

N°d'ordre : 41515



Thèse en co-tutelle internationale présentée pour l'obtention du titre

Docteur de l'Université Lille 1
Docteur de l'ENSA d'Agadir Université Ibn Zohr

Spécialité : Mécanique et Matériaux

Présentée par : **Ahmed EL MOUMEN**

Prévision du comportement des matériaux hétérogènes basée sur l'homogénéisation numérique : modélisation, visualisation et étude morphologique

Soutenue le : 08 octobre 2014

devant le jury composé de :

• **Rapporteurs :**

Fabrice BARBE, Maître de conférence -HDR à l'INSA de Rouen, France
Noureddine DAMIL, Professeur, Université Hassan II, Casablanca, Maroc

• **Examineurs :**

Jean Michel BERGHEAU, Professeur à ENISE de Saint-Etienne, France
Lahcen AZRAR, Professeur, Université Abdelmalek Essaâdi, Tanger, Maroc
Jamal CHAOUFI, Professeur, Université Ibn Zohr, Agadir, Maroc
Toufik KANIT, Maître de Conférences, Université de Lille1, France
Hassan El MINOR, Maître de Conférences-HDR, ENSA, Agadir, Maroc
Abdellatif IMAD, Professeur, Université de Lille1, France

Sous la direction de **A. IMAD** et **H. EL MINOR**
Co-Encadrant **T. KANIT**

Remerciements

«Prévision du comportement des matériaux hétérogènes basée sur l'homogénéisation numérique : modélisation, visualisation et étude morphologique.» Comme tous les sujets de thèse, le mien aussi est attirant.

Comment choisit-on un sujet de recherche ? Pourquoi consacre-t-on trois ans juste pour comprendre un sujet, développer une théorie, étudier un matériau, construire un montage, modéliser un matériau, ... ? Ces années sont-ils suffisantes ou non ? Voici le cas d'un projet. Trois ans plus tard, j'ai parcouru des chemins dans ce monde de l'homogénéisation et de la morphologie. Ce projet regroupe les principaux résultats de ces années de recherche sur les mots "Matériaux hétérogènes", "Homogénéisation numérique", "Modélisation", "Design" et "Morphologie". Cette étude s'inscrit dans le cadre d'une collaboration en cours dans le laboratoire de mécanique de Lille, l'université de Lille 1 et le laboratoire de mécanique des procédés de l'énergie et de l'environnement de l'université Ibn Zohr d'Agadir.

Je souhaite remercier, en premier lieu, l'ensemble des membres de mon jury pour avoir accepté de contribuer à l'évaluation de mes travaux de recherche et le professeur **J M. Bergheau** d'en avoir accepté la présidence.

Je remercie Messieurs **N. Damil** et **F. Barbe** pour rapporter mon travail et pour leurs rapports intéressants. Je remercie Messieurs **J. Chaoufi** et **L. Azrar** pour avoir accepté d'examiner mes travaux de recherches. Je suis conscient de la qualité exceptionnelle de ce jury dans le domaine de la modélisation .

Une thèse, c'est des personnes avec lesquelles on est amené à travailler. Ce travail est avant tout un travail d'équipe, en tout premier lieu, je souhaite remercier trois personnes :

Je remercie mes directeurs **Abdellatif Imad**, **Toufik Kanit** et **Hassan EL Minor**.

* Je vous remercie Abdellatif, pour votre aide précieuse en modélisation, aussi l'interprétation de l'expérience. J'ai particulièrement apprécié votre dynamisme et votre grande réactivité face à tous mes problèmes. Malgré ses nombreuses occupations et responsabilités, il a toujours montré un grand intérêt pour mes travaux. Je

vous remercie de m'avoir transmis votre rigueur de travail pour mener ce projet.

* Je vous remercie Toufik et Hassan, pour ces trois années passées ensemble, pour tout ce que m'avais appris et d'avoir fait avec moi la passerelle entre le monde de l'homogénéisation et de la morphologie. Merci pour les conseils, le suivi scientifiques, les encouragements pour lesquels ce travail a abouti et pour la confiance qu'ils ont m'apporté depuis déjà quelques années. Merci aussi toufik pour le café du matin.

MERCI BEAUCOUP!!!!!!, ce mot suffit à lui même.

Je remercie également l'ensemble des personnes qui m'ont aidé pendant ces années de recherche pour avancer dans mon travail : **Franck N'Guyen** (ingénieur de recherche) mon collègue de la thèse à Lille, pour m'avoir appris les méthodes de maillage et les outils de la morphologie mathématique (covariance). Merci, tu n'imagines pas à quel point tes techniques m'ont beaucoup aidées. Merci aussi **Noureddine Bensediq** et **EL Moukhtar Hilali** pour les échanges scientifiques et votre accueil respectivement dans IUT-Lille et l'équipe de recherche MMS-ENSA.

Je remercie aussi mes chers parents, mon frère et toute ma famille pour leur soutien inconditionnel, malgré la distance qui nous séparait durant ces trois années.

Merci Najib Ouarzazi, notre directeur adjoint de l'école doctorale, partie mécanique et génie civil, pour ton bonjour quotidien!!!. Merci aussi à Madame EL-Idrissi la directrice du centre doctorale IBN Zohr.

Lille, le 01/07/2014

Ahmed EL MOUMEN

aelmoumen@gmail.com

Résumé

L'objectif principal de ce travail est la prédiction du comportement macroscopique élastique et thermique d'un matériau hétérogène. Deux approches d'homogénéisation sont utilisées dans cette étude. Une approche analytique basée sur les bornes et les modèles analytiques et une approche numérique basée sur la méthode des éléments finis. Parmi les méthodes disponibles dans la littérature, nous avons retenu pour l'approche analytique les bornes absolues de *Voigt-Reuss*, les bornes d'ordre 2 de *Hashin-Shtrikman*, les bornes d'ordre 3 de *Beran* et le modèle auto-cohérent généralisé de *Christensen et Lo*. Pour les méthodes numériques nous avons choisi la méthode des éléments finis basée sur la notion du volume élémentaire représentatif. Nous proposons dans cette étude une troisième approche basée sur l'analyse statistique des microstructures. Un modèle d'homogénéisation à base de calcul numérique sera proposé dans cette étude. La microstructure et son volume élémentaire représentatif sont représentés dans le modèle par un paramètre nommé la portée intégrale. La démarche suivie dans cette étude a été développée initialement pour les milieux contenant les mosaïques de Voronoï ([Kanit et al. \(2003\)](#)) puis étendue au cas des élastomères renforcés par le noir de carbone ([Jean \(2009\)](#)). Elle sera appliquée dans cette étude aux bio-composites à base de granulats de coque de noix d'arganier. La microstructure réelle du biocomposite obtenue par les observations microscopes sera utilisée pour construire une image réelle tridimensionnelle (3D). Les techniques de traitement d'image (segmentation, filtrage, seuillage) sont utilisées pour éliminer le bruit produit par le microscope. Le comportement macroscopique du biocomposite sera homogénéisé par la connaissance de celui des deux phases de l'image 3D obtenue. Finalement, cette étude met en évidence la nécessité d'utiliser le traitement d'image et le calcul par éléments finis pour visualiser, analyser et pour représenter la microstructure, ainsi que les lois de la morphologie mathématique afin d'optimiser la taille de la microstructure hétérogène.

Table des matières

Introduction générale	15
Partie A Introduction aux matériaux hétérogènes	20
I Etude bibliographique	21
I.1 Généralités sur les matériaux hétérogènes	23
I.1.1 Matériaux composites	23
I.1.2 Matériaux poreux	24
I.1.3 Matériaux de génie civil	25
I.2 Effet d'échelles dans les matériaux hétérogènes	26
I.3 Technique d'homogénéisation des matériaux hétérogènes	27
I.3.1 Principe et objectif de l'homogénéisation	27
I.3.2 Méthodologie de l'homogénéisation	28
I.3.3 Homogénéisation des lois de comportement élastique	29
I.4 Différentes approches d'homogénéisation des matériaux hétérogènes	31
I.4.1 Notion de VER dans un matériau hétérogène	32
I.4.2 Approches d'homogénéisation analytique et numérique	34
I.4.2.1 Homogénéisation analytique	34
I.4.2.1.1 Comparaison entre les modèles et les bornes analytiques	35
I.4.2.2 Homogénéisation numérique	37
I.4.2.2.1 Approches numériques basées sur les microstructures virtuelles	38
I.4.2.2.2 Approches numériques basées sur les microstructures réelles	41
I.4.2.2.3 Approche numérique basée sur les microstructures périodiques	44
I.4.2.2.4 Choix des conditions aux limites pour l'approche numérique	45

I.5 Synthèse	47
Partie B Caractérisation, modélisation, visualisation, analyse morphologique et design des microstructures	48
II Homogénéisation numérique : outils et méthodologie	49
II.1 Objectifs	50
II.2 Génération des microstructures	51
II.3 Visualisation 3D des microstructures	56
II.4 Maillage 3D des microstructures	60
II.5 Problématiques liées au maillage éléments finis	62
II.6 Synthèse	63
III Effet de l'interconnexion des inclusions sur le comportement élastique effectif : approche numérique et statistique	64
III.1 Description des microstructures	66
III.2 Comportement mécanique des phases et conditions aux limites	67
III.2.1 Comportement des phases	67
III.2.2 Conditions aux limites et le calcul linéaire	68
III.2.2.1 Calculs en élasticité linéaire	68
III.2.2.2 Calculs en conduction thermique	69
III.2.2.3 Quelques valeurs des conditions aux limites	70
III.3 Homogénéisation numérique et fluctuation des propriétés macroscopiques	72
III.3.1 Génération des réalisations	72
III.3.2 Fluctuation de la fraction volumique	73
III.3.3 Fluctuation des propriétés apparentes	75
III.3.3.1 Convergence globale et densité de maillage	75
III.3.3.2 Estimation des propriétés apparentes	76
III.4 Analyse morphologique et statistique	84
III.4.1 Notion de la covariance	85
III.4.2 Caractérisation par la portée intégrale et par la variance	88
III.4.3 Concept de la morphologie équivalente	92
III.4.4 Variation du VER en fonction de la fraction volumique	94
III.5 Synthèse	95
IV Application du concept de la morphologie équivalente à la conductivité thermique des milieux poreux	96
IV.1 Approche d'homogénéisation numérique	98

IV.1.1	Comportement thermique des phases	98
IV.1.2	Equations constitutives et conditions aux limites	99
IV.1.3	Densité de maillage thermique	99
IV.1.4	Homogénéisation numérique en transfert thermique	100
IV.1.4.1	Fluctuations de la fraction volumique des pores	101
IV.1.4.2	Fluctuation de la conductivité apparente et effective	102
IV.1.4.3	Effet du contraste et de la porosité	106
IV.2	Analyse thermique par l'approche statistique	111
IV.2.1	Identification de la portée intégrale dans une microstructure poreuse	111
IV.2.2	Variation du VER thermique	112
IV.2.3	Concept de la morphologie équivalente	115
IV.3	Synthèse	117
V	Effet de la forme des particules sur les propriétés mécaniques et sur la taille du VER d'un matériau hétérogène	118
V.1	Description morphologique et mécanique des phases	120
V.1.1	Description des phases	120
V.1.2	Propriétés des phases	121
V.2	Homogénéisation numérique	122
V.3	Effet de la forme des particules sur le tenseur élastique macroscopique	130
V.4	Description statistique	133
V.4.1	Effet de la forme sur le diagramme de covariance	133
V.4.2	Analyse de l'effet de la forme par la variance et par la portée intégrale	138
V.4.3	Taille du VER et la fraction volumique	142
V.4.4	Taille du VER et contraste des propriétés des phases	142
V.4.5	Variation du VER dans le plan (p, c)	143
V.5	Synthèse	145
VI	Analyse multi-échelle en approche numérique et statistique de la morphologie d'un biocomposite d'arganier	146
VI.1	Introduction	148
VI.2	Matériau et méthode	150
VI.2.1	Données expérimentales	150
VI.2.2	Préparation des microstructures	151
VI.2.3	Traitement d'images	151
VI.2.3.1	Numérisation	151
VI.2.3.2	Filtrage et seuillage	153

VI.2.3.3	Préparation de la microstructure 3D	158
VI.3	Homogénéisation numérique	159
VI.3.1	Maillage éléments finis	159
VI.3.2	Estimation des propriétés effectives	160
VI.3.3	Calcul du tenseur des propriétés élastiques	162
VI.4	Caractérisation par mesure morphologique et statistique	163
VI.4.1	Covariance et l'anisotropie	163
VI.4.2	Représentativité de la taille des échantillons	165
VI.4.3	Variation de la taille du VER en fonction de GCNA	167
VI.5	Synthèse	169
 Conclusions générales		 170
 Perspectives		 172
 A Expressions analytiques des approches d'homogénéisation en élasticité		
linéaire		174
A.1	Bornes analytiques	174
A.1.1	Bornes d'ordre 0	174
A.1.2	Bornes d'ordre 1	174
A.1.3	Bornes d'ordre 2	175
A.1.4	Bornes d'ordre 3	175
A.2	Modèles analytiques	176
A.2.1	Modèle de Mori-Tanaka	176
A.2.2	Modèle de schéma de distribution diluée	176
A.2.3	Modèle auto-cohérent	176
A.2.4	Modèle Auto-chérent généralisé	177
A.2.5	Modèles analytiques particuliers	178
A.2.5.1	Estimation d'Einstein	178
A.2.5.2	Estimation de Smallwood	178
A.2.5.3	Estimation de Guth-Gold	178
A.2.5.4	Estimation de Budiansky	179
 B Expressions analytiques des approches d'homogénéisation pour la		
conductivité thermique		180
B.1	Bornes de la conductivité thermique	180
B.1.1	Bornes d'ordre 1	180

