé par un milieu thermo-élastique de comparaison. Il est alors possible d'utiliser une méthode d'homogénéisation de l'élasticité pour obtenir le comportement effectif et les tenseurs de localisation $\mathbb{A}_i^{(0)}$ (pour la déformation de

référence $\underline{\underline{\varepsilon}}_i^{(0)}$). Cependant, comme en thermo-élasticité, il est nécessaire d'affecter des caractéristiques uniformes à chaque phase et de raisonner sur les valeurs moyennes des champs locaux par phase. L'inconvénient des approches à champs moyens apparaît dans le cas où les champs locaux présentent une forte hétérogénéité au sein d'une même phase.

Annexe B

Validation de la procédure de calcul de la covariance dans Cast3M

Afin d'estimer numériquement la covariance d'un ensemble géométrique dans le code de calcul CAST3M, nous avons développé une procédure Gibiane @COVAR. Cette procédure calcule la covariance $C(\underline{r})$ d'un maillage 2D ou 3D en estimant la mesure de l'intersection du maillage initial avec le même maillage translaté de \underline{r} . Cette mesure d'intersection de maillages peut être estimée par deux méthodes au choix de l'utilisateur :

- option 'PROI' : on crée un champ par éléments unitaire dans le maillage translaté, puis ce champ est projeté sur le maillage initial avec l'opérateur 'PROI'. On mesure alors l'intégrale du nouveau champ obtenu avec l'opérateur 'INTG'.
- option 'INCL' : on calcule le maillage commun au maillage initial et celui translaté avec l'opérateur 'INCL' (option 'BARY'), puis on mesure le volume de ce maillage commun avec l'opérateur 'MESU'.

L'estimation de la covariance fournie par la procédure @COVAR est comparée à des résultats analytiques : la covariance d'un réseau périodique de disques (en 2D) et de sphères (en 3D) où les centres sont distants de deux fois leur diamètre. Les maillages utilisés pour ce test sont présentés sur la figure B.1. La mesure de l'intersection de deux disques ou de deux sphères de diamètre D et dont les centres sont distants de h est donnée par :

- Disques : $S(h) = \frac{1}{2}D^2 \arccos\left(\frac{h}{D}\right) - \frac{1}{2}h\sqrt{D^2 - h^2}$;
- Sphères : $V(h) = \frac{\pi}{12}(2D + h)(D - h)^2$.

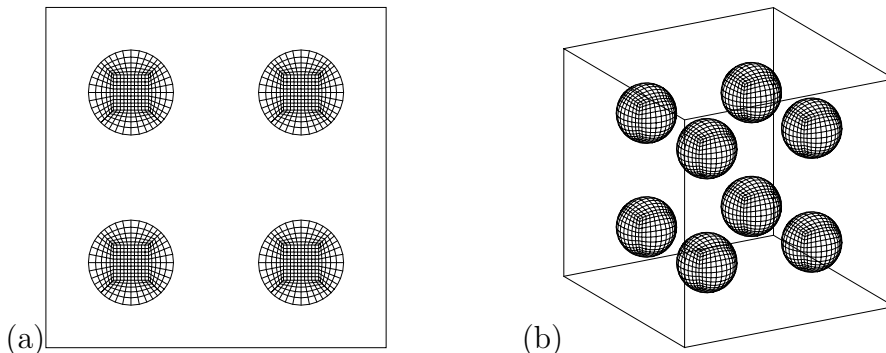
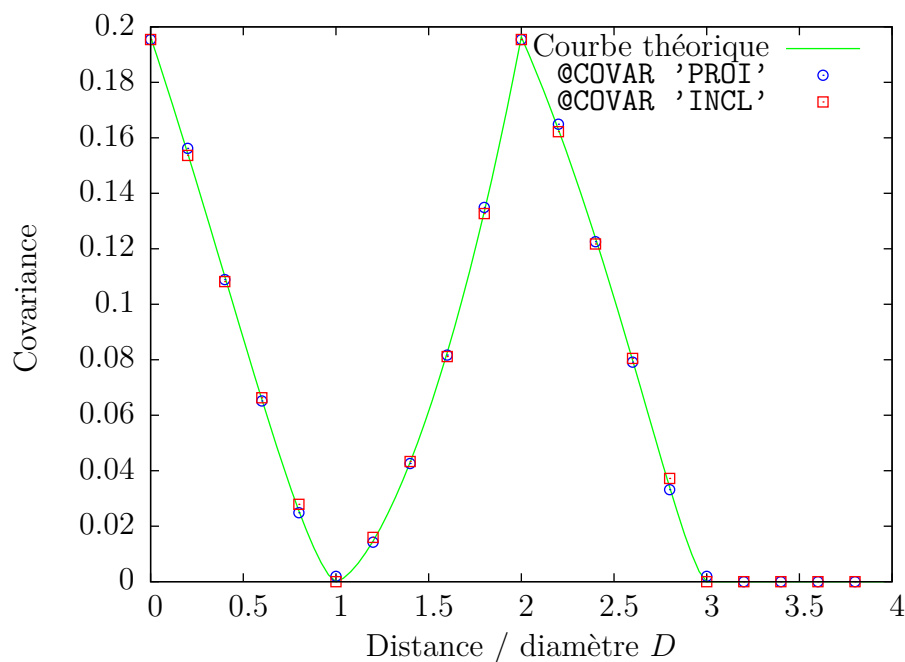
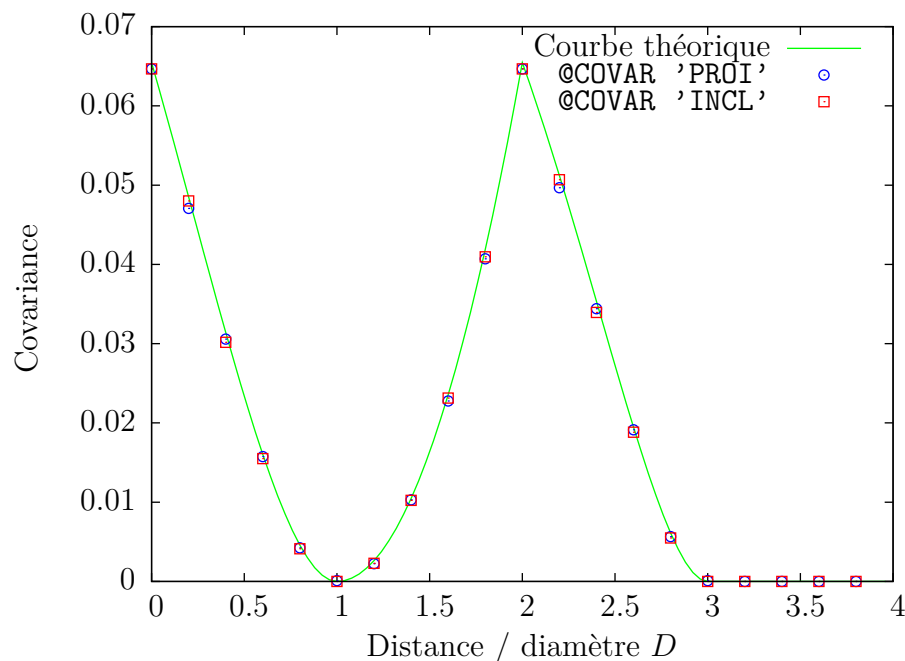


FIG. B.1 – Maillages d'un réseau périodique de particules en 2D (a) et en 3D (b).

La mesure de cette intersection permet de calculer la valeur du covariogramme, puis celle de la covariance, en rapportant cette première à l'intersection du cadre de mesure et du cadre de mesure translaté. La figures B.2 présentent les courbes de covariance obtenues par la procédure @COVAR, comparées aux courbes analytiques. On peut constater que l'estimation fournie par la procédure @COVAR est correcte.



(a)



(b)

FIG. B.2 – Test de la procédure @COVAR en 2D (a) et en 3D (b).

Annexe C

Application des conditions aux limites périodiques avec Cast3M

L'utilisation des conditions aux limites périodiques (CLP) dans un calcul par éléments finis nécessite que le maillage soit périodique afin d'appliquer des relations cinématiques sur les points homologues de deux faces opposées. Nous détaillons comment appliquer des CLP sur un maillage avec le code de calcul CAST3M, ainsi que sur un maillage non périodisé.

C.1 Généralités et cas du maillage périodique

Les CLP (II.1.3) sont formulées en appliquant sur le bord du volume ∂V un champ de déplacement \underline{u} de la forme :

$$\underline{u}(\underline{x}) = \underline{E}^0 \cdot \underline{x} + \underline{u}'(\underline{x}) \quad \forall \underline{x} \in \partial V, \quad (\text{C.1})$$

où \underline{E}^0 est une déformation macroscopique homogène et $\underline{u}'(\underline{x})$ est un champ de déplacement périodique, de période égale à l'arête du cube. Ainsi, en notant \underline{L} le vecteur de périodicité de la géométrie et \underline{x}_1 et \underline{x}_2 deux points homologues de ∂V (c'est-à-dire $\underline{x}_2 = \underline{x}_1 + \underline{L}$), on établit la relation :

$$\begin{aligned} \underline{u}(\underline{x}_2) - \underline{u}(\underline{x}_1) &= \underline{E}^0 \cdot (\underline{x}_2 - \underline{x}_1) + \underbrace{(\underline{u}'(\underline{x}_2) - \underline{u}'(\underline{x}_1))}_{=0} \\ &= \underline{E}^0 \cdot \underline{L}. \end{aligned} \quad (\text{C.2})$$

Les CLP sont donc appliquées en imposant le déplacement relatif de deux points homologues de ∂V . Dans le code de calcul CAST3M, ceci est fait à l'aide de l'opérateur 'RELA', qui sert à imposer des relations linéaires entre les degrés de libertés des nœuds de maillages. Prenons l'exemple de deux faces opposées F1 et F2 séparées par le vecteur de périodicité $\underline{L} = L\underline{e}_x$ (cf. figure C.1).