TABLE DES MATIÈRES

B.1.2	Bornes d'ordre 2	181
B.1.3	Bornes d'ordre 3	181
B.2	Modèles de la conductivité thermique	182
B.2.1	Modèle auto-chérent	182
B.2.2	Les Modèles de Maxwell	182
	Bibliographie	182

Table des figures

I.1	Exemple des matériaux hétérogènes multiphasiques obtenus par la tomographie, Ding (2012)	23
I.2	Composites hétérogènes de renforts : (a) fibres et (b) particules.	24
I.3	Matériaux hétérogènes poreux : (a) milieu poreux à l'échelle microscopique (CNRS Photothèque/ISM), (b) une mousses métalliques réelle et (c) une mousse simulée.	25
I.4	Matériaux de génie civil : (a) roche et (b) béton, Escoda (2012)	25
I.5	La taille et les constituants des échelles dans un matériau de construction, Musielak et al. (2013)	27
I.6	Principe d'homogénéisation d'une microstructure hétérogène.	28
I.7	Conditions d'échelle sur une microstructure hétérogène : (a) pièce, (b) élément de volume et (c) MHE. $d \ll l \ll L$	29
I.8	Exemple des VERs d'une microstructure hétérogène, Gitman et al. (2007)	32
I.9	Comparaison entre les différentes approches d'homogénéisation analytique, Dirrenberger (2012)	36
I.10	Méthodologie de l'utilisation de l'approche numérique,	37
I.11	Microstructures virtuelles utilisées pour la simulation : (a) González et al. (2004) , (b) Guo et al. (2014) , (c) Kari et al. (2007b) et (d) Tawerghi and Yi (2009)	39
I.12	Variation des propriétés effectives en fonction de : (a) VER et (b) fraction volumique, Kari et al. (2007b)	39
I.13	Variation des propriétés effectives en fonction de la fraction volumique, Segurado and Llorca (2002)	40
I.14	Microstructures de morphologie complexe pour l'approche numérique, (a) Kanit et al. (2003) , Quey et al. (2011) et (c) Minh et al. (2013)	41

I.15	Microstructures (VERs) de morphologie réelle pour l'approche numérique : (a) Kanit et al. (2006), (b) Ding (2012) et (c) Altendorf (2011).	42
I.16	Etape de préparation d'une microstructure réelle pour la simulation.	43
I.17	Schéma de la procédure de traitement d'une microstructure réelle pour la simulation.	43
I.18	Exemple de microstructures Macro et Micro périodiques d'un réseau hexagonal : (a) cire d'abeille et (b) microstructure électronique de Zr/Br_2	44
I.19	Variation des modules avec les conditions aux limites imposées en fonction du V : (a) Nguyen et al. (2011) et (b) EL Houdaigui et al. (2007).	46
I.20	Correspondance des noeuds en PBC, Grasset-Bourdel et al. (2011).	46
II.1	Microstructures aléatoires 2D : (a) schéma Booléen et (b) schéma de sphères dures.	50
II.2	Les différentes possibilités pour positionner deux particules voisines dans une matrice.	52
II.3	Microstructure générée par RSA : (a) image virtuelle, (b) maillage des particules et (c) maillage total du composite, Kari et al. (2007b).	52
II.4	Mosaïque de Voronoï généré par le processus de Poisson : (a) microstructure avec 8000 grain et (b) maillage de la microstructure, Kanit et al. (2003).	53
II.5	Microstructure virtuelle d'un élastomère chargé de particules, générée par le processus de Poisson et son maillage, Jean (2009).	53
II.6	Les deux formes géométriques d'une particule ellipsoïdale.	54
II.7	Coordonnées du système et les angles principales pour la simulation avec le processus de Poisson.	54
II.8	Organigramme de la méthode de Poisson.	55
II.9	Simulation par Poisson d'un schéma Booléen et de son complémentaire de N particules distribuées aléatoirement dans l'espace. Microstructures étudiées.	57
II.10	Simulation par Poisson d'un schéma de sphères dures et de son complémentaire de N particules distribuées aléatoirement dans l'espace. Microstructures étudiées avec $a > 0$	58
II.11	Résultat de l'association d'un schéma aléatoire et de son schéma complémentaire : (a,b) particules sphériques interconnectées, (c) particules sphériques non-interconnectées et (d) particules ellipsoïdales.	59

II.12	Projection 2D associée à chaque microstructure de la figure II.10 : (a) sphères, (b) ellipses applaties et (d) ellipses allongées.	60
II.13	Maillage 2D et 3D de la géométrie d'une microstructure.	61
II.14	Maillage de microstructures hétérogènes : (a) schéma Booléen, (b) maillage associé, (c) schéma de sphères dures et (d) le maillage associé. 62	62
III.1	Exemple de microstructures 3D utilisées : (a) schéma de sphères dures, (b) complémentaire de schéma, (c) composite et (d) le maillage associé.	66
III.2	Conditions aux limites : (a) les noeuds d'un volume et (b) les faces et les noeuds opposés en PBC.	70
III.3	Génération des réalisations : (a) différente taille de volume pour le calcul des propriétés dans le VER et (b) exemple de réalisations v_i distribuées aléatoirement dans le VER.	73
III.4	Prises d'image pour la détermination des fluctuations.	74
III.5	Variation de p/p^a en fonction du nombre d'inclusions N	75
III.6	Variation du module k en fonction du nombre des EF pour les diffé- rentes grilles de maillage.	76
III.7	Propriétés homogénéisées, en PBC, en fonction de la taille du ma- térial 2, cas 1. (a) coefficient de compression et (b) coefficient de cisaillement.	78
III.8	Propriétés homogénéisées, en PBC, en fonction de la taille du ma- térial 2, cas 2. (a) coefficient de compression et (b) coefficient de cisaillement.	79
III.9	Propriétés homogénéisées, en PBC, en fonction de la taille du maté- riau 1. (a) coefficient de compression et (b) coefficient de cisaillement. 80	80
III.10	Distribution locale du module de cisaillement μ dans un volume de fraction $p = 50\%$: (a) maillage initial et (b) déformation dans le plan xy	81
III.11	Distribution locale du module de compression k pour une fraction volumique $p = 50\%$: (a) maillage initial et (b) déformation du volume. 82	82
III.12	Distribution locale du module de cisaillement μ pour une fraction $p = 40\%$: (a) maillage initial et (b) déformation dans le plan xy . . . 82	82
III.13	Distribution locale du module de compression k pour une fraction $p = 40\%$: (a) maillage initial et (b) volume déformé.	83
III.14	Distribution locale du module de cisaillement μ pour une fraction $p = 23\%$: (a) maillage initial et (b) déformation dans le plan xy . . . 83	83

III.15	Distribution locale du module de compression k pour une fraction $p = 23\%$: (a) maillage initial et (b) déformation du volume.	84
III.16	Principe de calcul de la covariance.	86
III.17	Exemple de covariogrammes pour : (a) élastomère étudié par Jean (2009) et (b) les fibres courtes étudiées par Oumarou et al. (2012)	86
III.18	Exemple de covariogrammes : (a) microstructures réelles étudiées par Kanit et al. (2006) et (b) microstructures virtuelles étudiées par Torquato (1997)	87
III.19	Comparaison entre les covariances des deux microstructures 1 et 2, de fraction volumique $p = 23\%$, El Moumen et al. (2013)	88
III.20	Decoupage d'un volume V en $N' = 64$ sous-volumes de volume v	90
III.21	Variation de la variance en fonction de la taille du volume : (a) coefficient de compression et (b) coefficient de cisaillement	91
III.22	Concept de la morphologie équivalente.	94
IV.1	Variation de la conductivité thermique en fonction du nombre des éléments finis.	100
IV.2	Variation de la fraction volumique relative p/p^a en fonction de N pour une microstructure poreuse.	102
IV.3	Variation de la conductivité thermique apparente en fonction de la taille du volume dans une microstructure contenant des pores non-interconnectées : (a) cas 1 et (b) cas 3.	104
IV.4	Variation de la conductivité thermique apparente en fonction de la taille du volume dans une microstructure contenant des pores interconnectées : (a) cas 1 et (b) cas 3.	105
IV.5	Variation de la conductivité thermique en fonction du contraste d'une microstructure de pores : (a) non-interconnectées et (b) interconnectées.	107
IV.6	Variation de la conductivité thermique en fonction de la fraction volumique des pores pour un contraste $c = 25$	108
IV.7	Variation de la conductivité thermique pour les différentes formes des pores, $p = 0.23$	108
IV.8	Distribution locale de la conductivité pour une porosité $p = 0.23$: (a) pores sphériques interconnectés, (b) pores sphériques non-interconnectés et (c) pores ellipsoïdales non-interconnectés.	109
IV.9	Effet de la fraction volumique sur la conductivité thermique locale : (a) $p = 0.23$, (b) $p = 0.4$ et $p = 0.5$	110

IV.10	Effet du contraste sur la conductivité thermique locale : (a) image initiale, (b) $c = 417$, (c) $c = 4167$, (d) $c = 8334$, (e) $c = 16667$ et (f) $c = 41667$	110
IV.11	Variation du VER thermique dans une microstructure poreuse : (a) en fonction de la fraction volumique et (b) en fonction du contraste.	114
IV.12	Variation du VER thermique dans le plan (p, c) d'une microstructure poreuse. Exemple pour $\epsilon_{abs} = 0.005$	115
IV.13	Notion de la morphologie équivalente pour un milieu poreux.	117
V.1	Simulation d'une microstructure avec différentes formes : (a) forme sphérique, (b) forme ellipsoïdale aplatie et (c) forme ellipsoïdale allongée.	121
V.2	Variation des propriétés macroscopiques (numériques et analytiques) en fonction de la taille du volume, cas 1.	124
V.3	Variation des propriétés macroscopiques (numériques et analytiques) en fonction de la taille du volume, cas 2.	125
V.4	Variation des propriétés macroscopiques (numériques et analytiques) en fonction de la taille du volume, cas 3.	126
V.5	Variation des propriétés macroscopiques (numériques et analytiques) en fonction de la taille du volume, cas 4.	127
V.6	Calcul du coefficient de compression k : (a) microstructure originale et (b) carte de distribution de $k = (\sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33})/3$ dans un volume déformé.	128
V.7	Calcul du coefficient de cisaillement μ : (a) microstructure originale et (b) carte de distribution de $\mu = \sigma_{12}$ dans un volume déformé.	128
V.8	Calcul du coefficient de compression k : (a) microstructure originale et (b) carte de distribution de $k = (\sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33})/3$ dans un volume déformé.	129
V.9	Calcul du coefficient de cisaillement μ : (a) microstructure originale et (b) carte de distribution de $\mu = \sigma_{12}$ dans un volume déformé.	129
V.10	Les covariogrammes d'un volume contenant une seule particule de fraction volumique $p = 0.23$	134
V.11	Les covariogrammes d'un volume contenant 10 particules de fraction volumique $p = 0.23$	135
V.12	Les covariogrammes d'un volume contenant 50 particule de fraction volumique $p = 0.23$	136
V.13	Les covariogrammes des VER déterministes de chaque forme des particules de fraction volumique $p = 0.23$	137

V.14	Comparaison entre la variance numérique et analytique pour les différentes tailles du volume.	140
V.15	Comparaison entre la variance numérique et analytique pour les différentes tailles du volume.	141
V.16	Variation de la taille du VER déterministe en fonction de p	143
V.17	Variation de la taille du VER d'une microstructure aléatoire en fonction du contraste c	144
V.18	Variation de la taille du VER élastique d'une microstructure aléatoire dans l'espace (fraction volumique, contraste).	145
VI.1	Les matériaux et le processus global de fabrication du biocomposite.	150
VI.2	Module de Young normalisé en fonction de la fraction volumique des charges.	151
VI.3	Clichés du biocomposite PP/GCNA obtenus par observation microscopique.	152
VI.4	Visualisation 3D : (a) face avant de GCNA, (b) face arrière de GCNA, (c) face avant de PP/GCNA et (d) face arrière de PP/GCNA.	153
VI.5	(a) Image du biocomposite, (b) histogramme linéaire et (c) histogramme logarithmique au niveau de gris.	154
VI.6	Microstructure du biocomposite : (a) image microscopique, (b) amélioration du contraste et (c) inter-phase PP/GCNA.	155
VI.7	(a) Image microscopique originale et (b) image après l'application du filtre médian.	156
VI.8	(a) Image originale, (b) image seuillée, (c) image binaire après l'application d'une érosion et (d) histogramme au niveau de gris d'une image seuillée.	157
VI.9	Processus global de construction 3D d'un biocomposite : de l'échantillon à la visualisation 3D.	158
VI.10	Maillage de biocomposite : (a) Grille 3D, (b) image 3D et (c) maillage final.	159
VI.11	Variation du module de Young en fonction de la fraction volumique.	161
VI.12	(a) Microstructure initiale et (b) microstructure déformée et distribution du module de Young après la traction en GPa.	161
VI.13	Covariogramme du biocomposite PP/GCNA pour $p = 0.42$	164
VI.14	Covariogramme de polyamide/fibre courte, Oumarou et al. (2012).	164
VI.15	Génération des réalisations : (a) les blocs de biocomposite et (b) découpage de l'image de PP/GCNA en n sous-volumes aléatoires.	166

VI.16	Module de Young estimé par les différentes approches en fonction de la fraction volumique de GCNA.	168
VI.17	Variations du <i>VER</i> en fonction de GCNA.	169
VI.18	Processus global de caractérisation du biocomposite par la tomographie.	173

Liste des tableaux

I.1	Définitions de VER proposées par les scientifiques.	33
I.2	Expression mathématique des approches d’homogénéisation analytique pour le coefficient de compression k	35
I.3	Expression mathématique des approches d’homogénéisation analytique pour le coefficient de cisaillement μ	35
III.1	Comportement élastique associé à chaque phase de matériau.	67
III.2	Nombre de réalisations n pour chaque v_i contenant N particules.	72
III.3	Résultats de l’homogénéisation numérique comparés aux estimations analytiques.	77
III.4	Comparaison des portées intégrales dans chaque microstructure.	92
IV.1	Comportement thermique de différentes configurations étudiées.	99
IV.2	Nombre de réalisations n pour chaque sous volume contenant N pores.	101
IV.3	Comparaison entre les résultats de l’approche numérique et ceux de l’approche analytique d’une microstructure poreuse de fraction volumique $p = 0.23$	103
IV.4	Comparaison entre les portées intégrales des deux microstructures.	112
V.1	Nombre des réalisations n associées à chaque volume V	120
V.2	Description morphologique et comportement mécanique des phases.	122
V.3	Résultats de la simulation numérique et les approches analytiques ainsi que le VER déterministe ($VERD$).	123
V.4	Comparaison entre la portée intégrale proposée A^* et celle obtenue par l’homogénéisation numérique A_F	138
VI.1	Variance des modules élastiques pour les différents sous-volumes.	165

Introduction générale

La production de matériaux hétérogènes destinés au développement de l'industrie a connu ces dernières années une forte augmentation, ce qui explique la nécessité d'avoir recours aux méthodes de caractérisation de leurs microstructures.