Les commandes suivantes permettent de calculer les rigidités associées aux relations entre les déplacements des nœuds des faces opposées, ici le déplacement relatif des deux faces :

```
RIG1      = 'RELA' 'UX' F2 - 'UX' F1 ;
RIG2      = 'RELA' 'UY' F2 - 'UY' F1 ;
RIG3      = 'RELA' 'UZ' F2 - 'UZ' F1 ;
```

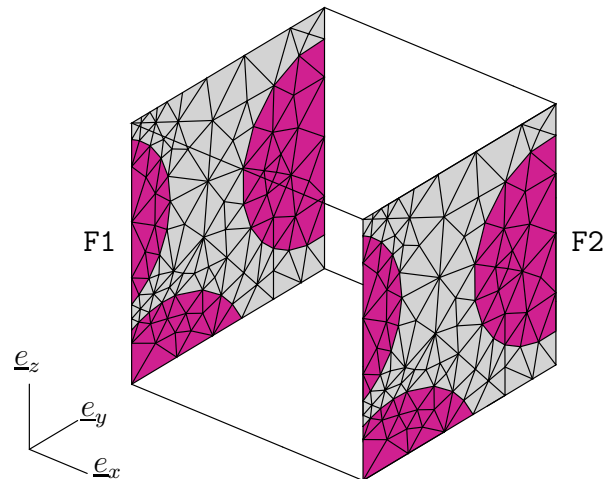


FIG. C.1 – Maillage périodisé.

L'amplitude de ce déplacement est imposée grâce à l'opérateur 'DEPI' :

```
DEP1      = 'DEPI' RIG1 (EO_XX * L) ;
DEP2      = 'DEPI' RIG2 0. ;
DEP3      = 'DEPI' RIG3 0. ;
```

Il est également nécessaire de supprimer les mouvements de corps rigide de translation, nous choisissons de bloquer un sommet du cube.

C.2 Cas du maillage non périodique

Avec l'opérateur 'RELA', il n'est pas possible d'imposer des relations cinématiques entre les nœuds des deux faces d'un maillage non périodique. En revanche, il est possible de dupliquer les nœuds d'une face sur la face opposée et d'imposer des relations cinématiques entre cette dernière et les nœuds dupliqués. Il est alors facile d'imposer la périodicité des déplacements entre la face initiale et ses nœuds dupliqués, eux mêmes « asservis » aux déplacements de la face opposée.

Reprenons l'exemple précédent mais cette fois avec un maillage F2 différent de F1 (cf. figure C.2). La duplication de F1 se fait avec l'opérateur 'PLUS' :

```
F1BIS     = F1 'PLUS' (L 0. 0.) ;
```

L'asservissement du déplacement des nœuds de F1BIS, à ceux des éléments volumiques appuyés sur F2, se fait à l'aide de l'option 'ACCRO' de l'opérateur 'RELA' :

```
ELEM_F2  = MAIL_TOT 'ELEM' 'APPU' 'LARG' F2 ;
RIG0     = 'RELA' F1BIS 'ACCR' ELEM_F2 ;
```

où MAIL_TOT désigne le maillage du volume. Il ne reste plus qu'à écrire les relations périodiques entre les déplacements de F1 et F1BIS, comme dans le cas où le maillage est périodique :

```
RIG1     = 'RELA' 'UX' F1BIS - 'UX' F1 ;
RIG2     = 'RELA' 'UY' F1BIS - 'UY' F1 ;
RIG3     = 'RELA' 'UZ' F1BIS - 'UZ' F1 ;
```

C.2. CAS DU MAILLAGE NON PÉRIODIQUE

puis,

```
DEP1      = 'DEPI' RIG1 (E0_XX * L) ;  
DEP2      = 'DEPI' RIG2 0. ;  
DEP3      = 'DEPI' RIG3 0. ;
```

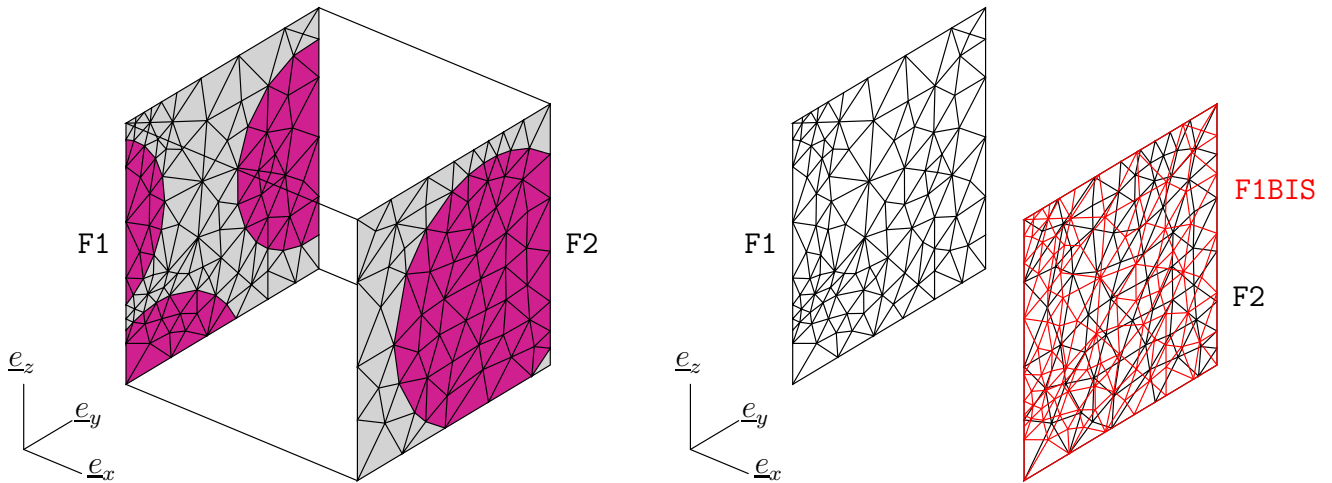


FIG. C.2 – Maillage non périodisé, accrochage de F1BIS dans F2.

La relation entre les déplacements des faces opposées est imposée sur **F1** et **F1BIS**. Le maillage **F1BIS** est asservi au déplacement de **F2**. Dans le cas où les maillages **F1** et **F2** diffèrent beaucoup, il convient d'accrocher la face la plus densément maillée dans la face la moins densément maillée. Le mouvement de corps rigide de translation peut être supprimé en encastrant un sommet du cube. Cette méthode peut également être adaptée pour appliquer des CLP en thermique.

La méthode a également été mise en œuvre par BLANC (2009) dans le cas de maillages non périodiques mais pour une géométrie périodique. Un exemple de calcul de microstructure soumise à des CLP en thermique montre un écart de température entre deux faces opposées inférieur à 1 % de la température moyenne.

Annexe D

Résultats complémentaires

D.1 Courbes de covariance

Les figures suivantes présentent les courbes de covariance dans les directions x , y et z pour des échantillons numériques de taille $3D$ à $8D$ possédant une fraction volumique de particules proche de 45 %.

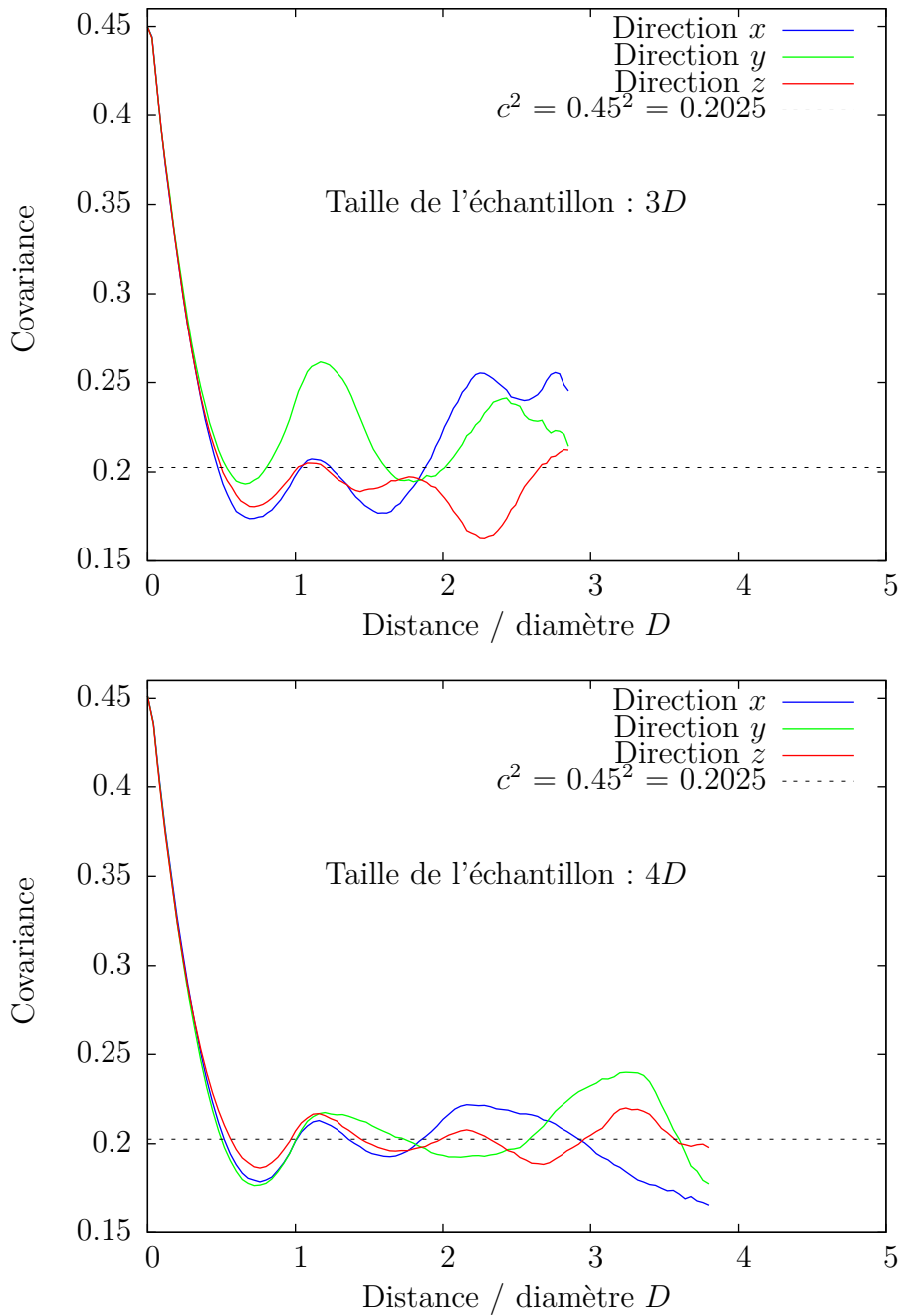


FIG. D.1 – Courbes de covariance dans les trois directions du cube d'échantillons numériques de taille $3D$ et $4D$.

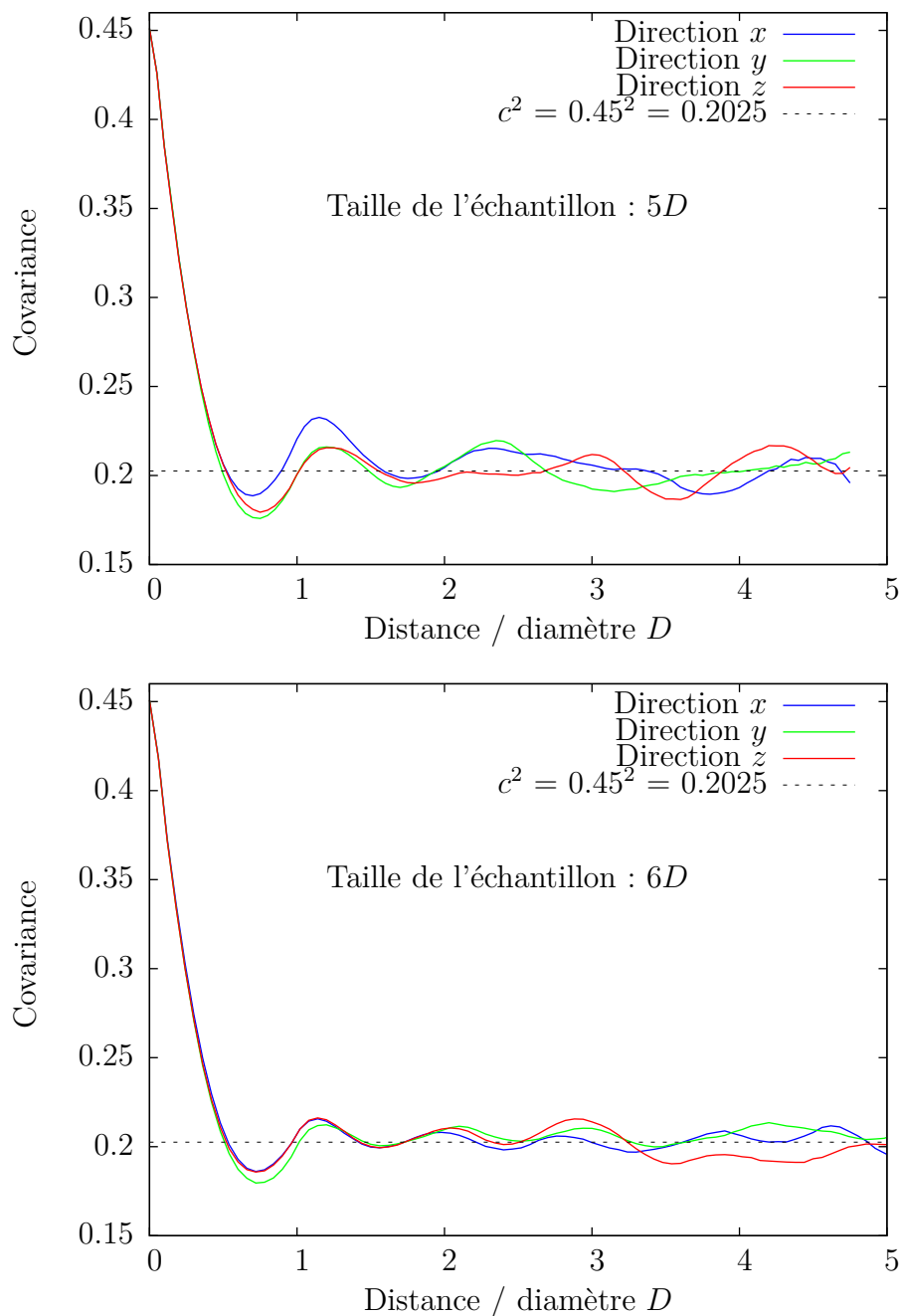


FIG. D.2 – Courbes de covariance dans les trois directions du cube d'échantillons numériques de taille $5D$ et $6D$.

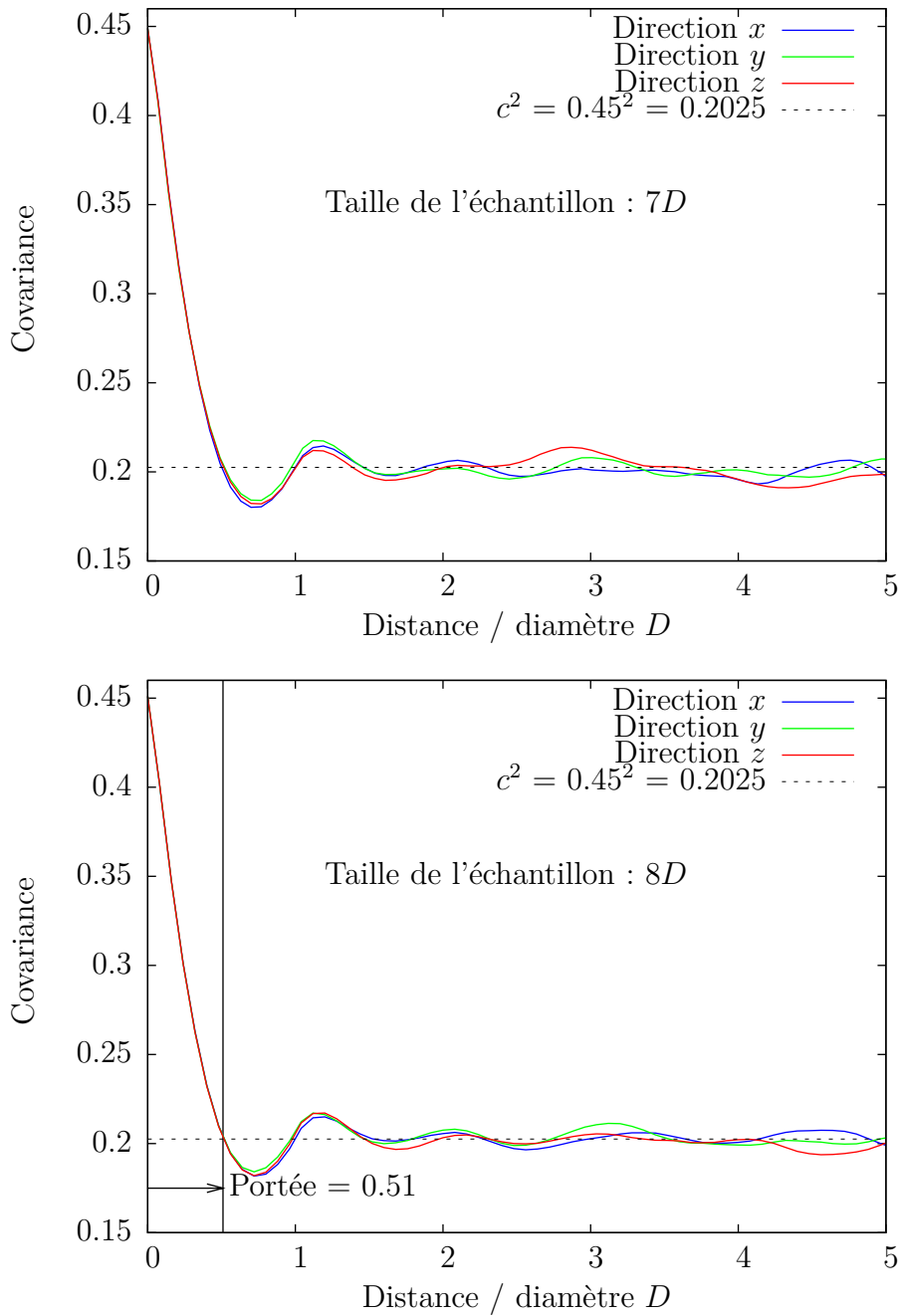


FIG. D.3 – Courbes de covariance dans les trois directions du cube d'échantillons numériques de taille $7D$ et $8D$.

D.2 Méthode d'érosion

Les figures D.4 et D.5 présentent la valeur absolue de la différence des champs de contrainte obtenus avec les CLDH et les CLCH dans le cas de chargements sphérique et de cisaillement pur appliqués à des échantillons numériques de taille $5D$ et $8D$.