Dans ce but, il est nécessaire de choisir une meilleure technique d'analyse, en termes de microstructure, de propriétés macroscopiques et de manière à identifier et à suivre ces propriétés sous un chargement quelconque. La technique la plus utilisée est l'homogénéisation par le passage Micro-Macro en tenant compte de l'influence des paramètres morphologiques, mécaniques et statistiques de la microstructure du matériau hétérogène. Cependant, peu de travaux de recherche ont abordé cette voie. La modélisation numérique est la méthode la plus robuste pour faire ces passages. Parallèlement aux méthodes de modélisation, de nombreux travaux expérimentaux sont menés sur les matériaux hétérogènes pour identifier les propriétés mécaniques ou thermiques. Là encore, l'étude de la représentativité des résultats des essais expérimentaux et les techniques d'optimisation sont peu utilisées, notamment pour la prédiction des lois de comportement élastique. Notre contribution est de s'insérer dans ce cadre. Nous fixons comme objectif la prévision du comportement des matériaux hétérogènes sous chargement mécanique et thermique. Plusieurs morphologies réelles et virtuelles des matériaux hétérogènes sont considérées. L'effet des paramètres de la microstructure tels que la fraction volumique, la forme, la distribution et l'orientation des particules, sera évoqué numériquement. Le comportement élastique et thermique a été étudié numériquement puis comparé aux résultats expérimentaux, analytiques et statistiques. Les méthodes statistiques sont utilisées pour l'étude de l'anisotropie et de la représentativité des échantillons. La variation du volume élémentaire représentatif en fonction de la fraction volumique et du contraste d'une microstructure hétérogène sera étudiée.

Le mémoire est divisé en deux grandes parties, chacune est composée de plusieurs chapitres :

- Première partie : Introduction aux matériaux hétérogènes (chapitre 1).
- Deuxième partie : Caractérisation, modélisation, analyse morphologique et vi-

sualisation des microstructures hétérogènes (chapitres 2, 3, 4 et 5).

Le premier chapitre est consacré à une étude bibliographique, il comporte une présentation générale des matériaux hétérogènes avec quelques exemples. Nous évoquerons en particulier une synthèse sur les différents travaux et contributions, analytiques et numériques, consacrés à l'étude d'un matériau hétérogène. Il expose aussi les techniques d'homogénéisation élastique en tenant compte les méthodes d'approche. Finalement on trouve dans ce chapitre les expressions mathématiques de quelques modèles analytiques utilisés pour l'homogénéisation des matériaux hétérogènes.

Le deuxième chapitre présente quelques méthodes et outils pour la construction d'un maillage hétérogène. De même, la génération des microstructures virtuelles pour la modélisation, la visualisation et le dépouillement des images en 3D sont présentés. Il aborde aussi la technique de maillage des images virtuelles utilisée dans cette étude, ainsi la question du choix de cette technique. Il se termine par une visualisation 3D de l'ensemble des microstructures générées et leurs maillages.

Le troisième chapitre regroupe l'ensemble de résultats des calculs éléments finis concernant l'effet de plusieurs paramètres mécaniques et morphologiques. Il consiste à étudier l'effet de l'interconnexion des inclusions sur le comportement élastique des matériaux hétérogènes. Les méthodes d'homogénéisation numérique basées sur la notion de VER seront utilisées pour comparer deux microstructures : (i) une microstructure contenant des inclusions sans aucune interconnexion et (ii) une microstructure avec des inclusions interconnectées, tout en gardant la même fraction volumique. La comparaison est faite entre les différents paramètres de deux microstructures, comme la fraction volumique, le nombre et la taille des inclusions, afin de déterminer une équivalence entre eux. Les outils statistiques, comme la variance, la covariance et la portée intégrale, seront aussi utilisés pour quantifier l'effet de l'interconnexion et pour l'étude de la représentativité des résultats numériques. L'anisotropie des microstructures utilisées dans la modélisation sera aussi étudiée. L'ensemble des résultats de la simulation et de l'étude statistique nous permettent de déduire la notion de la morphologie équivalente. Cette notion consiste à remplacer une microstructure par une autre afin de déduire le comportement macroscopique du matériau.

Dans **le quatrième chapitre**, nous projetons les résultats du troisième chapitre concernant la notion de la morphologie équivalente, au cas du comportement thermique d'un matériau poreux afin de valider cette approche. Les techniques d'homogénéisation numérique et les méthodes statistiques seront utilisées dans ce chapitre. La conductivité thermique de chaque microstructure sera estimée. Idem pour

l'étude de la représentativité et de l'anisotropie des résultats thermiques. Les variations de VER thermique en fonction de la fraction volumique et du contraste du milieu poreux seront étudiées.

Au cinquième chapitre, nous avons abordé l'effet de la forme des inclusions sur les propriétés effectives et sur la taille du VER des matériaux hétérogènes, en utilisant les approches numériques et statistiques. Pour cela trois microstructures de forme d'inclusion différente seront comparées. (i) Une microstructure avec des inclusions sphériques, (ii) une microstructure avec des inclusions ellipsoïdales aplaties et (iii) une microstructure avec des inclusions ellipsoïdales allongées. Les trois microstructures ont la même fraction volumique. L'effet de contraste sera étudié pour les différentes microstructures. L'ensemble des résultats numériques seront comparés avec ceux des approches analytiques pour déduire leurs représentativités. L'approche statistique est aussi utilisée dans ce chapitre pour quantifier l'anisotropie des résultats de la simulation. Une comparaison entre les paramètres statistiques analytiques et d'autres de la simulation numérique est considérée.

Les outils de simulation numérique et de caractérisation par approche statistique des microstructures hétérogènes étant mis en place. **Le sixième chapitre** est consacré à l'application de ces outils pour la prédiction du comportement mécanique macroscopique et pour l'optimisation de la taille des biocomposites à base de granulats de coque de noix d'arganier. Les résultats sont analysés en lien avec l'étude expérimentale. La variation des modules d'Young de biocomposite en fonction de la fraction volumique sera déterminée puis confrontée aux résultats expérimentaux. La microstructure de biocomposite est obtenue par l'utilisation d'une série des observations microscopiques. Les techniques de traitement d'image seront utilisées pour débruiter ces microstructures. La distribution des granulats dans la matrice pour les différentes microstructures sera contrôlée. L'approche statistique présentée dans cette étude sera couplée avec les résultats de la simulation numérique pour étudier la représentativité de la taille des microstructures réelles. La taille minimale du VER numérique est étudiée pour chaque fraction volumique de granulats. Une comparaison entre les résultats obtenus par les différentes approches sera présentée.

Enfin le mémoire s'achève par les conclusions tirées de ce travail et propose différentes perspectives de recherche. Cette thèse a donné lieu aux publications et aux communications suivantes :

- **Article dans des revues internationales à comité de lecture**

1. **A. El Moumen**, *T. Kanit, A. Imad, H. El Minor* : Effect of overlapping inclusions on effective elastic properties of composites. *Journal of Mechanics Research Communications*, 53 (2013) 24-30. Ce tra-

vail a été classé par science directe entre les Top 25 Hottest Articles (<http://top25.sciencedirect.com/subject/engineering/12/journal/mechanics-research-communications/00936413/archive/47/>). **Classement 11/25**.

2. **A. El Moumen, A. Imad, T. Kanit, E. Hilali, H. El Minor** : A multiscale approach and microstructure design of the elastic composite behavior reinforced with natural particles. *Composite Part B*, 66 (2014) 247-254.
3. **A. El Moumen, T. Kanit, A. Imad, H. El Minor** : Computational thermal conductivity in porous materials using homogenization techniques : numerical and statistical approaches. *Computational Materials Science*, 10.1016/j.commatsci.2014.09.043.

• **Articles soumis dans des revues internationales à comité de lecture**

1. **A. El Moumen, T. Kanit, A. Imad, H. El Minor** : Effect of reinforcement shape on physical properties and representative volume element of composites : statistical and numerical approaches. *Mechanics of Materials*, MOM-14-97, Mar 04, 2014.

• **Travaux en préparation pour la soumission**

1. *S. Sukiman, A. El Moumen, T. Kanit, A. Imad* : Numerical computational for composite with gigantic fibers network.
2. **A. El Moumen, T. Kanit, A. Imad, H. El Minor** : Representative volume element of random two-phase microstructures : A note and evaluation.

• **Congrès internationaux avec actes**

1. 22nd conference on Computational Mechanics by Association of Computational Mechanics in Engineering, 2-4 April 2014-Exter, United Kingdom.
A. EL Moumen, T. Kanit, A. Imad : Computational thermal conductivity in porous materials : numerical and statistical approaches.
2. CFM 2013. 26-30 August 2013, Bordeaux-France.
A. EL Moumen, T. Kanit, A. Imad, H. EL Minor : Effet de l'interconnexion des inclusions sur les propriétés effectives des matériaux hétérogènes de type matrice-inclusion.
3. 11th Congress of Mechanics, 23-26 april 2013, Agadir-Maroc.
A. EL Moumen, T. Kanit, A. Imad, H. EL Minor, E. Hilali : Homogénéisation des matériaux hétérogènes en approche statistique et numérique.
4. VIIèmes Journées d'Etudes Techniques (JET), 02-04 mai 2012, Marrakech-Maroc.

A. EL Moumen, T. Kanit, A. Imad, H. EL Minor, E. Hilali : A new approach of the homogenization of heterogeneous medium based on the notions of integral range and equivalent morphology.

• **Congrès nationaux et Workshops**

1. Journée des bio-composite, 10-11 avril 2013 à l'ISAT, Nevers-France.
A. EL Moumen, T. Kanit, A. Imad, H. EL Minor : Caractérisation d'un bio composite PP chargé de granulats d'arganier : de la morphologie à la modélisation.
2. Journée MECAMAT, 13 juillet 2012, Université du Maine, LE Mans.
A. EL Moumen, T. Kanit, A. Imad, H. EL Minor : Homogénéisation d'un bio-composite : morphologie et design de microstructures optimales.

"La connaissance c'est partager le savoir qui nous fait grandir." Olivier Lockert

Première partie

**Introduction aux matériaux
hétérogènes**

Chapitre I

Etude bibliographique

Ce chapitre vise à présenter une étude générale sur les matériaux hétérogènes, la problématique liée à la caractérisation multi-échelle et le passage entre un comportement microstructural et macrostructural. Des questions liées à l'échelle d'un matériau hétérogène sont abordées. Il montre aussi l'intérêt de disposer, à côté de l'approche classique, une approche d'homogénéisation permettant de prévoir le comportement global à partir de celui des hétérogénéités. On présente aussi les deux approches, numériques et analytiques, de caractérisation d'une microstructure hétérogène. Des comparaisons entre les modèles analytiques classiques sont réalisées pour différents types de matériaux hétérogènes. Les expressions analytiques de ces approches sont données dans la partie Annexe.

Sommaire

I.1	Généralités sur les matériaux hétérogènes	23
I.1.1	Matériaux composites	23
I.1.2	Matériaux poreux	24
I.1.3	Matériaux de génie civil	25
I.2	Effet d'échelles dans les matériaux hétérogènes	26
I.3	Technique d'homogénéisation des matériaux hétérogènes	27
I.3.1	Principe et objectif de l'homogénéisation	27
I.3.2	Méthodologie de l'homogénéisation	28
I.3.3	Homogénéisation des lois de comportement élastique	29
I.4	Différentes approches d'homogénéisation des matériaux hétérogènes	31

I.4.1	Notion de VER dans un matériau hétérogène	32
I.4.2	Approches d'homogénéisation analytique et numérique . .	34
I.4.2.1	Homogénéisation analytique	34
I.4.2.1.1	Comparaison entre les modèles et les bornes analytiques	35
I.4.2.2	Homogénéisation numérique	37
I.4.2.2.1	Approches numériques basées sur les microstructures virtuelles	38
I.4.2.2.2	Approches numériques basées sur les microstructures réelles	41
I.4.2.2.3	Approche numérique basée sur les microstructures périodiques	44
I.4.2.2.4	Choix des conditions aux limites pour l'approche numérique	45
I.5	Synthèse	47

I.1 Généralités sur les matériaux hétérogènes

Les matériaux hétérogènes sont des matériaux qui possèdent deux (biphasée) ou plusieurs phases (multiphase), figure I.1. L'avantage essentiel de ce type de matériaux est les propriétés structurales importantes, que leurs constituants élémentaires ne possèdent pas individuellement, et leur permettre de remplir de nombreuses fonctions techniques. Les exemples sont nombreux : les composites fibreux ou particulaires, les matériaux poreux, les matériaux granulaires, les mousses métalliques ou céramiques, les matériaux de construction en génie civil et les matériaux vivants.

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



FIGURE I.1 – Exemple des matériaux hétérogènes multiphasiques obtenus par la tomographie, Ding (2012).

I.1.1 Matériaux composites

Ce type de matériaux consiste à associer plusieurs matériaux de propriétés différentes, dites phases. Une phase matrice, généralement continue et les autres dites renforts sont habituellement dures de forme différente. La figure I.2 schématise un exemple de composites hétérogènes biphasés avec différentes formes de renforts. Dans un composite on distingue deux type de renforts, un renfort fibre ou sous forme particule. Ces renforts ont le caractère d'être compatible avec la matrice afin d'avoir un comportement global homogène.

Les composites permettent d'améliorer la qualité des matériaux pour une certaine utilisation, du fait de leur légèreté, rigidité, etc. En raison de la large utilisation de ces composites, un effort particulier est fait pour la réduction des coûts, augmenter la durée de vie, prévoir leur rupture et optimiser les propriétés d'usage.

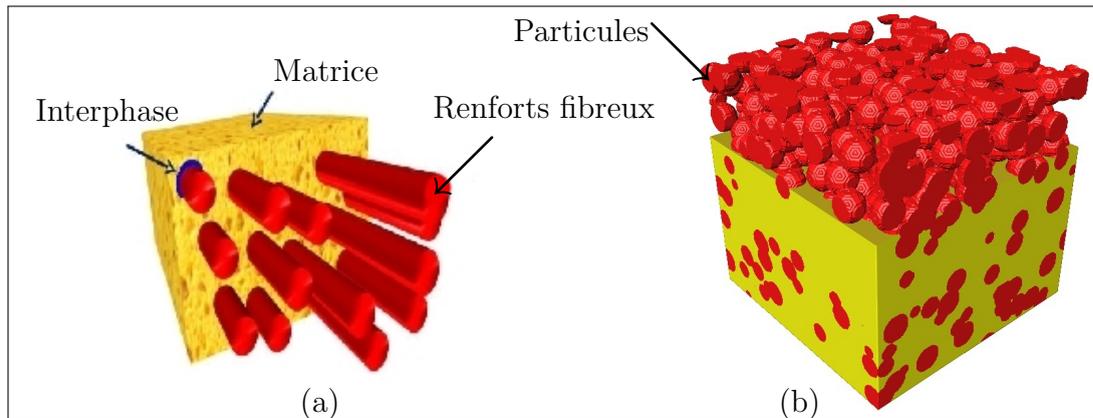


FIGURE I.2 – Composites hétérogènes de renforts : (a) fibres et (b) particules.

I.1.2 Matériaux poreux

Un milieu poreux c'est un matériau hétérogène biphasé constitué d'une phase solide et d'une phase de vide nommée "pore". A l'échelle globale, ces matériaux sont caractérisés comme un milieu continu en introduisant l'effet de la porosité. Cette porosité peut prendre différentes formes de type sphérique, allongée, aplatie, etc. La figure I.3 montre des exemples des matériaux hétérogènes poreux à différentes échelles d'observation. La description géométrique montre qu'on peut envisager deux échelles d'espace distinctes, i.e. l'échelle à laquelle on distingue les domaines occupés par le solide et le fluide. Cependant, cette échelle est plus fine que l'échelle macroscopique pour les applications pratiques.

Il est à noter que dans le cas d'un matériau avec une porosité très élevée (en général 70-95% du volume), on a affaire à ce qu'on appelle une mousse. Ces mousses hétérogènes sont définies par [Kováčik and Simančík \(1998\)](#) comme un milieu poreux de microstructure complexe avec une fraction volumique des pores très élevée, ce qui les a rendu ultralégers. Ce genre de matériaux conserve certaines propriétés physiques de leur matériau de base.

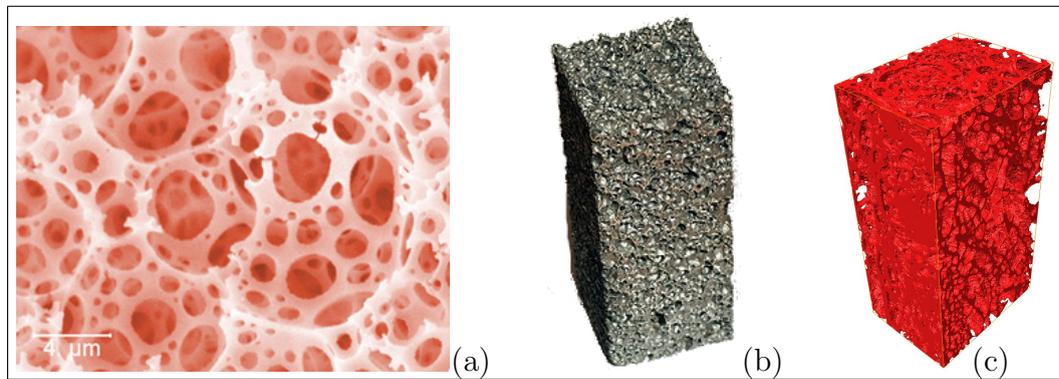


FIGURE I.3 – Matériaux hétérogènes poreux : (a) milieu poreux à l'échelle microscopique (CNRS Photothèque/ISM), (b) une mousses métalliques réelle et (c) une mousse simulée.

I.1.3 Matériaux de génie civil

Les matériaux de génie civil, roches, bétons, etc., sont en général des matériaux hétérogènes solides. Les roches sont formés par un assemblage de minéraux (polymériques) ou parfois d'une seule espèce (monominérales). Le béton est un composite fabriqué à partir des granulats (sables) et un liant (ciment, argile). Il faut noter que la taille des granulats influence les propriétés physiques du matériau hétérogène. La figure I.4 montre des exemple des matériaux hétérogènes de génie civil. Lors de la caractérisation de ce genre de matériaux plusieurs paramètres interviennent, comme la taille, la forme et la distribution des grains et le nombre de phases.

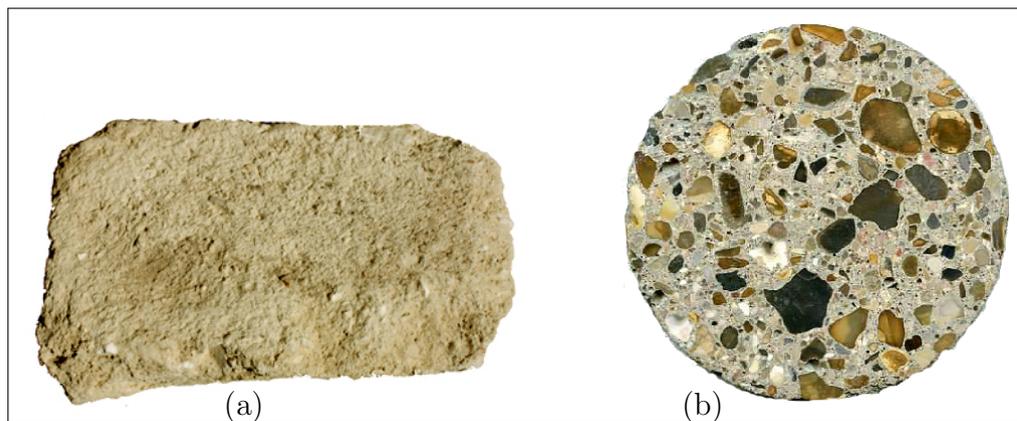


FIGURE I.4 – Matériaux de génie civil : (a) roche et (b) béton, Escoda (2012).

D'une façon générale, ces matériaux hétérogènes possèdent une structure de taille différente. C'est évident que la taille et la nature des constituants jouent un rôle important pour la détermination du comportement globale. Ceci parce que les petites

échelles peuvent donner lieu à des différences marquées dans la connaissance d'une réponse macroscopique. Dans ce qui suit, la description de l'échelle des constituants sera abordée. Par conséquent, pour comprendre le comportement globale d'un matériau hétérogène, nous devons comprendre le comportement et l'échelle des constituants de la microstructure et les processus qui s'y déroulent.

I.2 Effet d'échelles dans les matériaux hétérogènes

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

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

Ce type de description semble être particulièrement adaptée aux matériaux hétérogènes qui sont caractérisés par leur nature multi-échelle qui permet de distinguer successivement l'échelle de la structure, l'échelle du renfort ou de l'hétérogénéité et finalement l'échelle des constituants (Figure I.5). Sur cette figure, on présente le cas d'un matériau en béton avec ses échelles de caractérisation. On présente aussi les constituants et les compositions de chaque échelle. On remarque que la composition du matériau hétérogène dépend généralement des dimensions de l'échantillon.

Il faut d'abord pouvoir distinguer trois échelles de variations. La première, dite microscopique, c'est-à-dire l'échelle locale. Cette échelle permet de suivre les particules dans leurs distributions, orientations, contacts, etc. Cette échelle doit être suffisamment faible pour ne pas gommer les éléments de la microstructure responsables de propriétés macroscopiques. Aussi également élevée pour que les outils classiques de la mécanique des milieux continus soient utilisables. Il faut noter qu'il n'existe pas de critères universels pour fixer cette dimension. La seconde échelle est de nature mésoscopique dont laquelle l'effet des particules sur la réponse globale reste mineur par rapport à l'échelle microscopique. A cette échelle, on trouve les microstructures dans lesquelles on parle de grain, fibre, pore ou charge.

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

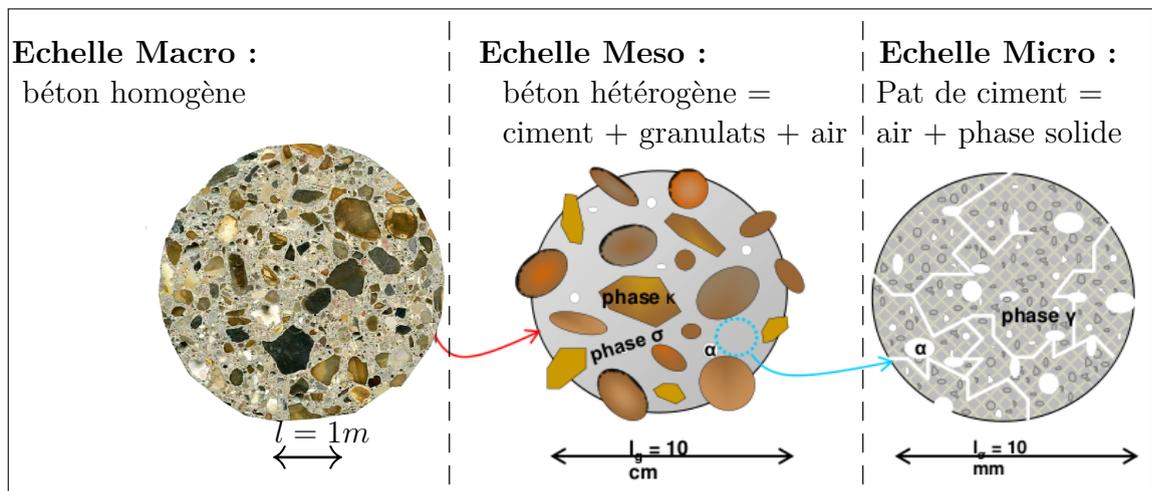


FIGURE I.5 – La taille et les constituants des échelles dans un matériau de construction, Musielak et al. (2013).

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

I.3 Technique d'homogénéisation des matériaux hétérogènes

I.3.1 Principe et objectif de l'homogénéisation

L'homogénéisation regroupe l'ensemble des opérations de moyenne et de détermination du comportement effectif équivalent du matériau hétérogène. Il consiste à déterminer le comportement d'un matériau hétérogène à partir des comportements de ses différents constituants élémentaires. Cette opération est connue sous le nom du passage Micro-Macro.

La figure I.6, montre la description de l'approche d'homogénéisation et les éléments nécessaires pour le passage Micro-Macro et pour l'analyse multi-échelle. On note bien que la méthode d'homogénéisation consiste à substituer un matériau hétérogène par un matériau homogène, dit matériau homogène équivalent (MHE), qui répond globalement à un chargement quelconque de la même façon. Bien sûr, ces méthodes s'appliquent à de nombreux problèmes de la physique tels que la conduction thermique, l'élasticité linéaire, la plasticité, la visco-plasticité, l'électromagnétisme,

etc.

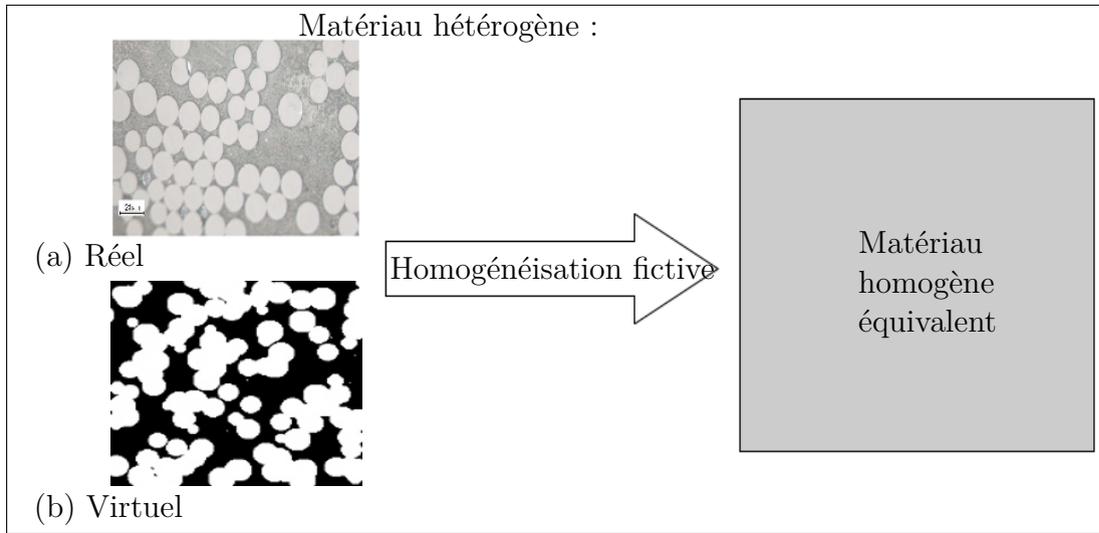


FIGURE I.6 – Principe d’homogénéisation d’une microstructure hétérogène.