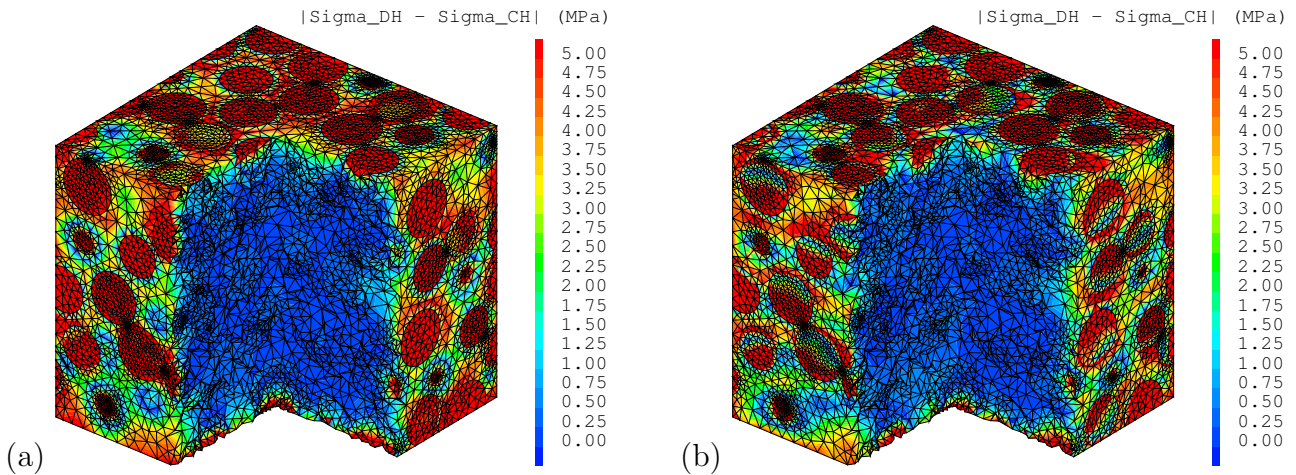


FIG. D.4 – Écarts entre les champs de contrainte obtenus en CLDH et CLCH pour un échantillon de taille $5D$. (a) Contrainte hydrostatique pour un chargement sphérique. (b) Contrainte de cisaillement xy pour un chargement en cisaillement xy (contrainte moyenne de 10 MPa).

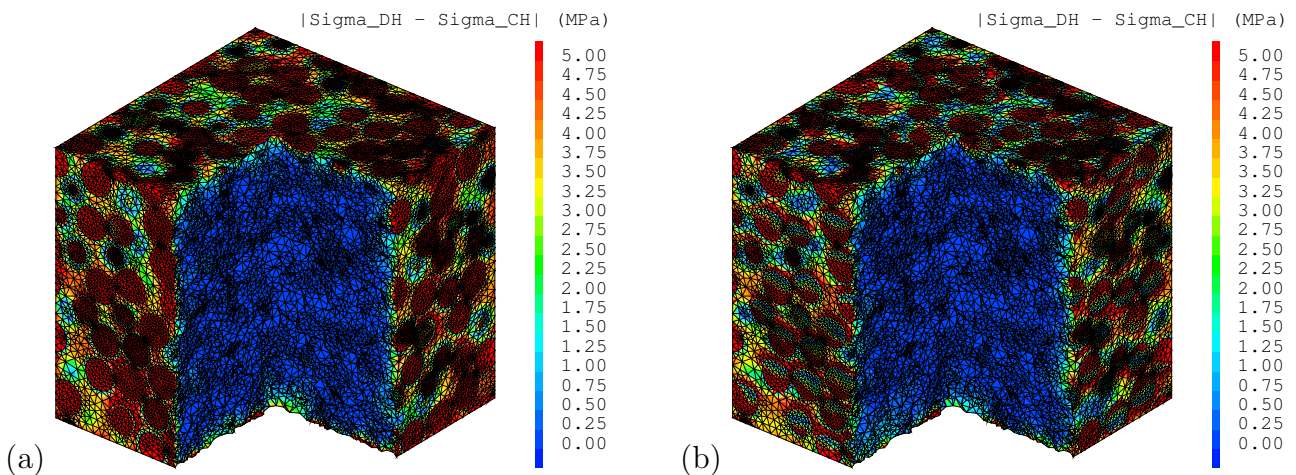


FIG. D.5 – Écarts entre les champs de contrainte obtenus en CLDH et CLCH pour un échantillon de taille $8D$. (a) Contrainte hydrostatique pour un chargement sphérique. (b) Contrainte de cisaillement xy pour un chargement en cisaillement xy (contrainte moyenne de 10 MPa).

Les figures D.6 à D.10, respectivement D.11 à D.15, présentent les distributions des contraintes dans la matrice d'un échantillon de taille $8D$ soumis à un chargement sphérique, respectivement déviatorique, à l'aide des CLDH et des CLCH. Ces distributions sont calculées pour différentes distances d'érosion d_e .

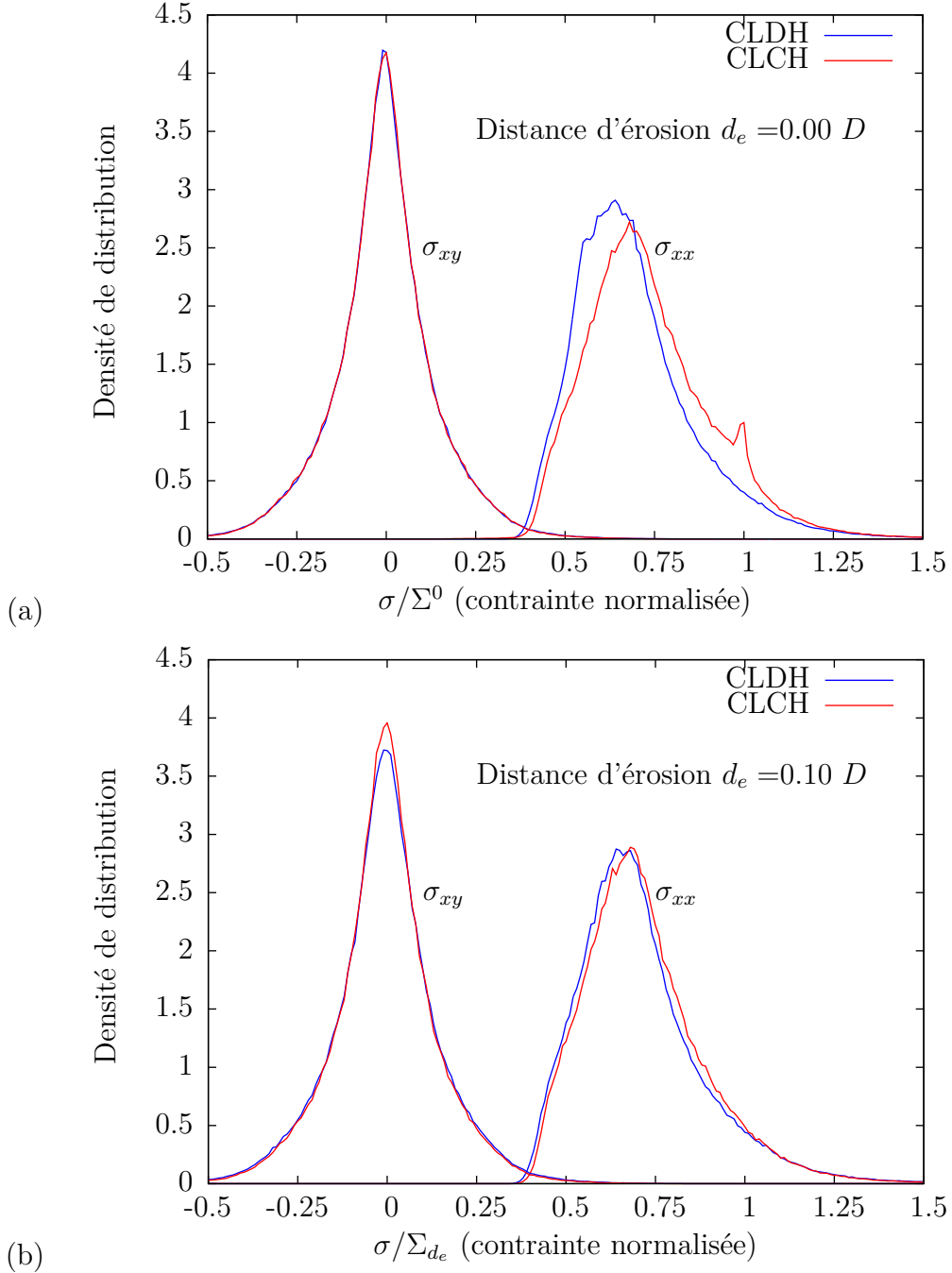


FIG. D.6 – Distribution des contraintes σ_{xx} et σ_{xy} dans la matrice, normalisée par rapport à la contrainte moyenne, calculées sur le maillage complet (a) et à partir de la solution érodée d'une distance $d_e = 0.1D$ (b). Chargement sphérique imposé avec les CLDH et les CLCH.

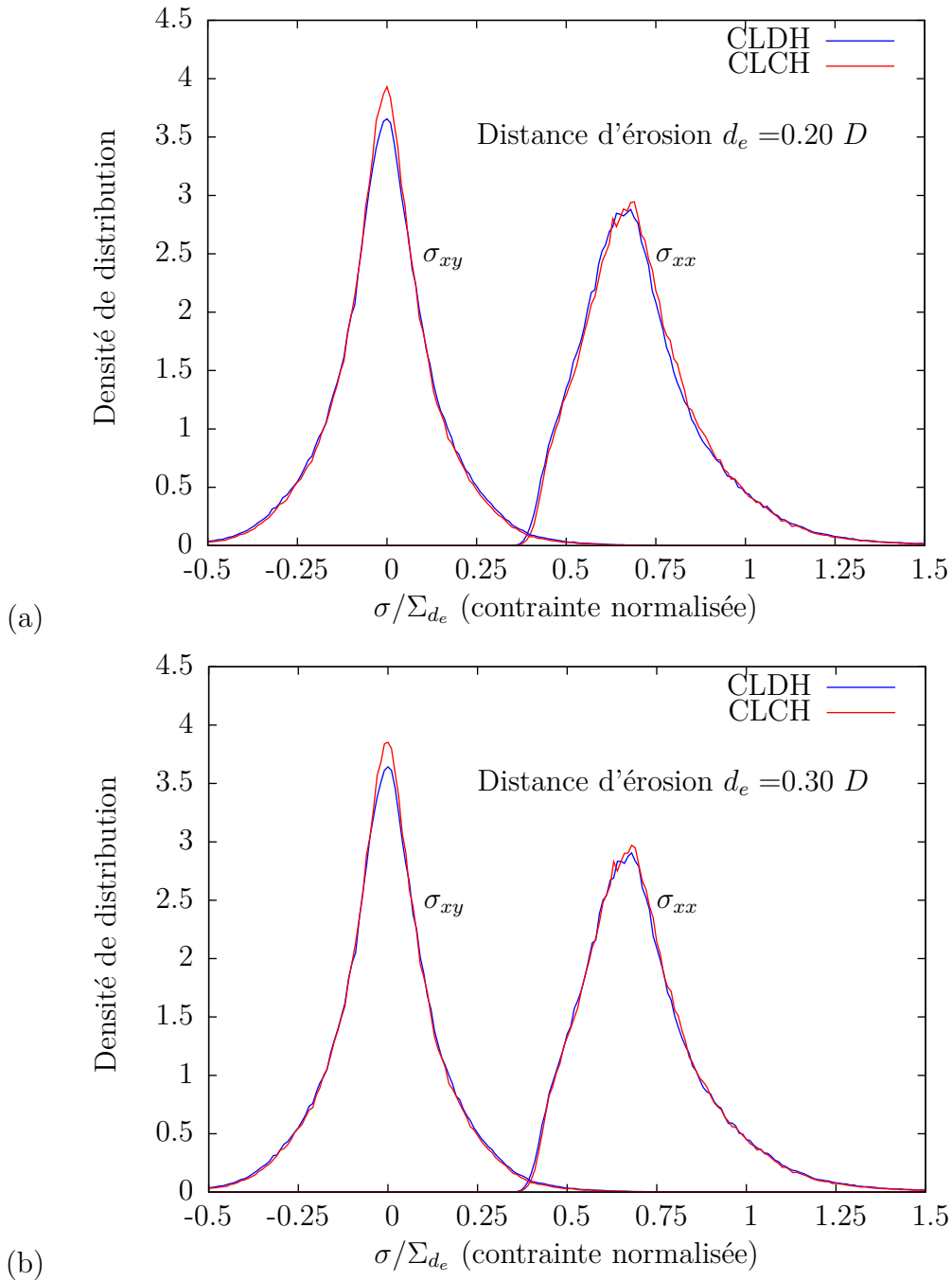


FIG. D.7 – Distribution des contraintes σ_{xx} et σ_{xy} dans la matrice, normalisée par rapport à la contrainte moyenne Σ_{d_e} , calculées à partir de la solution érodée d’une distance $d_e = 0.2D$ (a) et $d_e = 0.3D$ (b). Chargement sphérique imposé avec les CLDH et les CLCH.

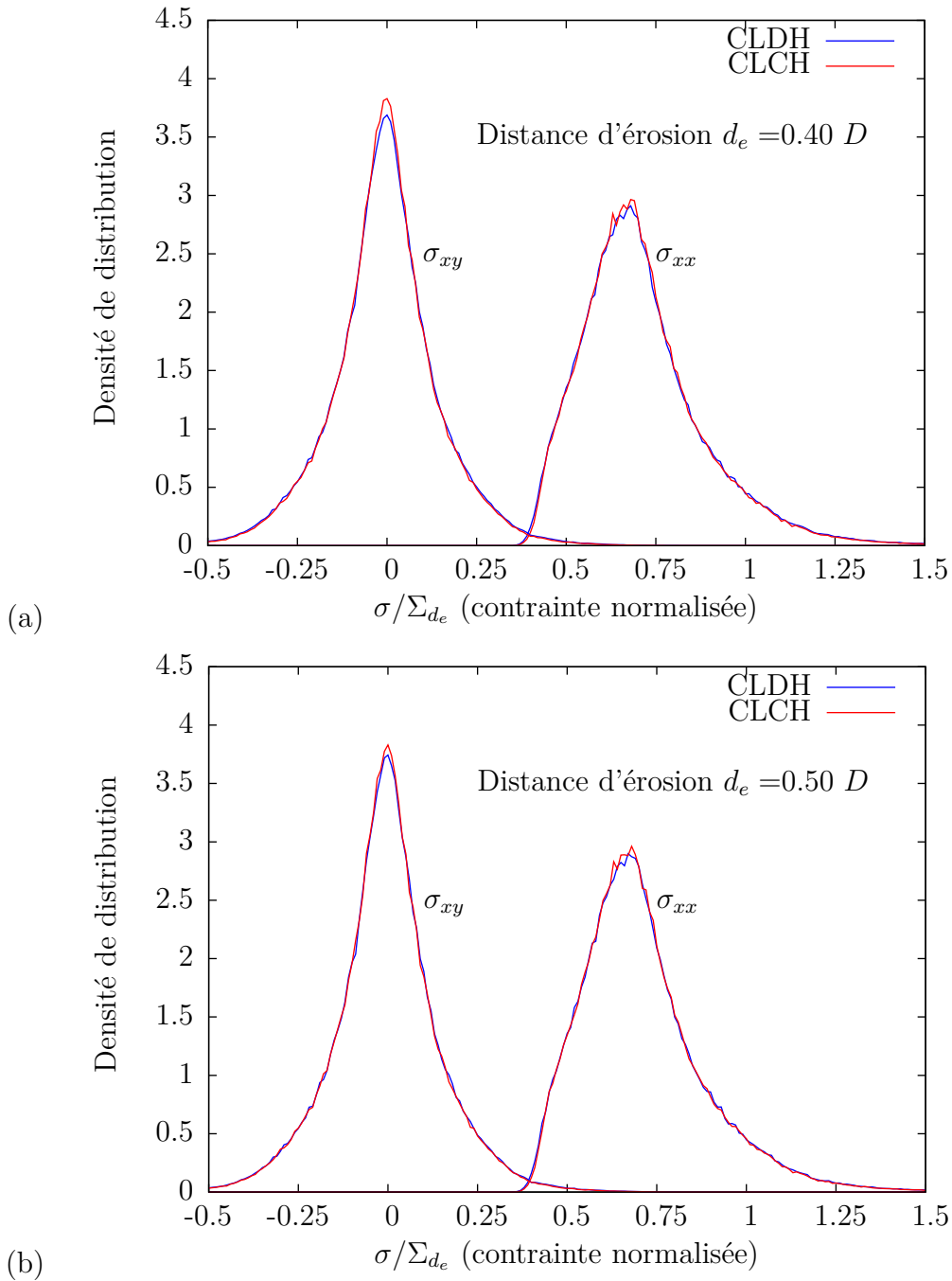


FIG. D.8 – Distribution des contraintes σ_{xx} et σ_{xy} dans la matrice, normalisée par rapport à la contrainte moyenne Σ_{d_e} , calculées à partir de la solution érodée d'une distance $d_e = 0.4D$ (a) et $d_e = 0.5D$ (b). Chargement sphérique imposé avec les CLDH et les CLCH.