I.3.2 Méthodologie de l’homogénéisation

La procédure d’homogénéisation repose sur le choix d’un plus petit volume élémentaire qui doit être représentatif du comportement macroscopique au niveau microscopique. Ce volume est appelé volume élémentaire représentatif (VER), qui est décrit par [Chaboche and Suquet \(1998\)](#) selon les conditions d’échelles suivantes. Si d est la taille caractéristique des hétérogénéités, et L la taille caractéristique de la structure macroscopique considérée (figure I.7), alors la taille caractéristique l du VER est soumise à deux conditions :

- ▶ $l \ll L$: c’est la condition pour qu’on puisse traiter le matériau comme un milieu continu et y déterminer des champs continus de contraintes et de déformations.

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

Après la représentation et la détermination des dimensions du VER, l’autre étape pour une caractérisation globale d’un matériau hétérogène, et celle de la localisation. Ces étapes sont définies par [Zaoui \(1999\)](#) puis [Bornert et al. \(2001\)](#) comme suivant :

L’étape de la représentation consiste à décrire le volume du matériau hétérogène considéré. Tout d’abord, le nombre de phases entourés par un VER, la constitution interne de chaque phase, la disposition des phases, les propriétés mécaniques, le comportement mécanique associé à chaque phase et enfin la fraction volumique de

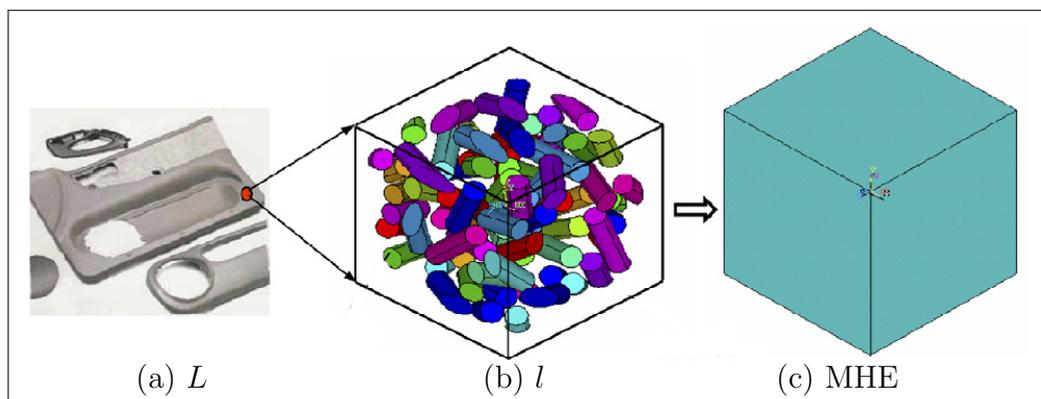


FIGURE I.7 – Conditions d'échelle sur une microstructure hétérogène : (a) pièce, (b) élément de volume et (c) MHE. $d \ll l \ll L$.

chacune d'entre elles.

La Localisation consiste à décrire la réponse mécanique de cet ensemble à diverses sollicitations. Trouver les relations de passage entre l'état mécanique local et l'état mécanique macroscopique dans le VER : quels champs de contraintes et de déformations ? Déterminés comment ? Pour quelles conditions aux limites ?

I.3.3 Homogénéisation des lois de comportement élastique

On s'intéresse à un matériau élastique linéaire hétérogène. Soit V un VER, sollicité en conditions homogènes sur son contour ∂V , d'un milieu hétérogène dont tous les constituants ont un comportement élastique linéaire.

Généralement, dans un matériau élastique linéaire hétérogène, la loi de comportement s'écrit par analogie avec la loi locale sous la forme :

$$\begin{cases} \sigma(\underline{x}) = c(\underline{x}) : \epsilon(\underline{x}) \\ \epsilon(\underline{x}) = s(\underline{x}) : \sigma(\underline{x}) \end{cases} \quad (\text{I.1})$$

Avec c et s le module d'élasticité (raideur) et la complaisance (souplesse) respectivement. A l'échelle de la microstructure ou macroscopique, l'équation (I.1) peut s'écrire directement sous la forme :

$$\begin{cases} \Sigma = C^{hom} : E \\ E = S^{hom} : \Sigma \end{cases} \quad (\text{I.2})$$

Où Σ et E sont la contrainte et la déformation macroscopiques. L'objectif de l'homogénéisation est de déterminer, encadrer ou estimer ces deux modules macroscopiques.

Les opérations de moyenne sur les grandeurs microscopiques, permettent d'établir une relation entre les déformations et les contraintes à l'échelle microscopique et leurs homologues à l'échelle macroscopique par les expressions suivantes :

$$E = \langle \epsilon(x) \rangle = \frac{1}{V} \int_V \epsilon(\underline{x}) dV \quad (\text{I.3})$$

$$\Sigma = \langle \sigma(x) \rangle = \frac{1}{V} \int_V \sigma(\underline{x}) dV \quad (\text{I.4})$$

où $\langle . \rangle$ désigne l'opérateur de moyenne

Les conditions aux limites imposées sur un VER admettent une solution unique qui dépend du chargement macroscopique E imposé. Il existe donc un champ de tenseur unique dit de concentration permettant d'exprimer une liaison entre les tenseurs des contraintes et des déformations dans les deux échelles Macro et Micro. Les champs ϵ et σ sont définis respectivement en fonction de E et Σ par :

► déformation homogène au contour :

$$\epsilon(\underline{x}) = A(\underline{x}) : E \quad (\text{I.5})$$

► contrainte homogène au contour :

$$\sigma(\underline{x}) = B(\underline{x}) : \Sigma \quad (\text{I.6})$$

où A et B sont simplement des tenseurs de quatrième ordre, dits tenseurs de localisation ou de concentration de déformation respectivement de contrainte. Ils dépendent en fait non seulement de la position \underline{x} , mais aussi de tout un ensemble de paramètres géométriques et mécaniques du milieu. La moyenne de ces tenseurs est un tenseur identité d'ordre quatre (condition de cohérence); de plus ils sont symétriques :

$$\langle B \rangle = I, \quad \langle A \rangle = I, \quad A_{ijkl} = A_{jikl} = A_{ijlk}, \quad B_{ijkl} = B_{jikl} = B_{ijlk} \quad (\text{I.7})$$

En utilisant la loi de comportement (I.1) et la relation (I.6), on obtient :

$$\epsilon(\underline{x}) = s(\underline{x}) : \sigma(\underline{x}) = s(\underline{x}) : B(\underline{x}) : \Sigma \quad (\text{I.8})$$

Macroscopiquement, cette relation devient :

$$E = \langle \epsilon(\underline{x}) \rangle = \langle s(\underline{x}) : B(\underline{x}) : \Sigma \rangle = \langle s(\underline{x}) : B(\underline{x}) \rangle : \Sigma \quad (\text{I.9})$$

Si on compare ce résultat avec l'équation (I.2), on obtient l'expression du tenseur des complaisances homogénéisées macroscopiquement sous la forme :

$$S^{hom} = \langle s(\underline{x}) : B(\underline{x}) \rangle \quad (\text{I.10})$$

En déformations homogènes au contour et de manière analogue, on obtient l'expression du tenseur des modules homogénéisés sous la forme :

$$C^{hom} = \langle c(\underline{x}) : A(\underline{x}) \rangle \quad (\text{I.11})$$

On note bien à partir des deux équations I.10 et I.11 que la loi des mélanges (modèle de Voigt et Reuss) qui stipule que *les propriétés homogénéisées d'un mélange considérées comme les propriétés de chaque phase pondérées par leurs fractions volumiques*, n'a aucun sens sauf si les tenseurs de localisation A et B se réduisent à l'identité.

D'après les équations I.10 et I.11, le tenseur des modules effectifs (des complaisances) est donc égal à la moyenne du tenseur des modules (complaisances) des constituants pondéré par le tenseur de localisation des déformations A (de contraintes B).

I.4 Différentes approches d'homogénéisation des matériaux hétérogènes

Selon [Bornert et al. \(2001\)](#), on distingue deux approches pour décrire, modéliser et caractériser la microstructure d'un matériau hétérogène. Ces approches ont généralement un but de déduire le comportement macroscopique lors de l'application des différentes sollicitations mécaniques, thermiques, magnétiques, etc. On distingue :

(1) L'approche phénoménologique qui consiste à effectuer des expériences sur des échantillons du matériau, puis déterminer une forme mathématique de la loi de comportement qui reproduit au mieux les résultats expérimentaux. Cette démarche n'est pas toujours simple, surtout dans la détermination de la forme mathématique associée au comportement macroscopique. Cette méthode de caractérisation expérimentale nécessite plusieurs essais, donc coûteuse. Ce type d'approches expérimentales sont introduites en premier lieu par Georges Green (1793-1841), qui propose un concept purement phénoménologique pour déterminer le comportement d'objets élastiques. Selon cette théorie, on ne voit le problème qu'à une seule échelle qui est celle de l'objet macroscopique.

(2) Une alternative à l'approche phénoménologique est l'utilisation des techniques

d'homogénéisation. Avec cette méthode, on ne cherche pas à masquer la morphologie microscopique des matériaux mais, on cherche à tirer partie d'une connaissance microscopique et de profiter du caractère multi-échelle dont l'usage est de comprendre le comportement macroscopique. Cette approche a pour but de réduire la taille de la microstructure à un élément de volume représentatif, connu sous le nom du *VER*.

I.4.1 Notion de VER dans un matériau hétérogène

La description d'un matériau doit être suffisamment riche et réaliste pour estimer correctement les comportements macroscopiques. Pour cela, on cherche la taille et la description géométrique suffisantes de la microstructure représentative pour la propriété que l'on souhaite estimer. On parle ici de *VER*.

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

Plusieurs définitions ont été proposées pour le concept *VER*. Ces définitions sont regroupées dans le travail de [Gitman et al. \(2007\)](#). Par exemple la taille du *VER* se doit d'être beaucoup plus grande que la plus grosse des hétérogénéités et négligeable aussi devant la taille de la microstructure. Il faut noter ici que l'utilisation des méthodes d'homogénéisation nécessite la connaissance de la taille du *VER*. La figure I.8 montre des exemples des *VERs* dans une microstructure biphasique étudiée par [Gitman et al. \(2007\)](#). Dans la même microstructure on peut distinguer plusieurs situations, dites réalisations, pour représenter la taille d'un *VER*. La différence entre ces réalisations est le nombre des hétérogénéités entouré par le volume, sa forme, leur disposition et finalement la distribution et la nature.

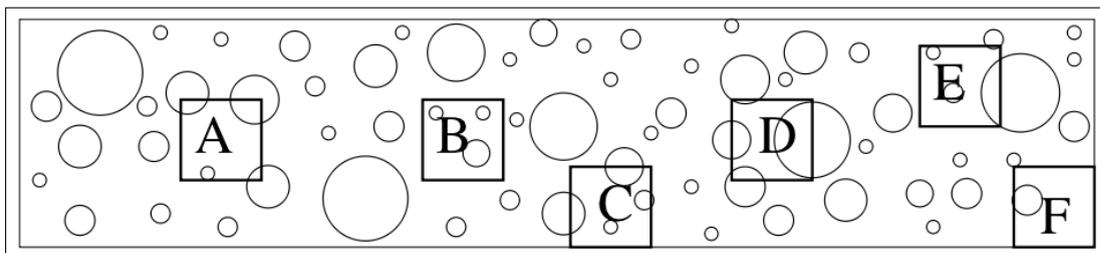


FIGURE I.8 – Exemple des *VERs* d'une microstructure hétérogène, [Gitman et al. \(2007\)](#).

Toutefois, afin de répondre à des questions sur l'existence et la définition d'un *VER*, on présente sur le tableau I.1 quelques définitions proposées dans la littéra-

ture :

Références	Définitions
Sab (1992)	C'est un volume suffisamment grand pour que la détermination des propriétés effectives à partir de ce volume ne dépend pas du type de conditions aux limites utilisées.
Drugan and Willis (1996)	It is the smallest material volume element of the composite for which the usual spatially constant (overall modulus) macroscopic constitutive representation is a sufficiently accurate model to represent mean constitutive response.
Terada and Kikuchi (1998)	C'est un volume cubique suffisamment grand par rapport à la microstructure et suffisamment petit par rapport à l'échelle macroscopique.
Evesque (2000)	Le <i>VER</i> doit être assez grand par rapport à la taille des grains afin de définir les quantités globales telles que la contrainte ou la déformation, mais cette dimension devrait être également assez petite pour ne pas cacher l'hétérogénéité macroscopique.
Kanit et al. (2003)	Une définition purement statistique et numérique. La taille est liée aux paramètres morphologiques, mécaniques et statistiques de la microstructure ; comme la fraction volumique, le contraste, les propriétés mécaniques (élasticités et plasticités) et l'erreur absolue.

TABLE I.1 – Définitions de VER proposées par les scientifiques.

Il est à noter que le VER est un paramètre qui est d'importance primordiale pour l'étude numérique des matériaux hétérogènes. Il est de nature *élémentaire* parce qu'il est considéré comme un point matériel du milieu équivalent et *représentatif* parce qu'il est possible de déterminer un seul comportement macroscopique unique pour ce volume. Pour être représentatif, ce VER doit contenir le maximum des hétérogénéités, et pour être élémentaire, le volume doit être petit devant la structure. Deux conditions doivent guider et piloter le choix de l'échelle et les dimensions de VER : (1) ne pas descendre à un niveau plus fin et (2) ne pas monter jusqu'à l'échelle macroscopique.

Dans ce qui suit, nous présentons les différentes contributions sur la caractérisation des matériaux hétérogènes par les approches d'homogénéisation basées sur la notion du VER. Nous présentons aussi l'ensemble des expressions analytiques de quelques approches les plus répandues dans ce domaine. La description de chaque

approche est présentée dans la partie *Annexe* de la thèse.

I.4.2 Approches d'homogénéisation analytique et numérique

Nous proposons dans cette partie une présentation générale des différentes approches et méthodes d'homogénéisation. On choisit de classer ces méthodes en deux grandes familles, les méthodes d'homogénéisation analytiques et les méthodes d'homogénéisation numériques.

I.4.2.1 Homogénéisation analytique

Les méthodes d'homogénéisation analytiques sont classées en deux groupes : les bornes et les modèles. Les démonstrations mathématiques de chaque approche, mécanique ou thermique, sont présentées dans le livre intitulé *Micromechanics of heterogeneous materials*, par [Buryachenko \(2006\)](#).

Pour estimer les propriétés mécaniques effectives d'un matériau hétérogène, il existe beaucoup de méthodes d'homogénéisation dans la bibliographie. On propose ici de présenter les expressions de quelques bornes et modèles analytiques utilisés pour la modélisation analytique. L'étude se limite au cas d'un matériau biphasé renforcé par des inclusions de comportement linéaire discontinu et de fraction volumique p , dispersées dans une matrice homogène, linéaire et continue.

On considère un milieu élastique, composé d'une matrice isotrope de module de compression k_m , de module de cisaillement μ_m , de coefficient de poisson ν_m et d'un module de Young E_m renforcé par une distribution aléatoire des inclusions de modules k_i , μ_i , ν_i et E_i . Nous donnons les expressions des bornes de différents ordres et les modèles disponibles dans la littérature. Nous avons présenté les méthodes suivantes : les bornes d'ordre 0, les bornes d'ordre 1 de [Voigt \(1889\)](#) et [Reuss \(1929\)](#) et les bornes d'ordre 2 de [Hashin and Shtrikman \(1963\)](#) (HS) ainsi que la solution diluée présentée dans [Aboudi \(1991\)](#), le modèle Auto-cohérent de [Mori and Tanaka \(1973\)](#) (MT) et le modèle Auto-cohérent généralisé de [Christensen and Lo \(1979\)](#) (GSC).

Le tableau [I.2](#) regroupe l'expression de quelques approches analytiques utilisées pour l'estimation de coefficient de compression k . Dans le cas de coefficient de cisaillement μ , les expressions mathématiques sont présentées respectivement sur le tableau [I.3](#). La description générale de chaque approche et les constantes A , B , C , α et β sont données dans la partie *Annexe* de cette thèse. On rappelle que dans le cas d'un matériau hétérogène avec n -phase, l'expression des approches citées sont données dans

Tucker and Liang (1999), Zaoui (1999) et Bornert et al. (2001).

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

TABLE I.2 – Expression mathématique des approches d’homogénéisation analytique pour le coefficient de compression k .

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

TABLE I.3 – Expression mathématique des approches d’homogénéisation analytique pour le coefficient de cisaillement μ .

I.4.2.1.1 Comparaison entre les modèles et les bornes analytiques

Dans cette partie, nous comparons les résultats issus des différentes méthodes d’homogénéisations présentées dans le cas de matériaux hétérogènes constitués de deux phases. On présente sur la figure I.9 un exemple de variation de coefficient de compression k , en fonction de la fraction volumique des inclusions. L’ensemble des calculs obtenus par les différentes approches analytiques ont été déterminés pour un contraste $c = 100$. A partir des résultats, on remarque que les bornes d’ordre 0 et 1 n’estiment pas les propriétés mais encadrent les modules élastiques. En effet,

ces bornes fournissent une valeur maximale et une autre minimale des propriétés effectives.

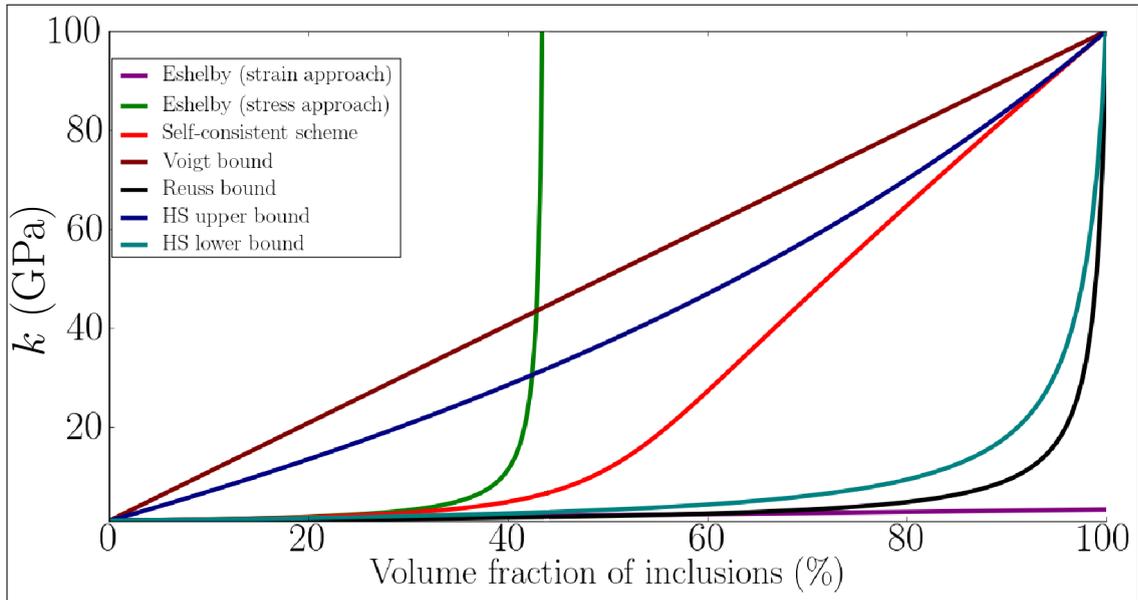


FIGURE I.9 – Comparaison entre les différentes approches d'homogénéisation analytique, [Dirrenberger \(2012\)](#).

Pour conclure cette partie concernant les approches d'homogénéisation analytique, on note que le travail de [Tucker and Liang \(1999\)](#) donne une description générale des modèles analytiques utilisés pour le comportement linéaire d'un matériau hétérogène, comme par exemple les bornes de Voigt-Reuss (VR) et les bornes de Hashin-Shtrikman (HS) et les modèles de SC, Eshelby, MT, GSC, etc.

Il faut noter aussi que le choix de tel ou tel modèle dépend des propriétés du milieu et de la morphologie de la microstructure. Comme l'expliquent [Gilormini and Bréchet \(1998\)](#) dans leur travail "*Which material for which model? Which model for which material?*", le choix d'un modèle est gouverné par plusieurs conditions comme par exemple la géométrie du milieu, le contraste entre les propriétés, la fraction volumique, la distribution et l'orientation des inclusions et le comportement de chaque phase.

Dans tous les modèles et les bornes analytiques, les estimations proposées sont données pour divers matériaux hétérogènes et pour des formes d'inclusions bien spécifiques, et peuvent donc être notées comme des estimations asymptotiques. L'intérêt est donc d'utiliser des solutions analytiques tant que la géométrie reste simple. Pour les fractions volumiques assez importantes, on observe souvent une divergence entre les modèles analytiques. Cette divergence serait liée à l'augmentation des interactions entre les inclusions à cause de la diminution de leurs espacements. Ils ne sont

donc pas adaptés au cas des configurations plus complexes avec des fractions volumiques plus élevées. De ce point de vue, les approches numériques basées sur la notion du VER constituent une alternative du fait de l'important développement des outils de calculs.

I.4.2.2 Homogénéisation numérique

La mécanique des matériaux hétérogènes s'est longtemps limitée aux approches analytiques. Les progrès considérables des moyens de calcul ont favorisé l'utilisation de la simulation numérique. Trois type de microstructures ont été utilisée dans cette approche. Une microstructure virtuelle générée par les algorithmes de la morphologie mathématique, une microstructure réelle obtenue par le microscope ou par la tomographie et une microstructure périodique basée sur des cellules élémentaires. La figure I.10 présente la méthodologie et le principe de l'homogénéisation numérique basée sur la notion du VER. On remarque que la première étape consiste au choix du VER puis la définition de la géométrie globale du matériau et finalement vient le maillage et la simulation numérique du comportement.

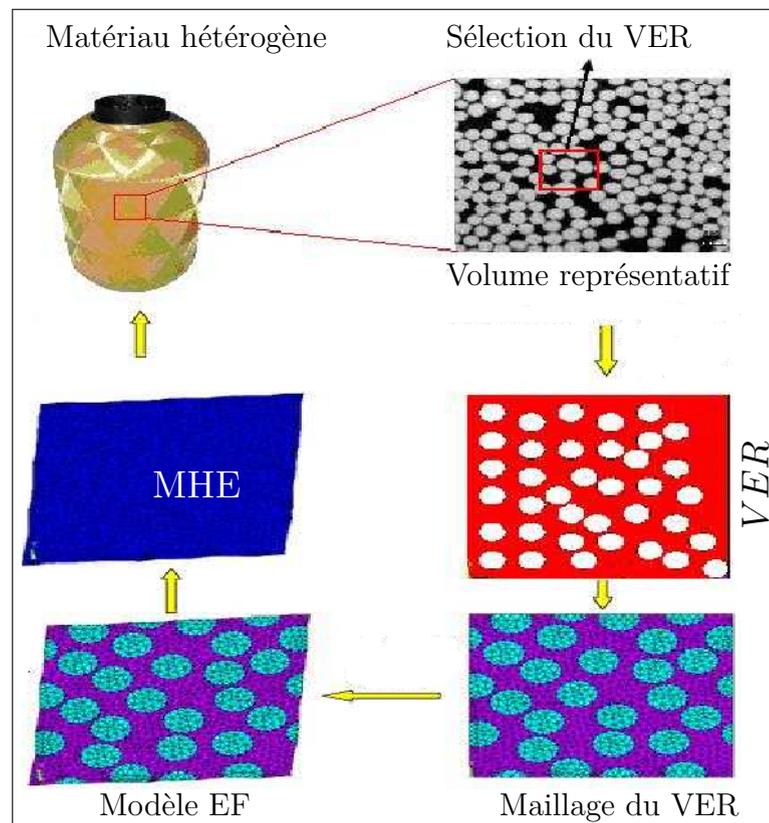


FIGURE I.10 – Méthodologie de l'utilisation de l'approche numérique, .

I.4.2.2.1 Approches numériques basées sur les microstructures virtuelles

En ce qui concerne l'étude du comportement mécanique des milieux hétérogènes par les approches numériques basées sur la notion du VER, on peut citer les travaux de ; [Segurado and Llorca \(2002\)](#), [Segurado and Llorca \(2003\)](#), [Minshnaevsky Jr \(2004\)](#), [Segurado and Llorca \(2006\)](#), [Kari et al. \(2007a\)](#), [Kari et al. \(2007b\)](#) and [Kari et al. \(2008\)](#). Ces travaux se sont intéressés plus particulièrement au comportement élastique des matériaux renforcés par des particules sphériques dures ou sous forme de vide (pores). Ils mettent en évidence le fait que la taille du VER et de la fraction volumique, ont une influence remarquable sur les propriétés effectives, comparées aux autres paramètres de la microstructure. L'étude se fait sur des volumes du matériau finis contenant une vingtaine des particules sphériques (figure [I.11](#)). La figure [I.12](#) montre un exemple de résultats concernant l'effet de la fraction volumique et de la taille du VER sur les propriétés effectives. On note que les propriétés élastiques augmentent avec l'augmentation de la fraction volumique. L'erreur obtenue sur les propriétés effectives diminue avec l'augmentation de la taille du *VER*. La convergence est alors assurée par des volumes de grande taille avec une erreur absolue faible. A partir de ces contributions, et pour les inclusions fibreuses, un rapport entre la longueur du volume L et le diamètre des particules D a été proposé pour une bonne convergence. On note qu'un rapport de $L/D \geq 10/3$ est largement suffisant pour estimer une propriété effective.

L'effet de la nature des particules sur le comportement élastique des matériaux hétérogènes a été identifié par [Segurado and Llorca \(2002\)](#). Deux types des particules sphériques ont été considérées : particules rigides et d'autre sous forme des pores. La variation des modules élastiques en fonction de la proportion des particules a été étudiée. La figure [I.13](#) présente l'ensemble des résultats obtenus par la simulation. On remarque que dans le cas des particules rigides, les propriétés élastiques augmentent avec l'augmentation de la fraction volumique. A l'inverse des pores où le comportement macroscopique diminue en fonction de la proportion.

Dans d'autres investigations, l'influence de la distribution des inclusions sur les propriétés effectives a été envisagée par [Han et al. \(2001\)](#) puis [Segurado and Llorca \(2003\)](#), en utilisant les approches numériques. La distribution des particules est purement aléatoire, mais les positions des particules sphériques changent dans chaque microstructure. Aucun contact entre les sphères voisines n'est considéré. Les simulations numériques ont montré que l'influence de la distribution de renfort sur le comportement macroscopique est faible. De même dans [Segurado and Llorca \(2006\)](#) la distribution spatiale des particules sur le comportement élasto-plastique du matériau a une influence négligeable.