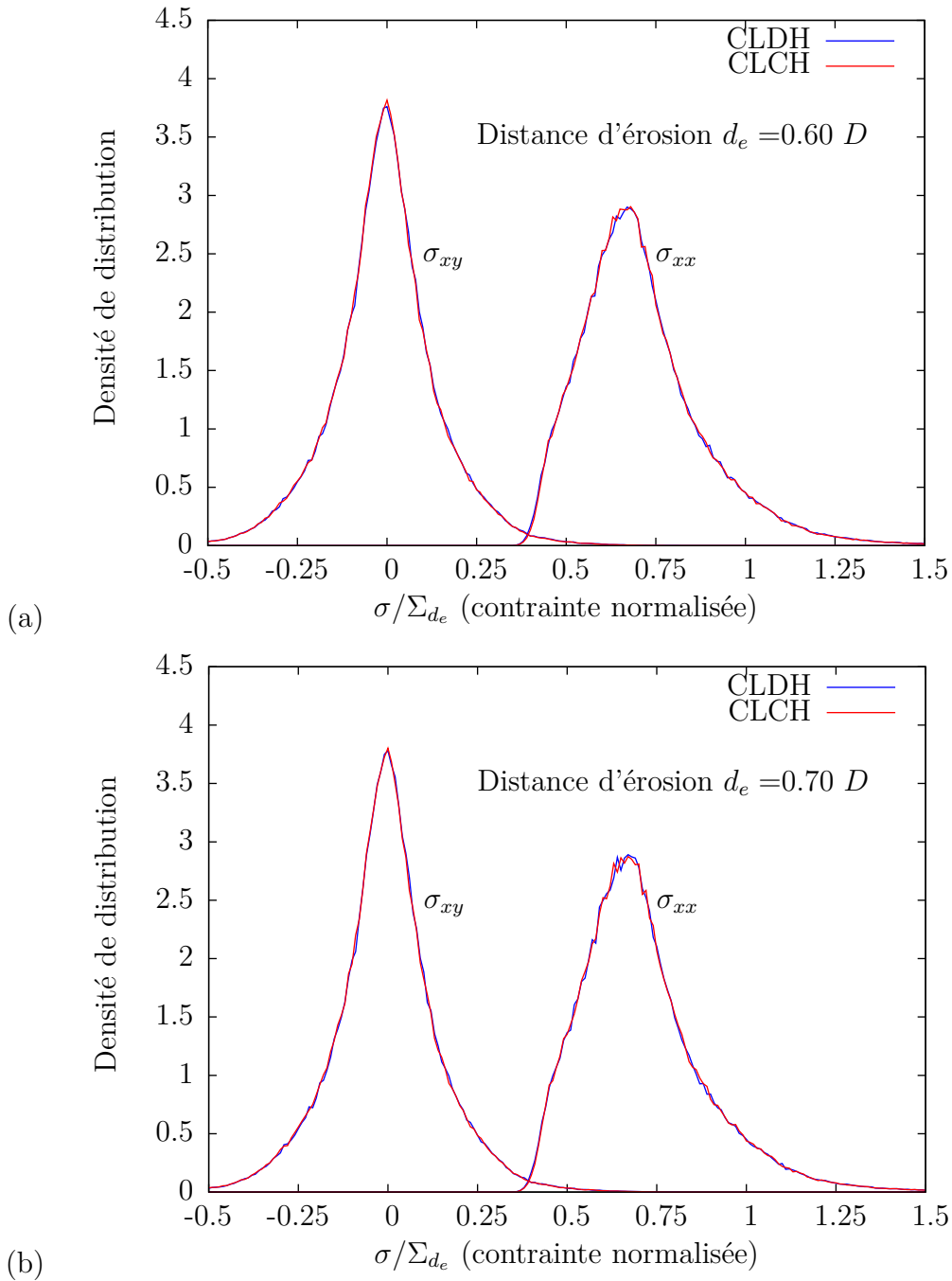


FIG. D.9 – Distribution des contraintes σ_{xx} et σ_{xy} dans la matrice, normalisée par rapport à la contrainte moyenne Σ_{d_e} , calculées à partir de la solution érodée d’une distance $d_e = 0.6D$ (a) et $d_e = 0.7D$ (b). Chargement sphérique imposé avec les CLDH et les CLCH.

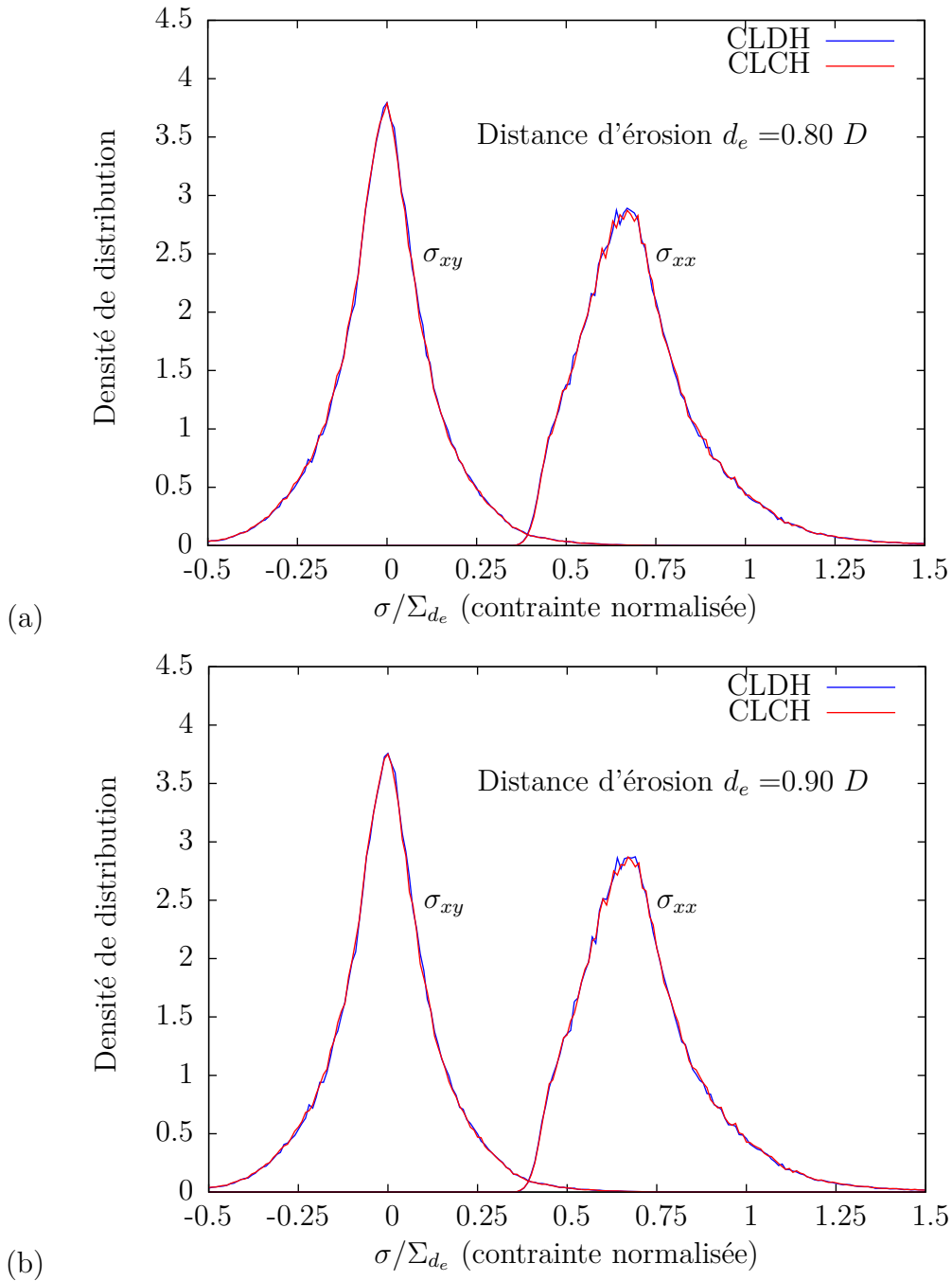


FIG. D.10 – Distribution des contraintes σ_{xx} et σ_{xy} dans la matrice, normalisée par rapport à la contrainte moyenne Σ_{de} , calculées à partir de la solution érodée d’une distance $d_e = 0.8D$ (a) et $d_e = 0.9D$ (b). Chargement sphérique imposé avec les CLDH et les CLCH.