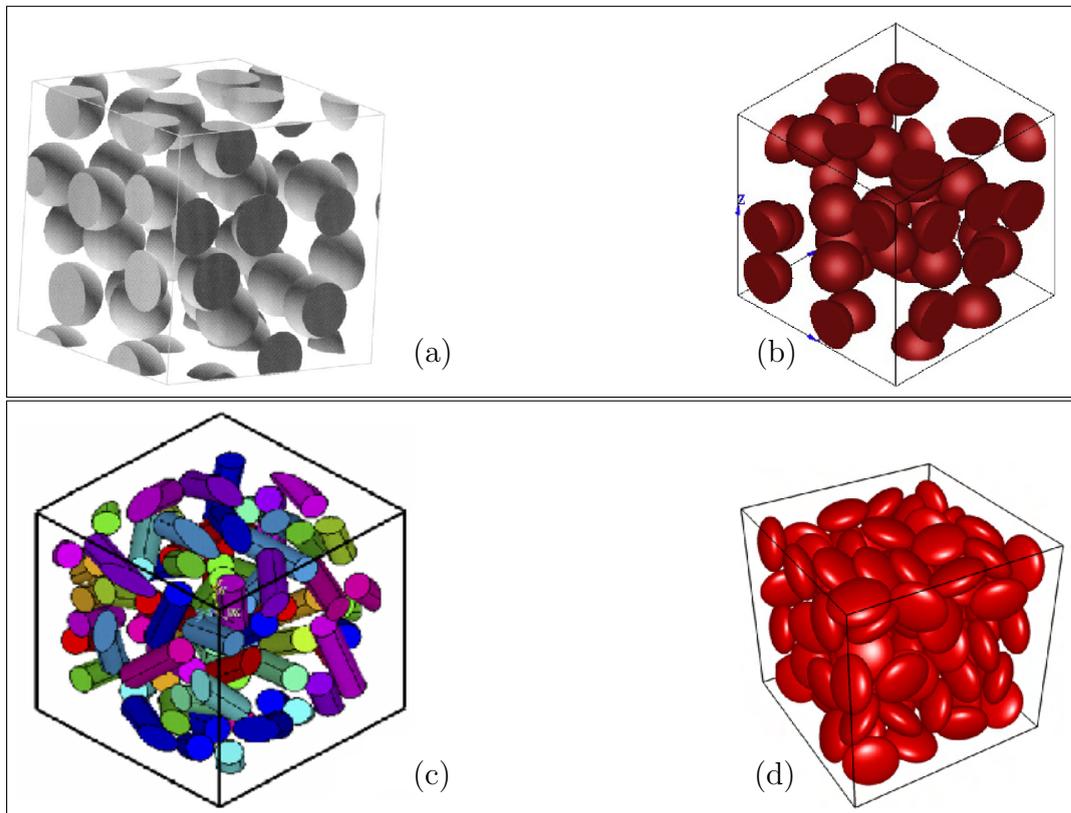


FIGURE I.11 – Microstructures virtuelles utilisées pour la simulation : (a) [González et al. \(2004\)](#), (b) [Guo et al. \(2014\)](#), (c) [Kari et al. \(2007b\)](#) et (d) [Tawerghi and Yi \(2009\)](#)

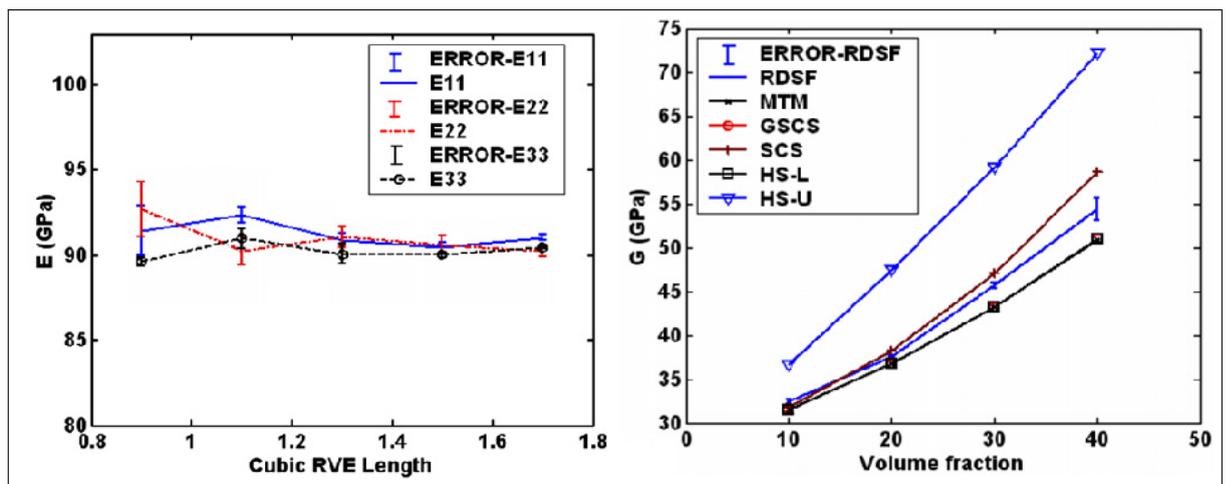


FIGURE I.12 – Variation des propriétés effectives en fonction de : (a) VER et (b) fraction volumique, [Kari et al. \(2007b\)](#).

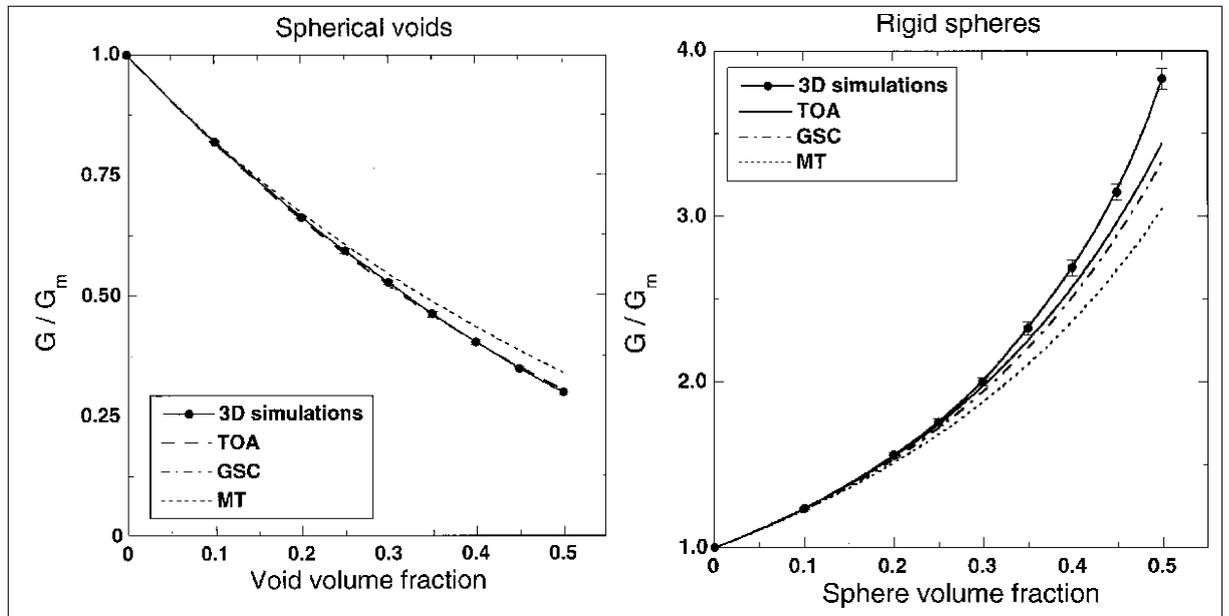


FIGURE I.13 – Variation des propriétés effectives en fonction de la fraction volumique, [Segurado and Llorca \(2002\)](#).

On peut cependant noter que les approches numériques basées sur la méthode des éléments finis ont été utilisées pour d'autres types de microstructures virtuelles, comme le cas des mosaïques de Voronoi étudié par [Kanit et al. \(2003\)](#), figure I.14.a, et l'étude de la plasticité macroscopique des polycristaux par [Barbe et al. \(2001a\)](#) et [Barbe et al. \(2001b\)](#), figure I.14.b.

Récemment, la caractérisation des matériaux par l'approche numérique a été utilisée pour d'autre type de microstructures hétérogènes avec une morphologie très compliquée et architecturée (figure I.14.c). Par exemple, [Minh et al. \(2011\)](#) et [Minh et al. \(2013\)](#) ont étudié le comportement d'un matériau hétérogène représenté par une microstructure architecturée, pour des applications dans le domaine des balistiques.

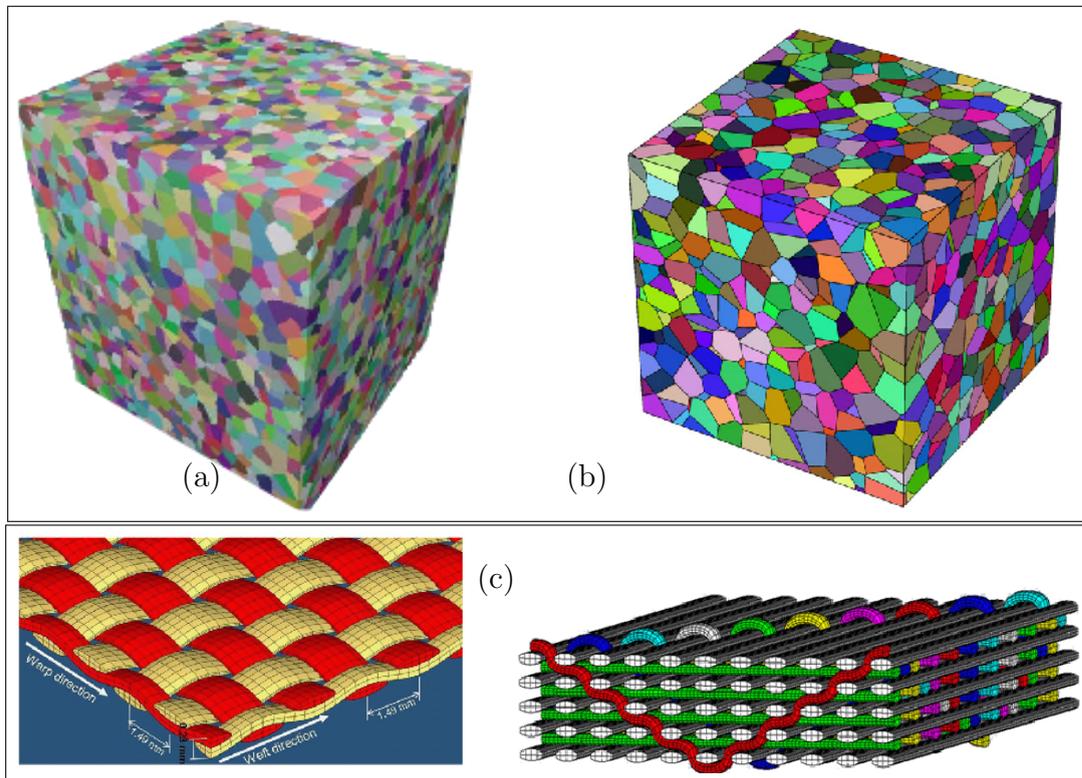


FIGURE I.14 – Microstructures de morphologie complexe pour l’approche numérique, (a) Kanit et al. (2003), Quey et al. (2011) et (c) Minh et al. (2013).

I.4.2.2.2 Approches numériques basées sur les microstructures réelles

Les observations microscopiques fournissent des vues bidimensionnelles (2D) d’un échantillon. Elles produisent également des informations sur la distribution des hétérogénéités dans la matrice. Dans le cas général, la microstructure des matériaux hétérogènes contient un grand nombre d’hétérogénéités, exige un effort considérable. Cependant, la tomographie peut être aussi utilisée.

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

Lors de sa thèse, Jean (2009) s’est intéressée au cas des élastomères chargés par le noir du carbone, de la nanostructure au macro-comportement global. Dans cette investigation, deux types de microstructures ont été modélisés par les approches numériques. La première est réelle obtenue par le MEB, et la seconde est obtenue par les modèles aléatoires de type schéma Booléen. La taille du *VER* numérique de

l'élastomère, dans les deux microstructures, a été déterminée en utilisant des lois statistiques. La figure I.15 montre un exemple des microstructures réelles (VER), obtenues par la tomographie ou par le MEB. Ces microstructures ont été utilisées dans la simulation numérique des comportements mécaniques.

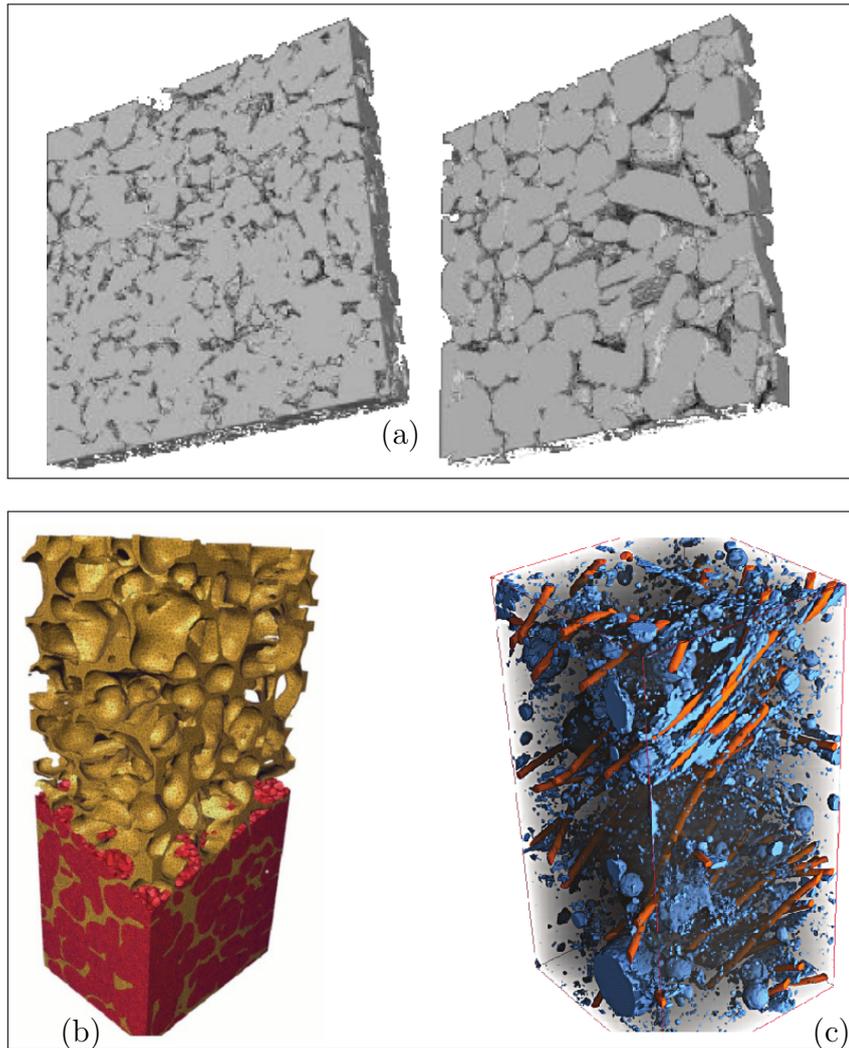


FIGURE I.15 – Microstructures (VERs) de morphologie réelle pour l'approche numérique : (a) Kanit et al. (2006), (b) Ding (2012) et (c) Altendorf (2011).