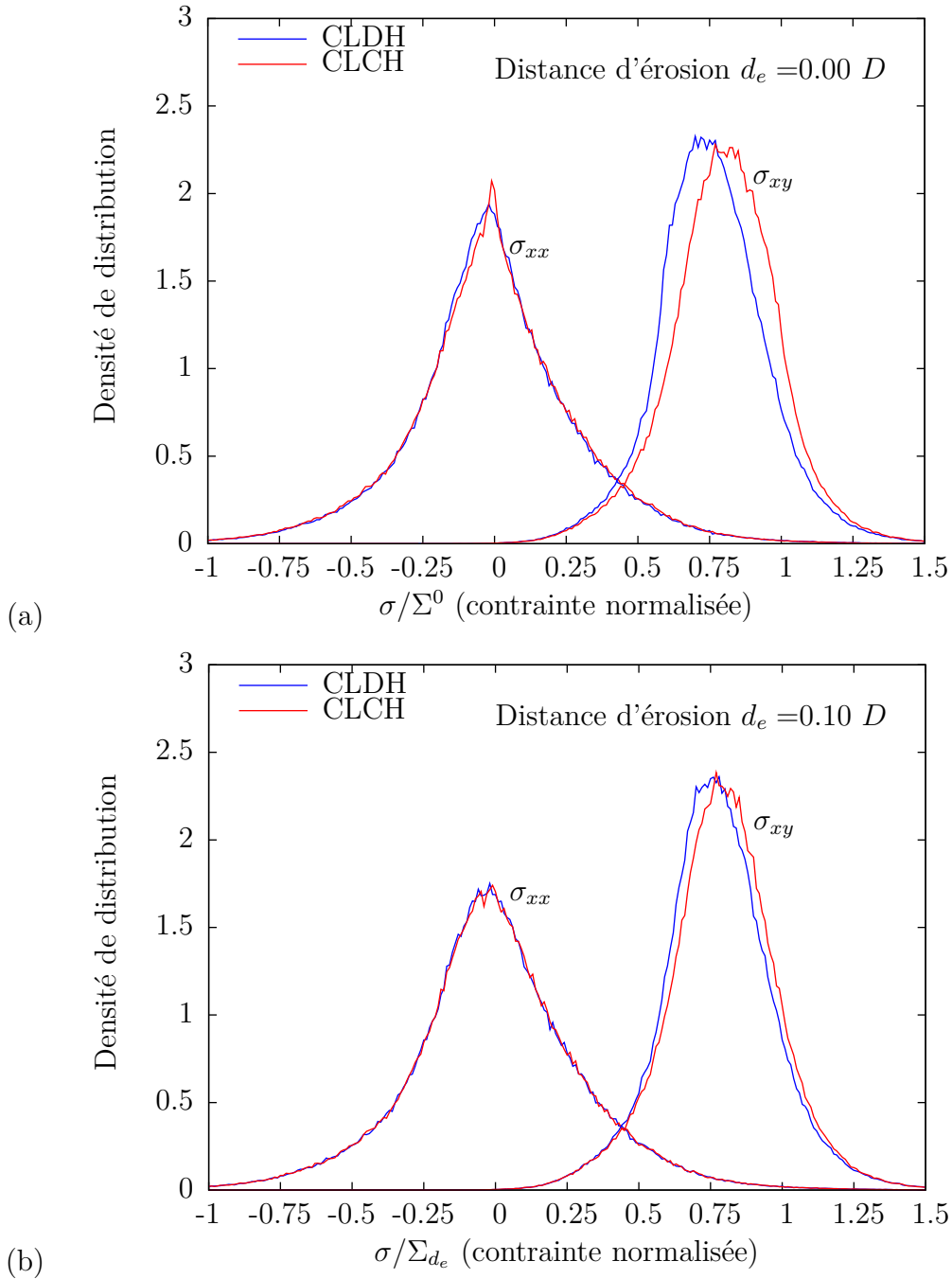
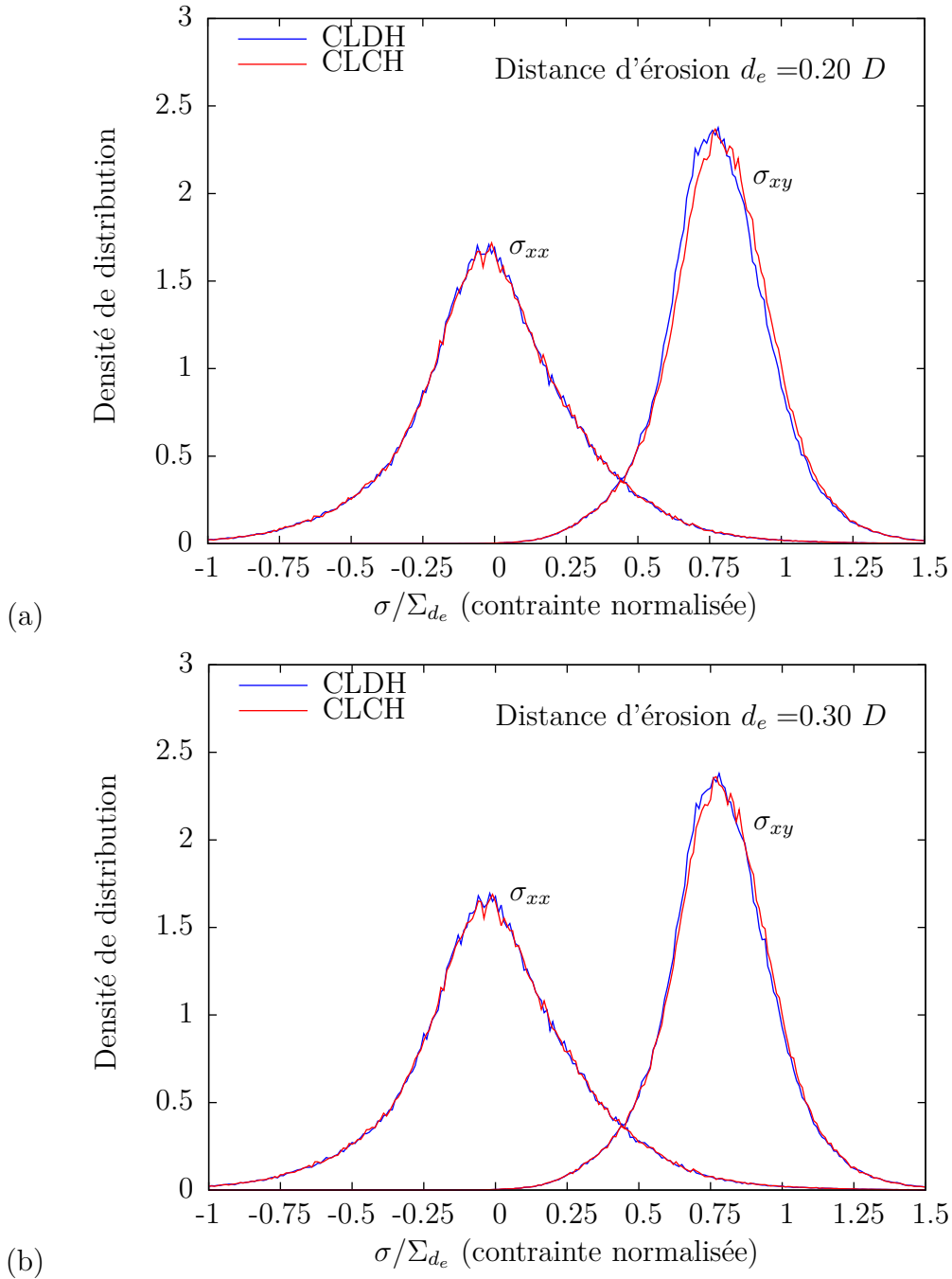
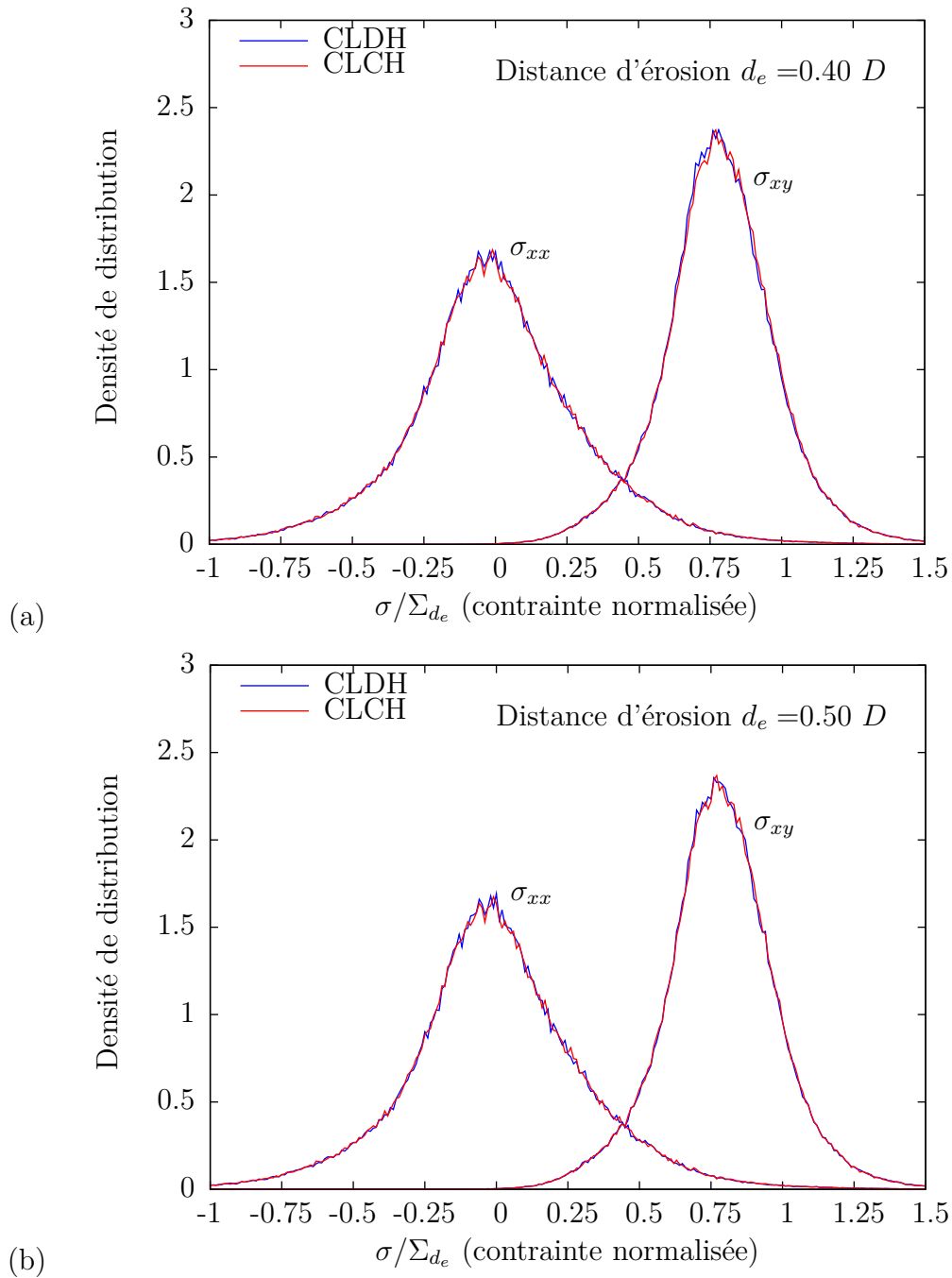


FIG. D.11 – Distribution des contraintes σ_{xx} et σ_{xy} dans la matrice, normalisée par rapport à la contrainte moyenne, calculées sur le maillage complet (a) et à partir de la solution érodée d'une distance $d_e = 0.1D$ (b). Chargement déviatorique imposé avec les CLDH et les CLCH.





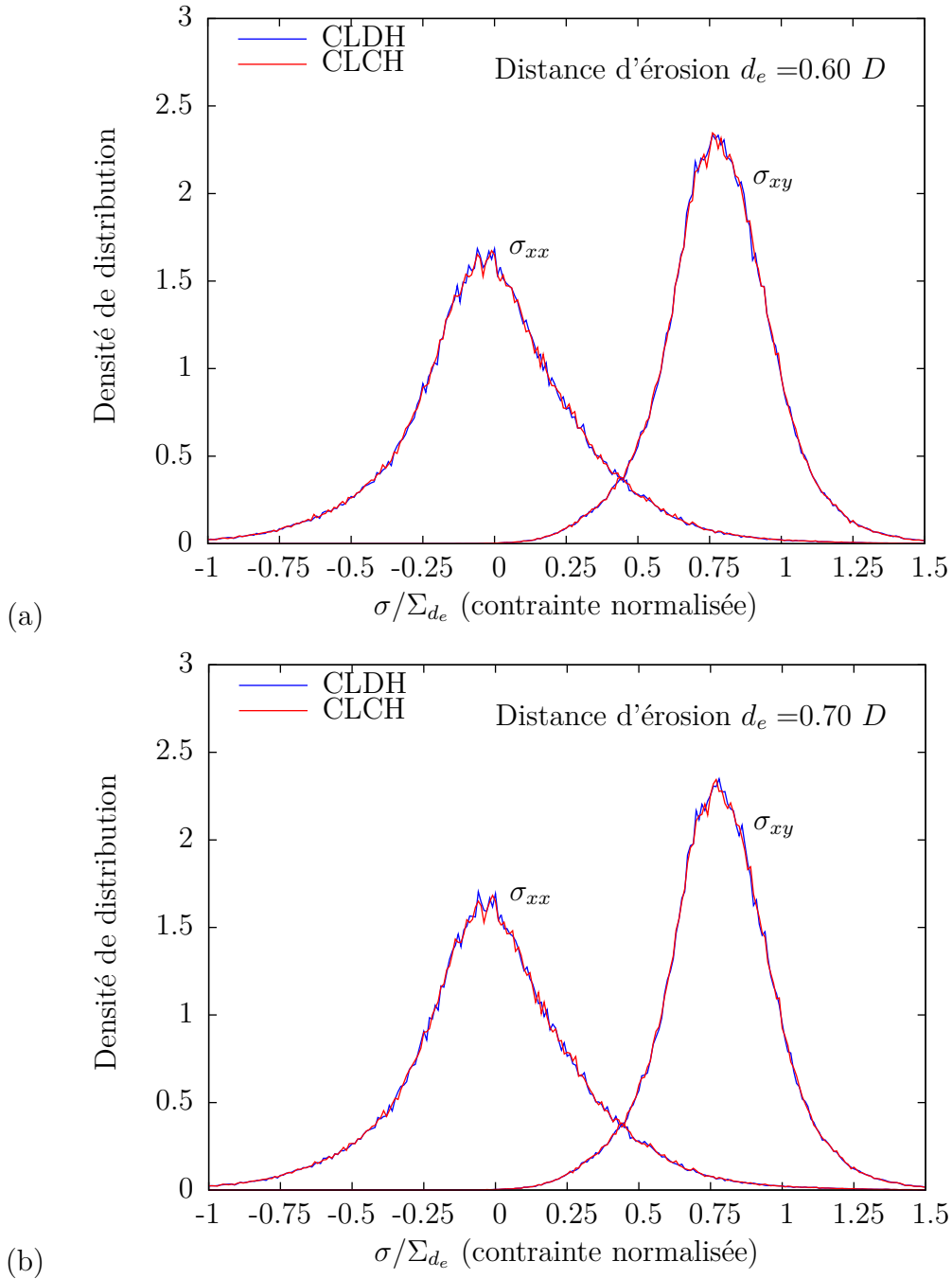


FIG. D.14 – Distribution des contraintes σ_{xx} et σ_{xy} dans la matrice, normalisée par rapport à la contrainte moyenne Σ_{de} , calculées à partir de la solution érodée d'une distance $d_e = 0.6D$ (a) et $d_e = 0.7D$ (b). Chargement déviatorique imposé avec les CLDH et les CLCH.

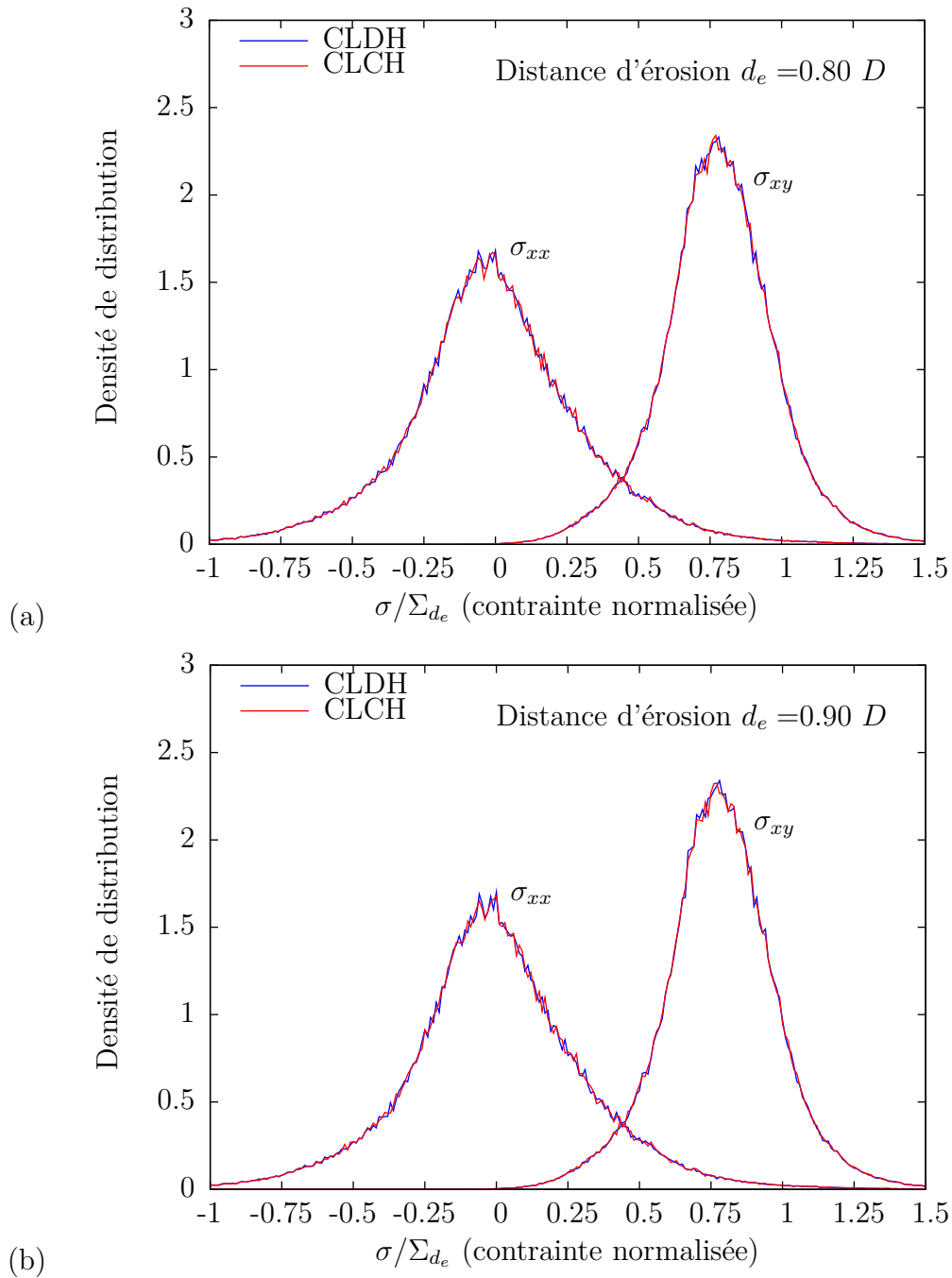


FIG. D.15 – Distribution des contraintes σ_{xx} et σ_{xy} dans la matrice, normalisée par rapport à la contrainte moyenne Σ_{de} , calculées à partir de la solution érodée d’une distance $d_e = 0.8D$ (a) et $d_e = 0.9D$ (b). Chargement déviatorique imposé avec les CLDH et les CLCH.

Résumé : Ce travail de thèse a porté sur la simulation numérique du comportement thermique et mécanique d'un combustible nucléaire à particules. Il s'agit d'un composite réfractaire constitué d'une matrice de graphite comportant 45 % en fraction volumique de particules sphériques d'UO₂ revêtues de deux couches de pyrocarbone. L'objectif était de développer une modélisation multi-échelles de ce composite afin d'estimer son comportement moyen, ainsi que les hétérogénéités des champs mécaniques au sein des constituants. Nous avons modélisé la microstructure du combustible et généré des échantillons numériques en 3D. Pour cela, des outils de génération de distributions aléatoires de sphères, de maillage et de caractérisation microstructurale, telle la covariance, ont été développés dans le code de calcul CAST3M. Une centaine d'échantillons numériques de différentes tailles ont été réalisés. Le comportement thermo-élastique du combustible a été caractérisé à partir de ces échantillons, à l'aide de calculs de microstructures par éléments finis. Nous avons étudié l'influence de divers paramètres de la modélisation, dont les conditions aux limites. Nous proposons une méthode pour s'affranchir des effets des conditions aux limites sur les résultats, appelée méthode d'érosion. Elle s'appuie sur l'analyse des résultats sur un érodé du volume élémentaire. Nous avons alors déterminé les propriétés effectives du composite (modules d'élasticité, conductivité thermique, dilatation thermique), ainsi que les distributions des champs mécaniques locaux au sein de la matrice. Enfin, nous avons proposé un modèle de changement d'échelles permettant d'obtenir, non seulement les valeurs moyennes des variables mécaniques dans chaque phase, mais également leurs variances et covariances pour tout chargement macroscopique imposé. Cette approche statistique de changement d'échelles permet ainsi d'estimer la distribution des grandeurs mécaniques au sein de chaque phase du composite.

Mots-clefs : Comportement thermo-mécanique, modélisation multi-échelles, homogénéisation, matériau composite aléatoire, particules sphériques, combustible nucléaire à particules

Abstract : The aim of this work was to perform numerical simulations of the thermal and mechanical behavior of a particle-based nuclear fuel. This is a refractory composite material made of UO₂ spherical particles which are coated with two layers of pyrocarbon and embedded in a graphite matrix at a high volume fraction (45 %). The objective was to develop a multi-scale modeling of this composite material which can estimate its mean behavior as well as the heterogeneity of the local mechanical variables. The first part of this work was dedicated to the modeling of the microstructure in 3D. To do this, we developed tools to generate random distributions of spheres, meshes and to characterize the morphology of the microstructure towards the finite element code CAST3M. A hundred of numerical samples of the composite were created. The second part was devoted to the characterization of the thermo-elastic behavior by the finite element modeling of the samples. We studied the influence of different modeling parameters, one of them is the boundary conditions. We proposed a method to vanish the boundary conditions effects from the computed solution by analyzing it on an internal sub-volume of the sample obtained by erosion. Then, we determined the effective properties (elastic moduli, thermal conductivity and thermal expansion) and the stress distribution within the matrix. Finally, in the third part we proposed a multi-scale modeling to determine the mean values and the variance and covariance of the local mechanical variables for any macroscopic load. This statistical approach have been used to estimate the intra-phase distribution of these variables in the composite material.

Keywords : Thermo-mechanical behavior, multi-scale modeling, homogenization, random composite material, spherical particles, particle-based nuclear fuel