Pour introduire les microstructures réelles dans une approche numérique, un ensemble des étapes de binarisation et de segmentation sont nécessaires, en utilisant des algorithmes dédiés à l'amélioration des images réelles. La figure I.16 montre l'ensemble des opérations pour préparer une microstructure réelle pour effectuer une simulation numérique. L'organigramme de la figure I.17 donne un aperçu de traitement d'une image réelle pour le maillage et pour la simulation numérique.

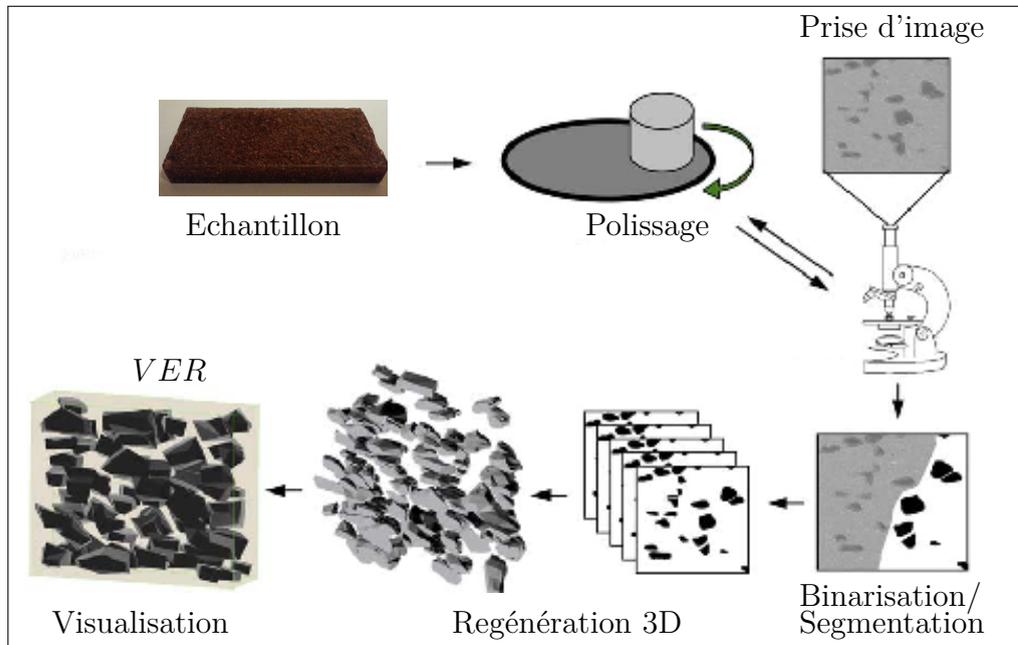


FIGURE I.16 – Etape de préparation d’une microstructure réelle pour la simulation.

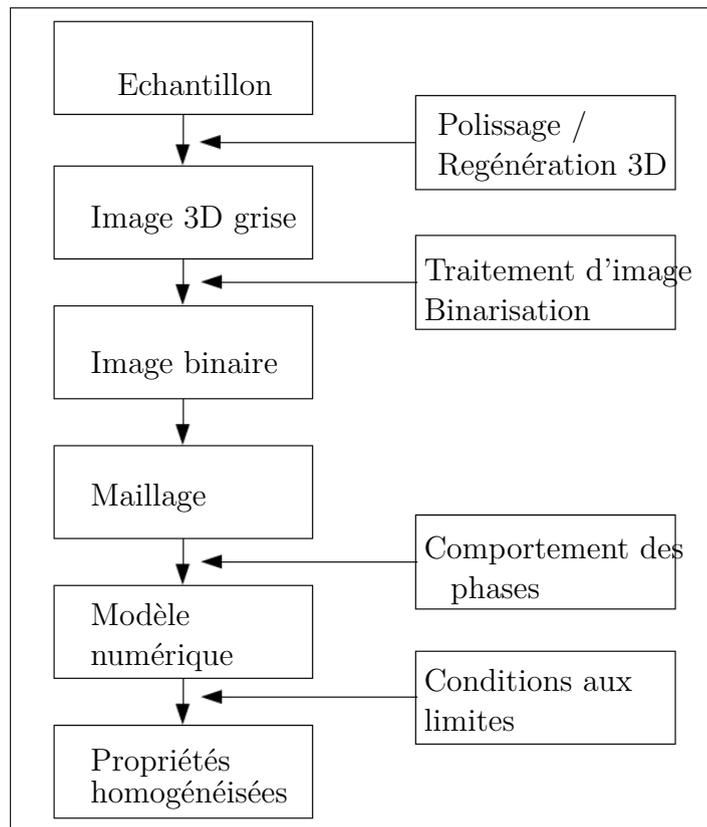


FIGURE I.17 – Schéma de la procédure de traitement d’une microstructure réelle pour la simulation.

I.4.2.2.3 Approche numérique basée sur les microstructures périodiques

Pour le cas des milieux avec une microstructure périodique, certains travaux développent d'autres approches numériques hors EF, comme l'utilisation de la transformée de Fourier rapide (FFT). C'est le cas par exemple de [Willot and Jeulin \(2009\)](#) concernant les microstructures contenant des pores de forme sphérique, et le cas de [Michel et al. \(1999\)](#) pour les microstructures périodiques de forme hexagonale.

Il y a plusieurs raisons de s'intéresser aux matériaux hétérogènes à microstructure périodique, la première étant que cette périodicité se rencontre fréquemment dans les composites artificiels. La seconde raison est que les microstructures périodiques se prêtent bien aux approches numériques, sur des volumes élémentaires finis. Les propriétés effectives de matériaux hétérogènes présentant un agencement périodique de leurs hétérogénéités. Les calculs se font sur des cellules élémentaires qui permettent de reconstituer par translation le matériau à l'infini. La figure I.18 montre des exemples de microstructures périodiques naturelles ou artificielles. Pour ce genre de microstructures, les propriétés sont complètement déterminées à partir d'une cellule unitaire qui est générée par répétition.

D'après la figure I.18, le milieu périodique est défini par une cellule et trois vecteurs de translation. La forme de la cellule pour la modélisation n'est pas définie de façon unique, [Michel et al. \(1999\)](#). Comme le montre la figure I.18, on peut distinguer dans un réseau hexagonal, trois cellules 1, 2 et 3, de forme différente. Le comportement effectif est calculé à partir de différentes cellules unitaires de la microstructure devraient coïncider. Le choix de la cellule est souvent motivé par les symétries géométriques qui peuvent être utilisées pour simplifier le calcul numérique. Dans le réseau hexagonal représenté sur la figure I.18 la cellule unité la plus simple est celle numérotée par 1.

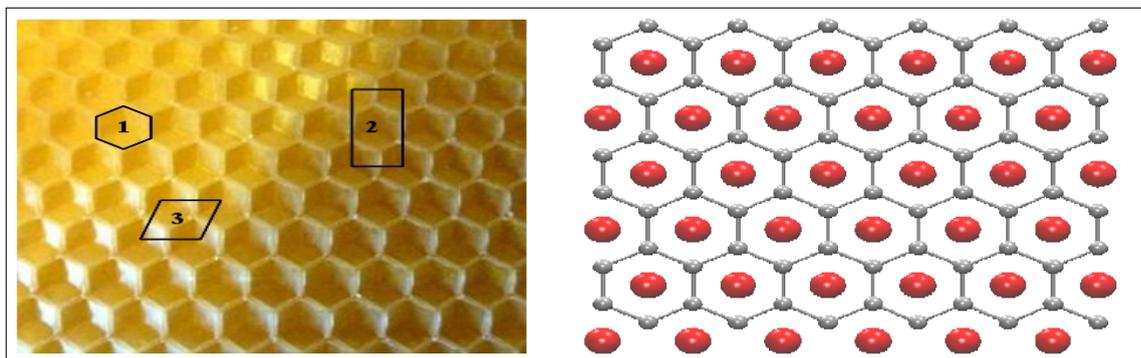


FIGURE I.18 – Exemple de microstructures Macro et Micro périodiques d'un réseau hexagonal : (a) cire d'abeille et (b) microstructure électronique de Zr/Br_2 .

I.4.2.2.4 Choix des conditions aux limites pour l'approche numérique

Il faut noter aussi que l'utilisation des approches numériques dans l'homogénéisation des microstructures hétérogènes, dépend en plus de la taille du *VER* et de la microstructure, du choix des conditions aux limites appliquées sur les volumes. Plusieurs contributions ont été réalisées autour de ce sujet. Généralement, on distingue les conditions aux limites homogènes au contour de type statique (SUBC) ou cinématique (KUBC), les conditions périodiques (PBC) et les conditions mixtes (CLM). La comparaison entre les différentes conditions a été présentée dans plusieurs travaux, spécialement dans [Huet \(1990\)](#) et [Hazanov and Huet \(1994\)](#), où ils ont montré que les variations des propriétés estimées par les CLM sont entre les résultats de KUBC et SUBC.

Pour les microstructures aléatoires, [Kanit et al. \(2003\)](#) puis [EL Houdaigui et al. \(2007\)](#) et [Nguyen et al. \(2011\)](#) ont étudié l'influence de KUBC, SUBC et PBC sur les propriétés effectives des matériaux fortement hétérogènes. Les résultats de la simulation sont présentés sur la figure [I.19.a](#). On remarque que pour les petits volumes, les résultats obtenus par SUBC convergent vers la borne analytique de Reuss, et ceux obtenus par KUBC convergent vers la borne analytique de Voigt. Ils ont montré aussi qu'entre les deux conditions, on trouve les résultats de PBC qui convergent rapidement. Il apparaît que dans un volume contenant un grand nombre des hétérogénéités (un VER), les trois conditions aux limites donne la même valeur de la propriété effective.

De la même façon, la figure [I.19.b](#) montre les variations des propriétés effectives en fonction de la taille de la microstructure pour le coefficient de cisaillement μ . Elle présente aussi une comparaison entre les valeurs obtenues par les différentes conditions aux limites. Des résultats similaires ont été obtenus par [Jean \(2009\)](#) dans le cas de calcul de la conductivité thermique sur des microstructures réelles et virtuelles.

D'après les auteurs, les volumes indiqués sur l'axe des abscisses est équivalent à un nombre d'hétérogénéité (grains, pores, sphères, fibres). Les conditions périodiques donnent une bonne estimation dès quelque grain ($\simeq 40$ grains), mais à condition de prendre plusieurs réalisations ($\simeq 1000$ réalisations). Pour les autres conditions (KUBC et SUBC), il faut considérer une taille de volume 250 fois plus grande que celui des PBC pour atteindre la même convergence. Pour le cas de [EL Houdaigui et al. \(2007\)](#), la convergence des propriétés est assurée par des volumes contenant $\simeq 100$ grains avec PBC, et un volume $\simeq 2000$ grains pour les KUBC et SUBC. D'après ces résultats, on peut déduire aussi que la taille du *VER* dépend de la propriété, de la nature du matériau et du contraste des phases.

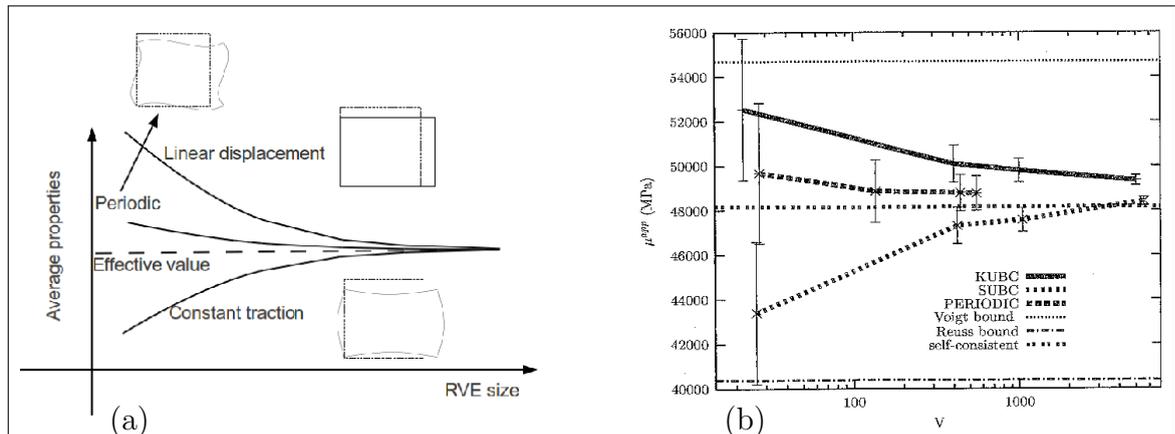


FIGURE I.19 – Variation des modules avec les conditions aux limites imposées en fonction du V : (a) Nguyen et al. (2011) et (b) EL Houdaigui et al. (2007).

Il est à noter que l'application des PBC sur les maillages des microstructures permet d'avoir une convergence rapide. Ces maillages, qui n'a aucune raison a priori d'être périodique, est ensuite nécessite un traitement pour le rendre périodique. Cette étape consiste à créer une correspondance entre les noeuds d'une facette et de son opposée homologue dans le même volume. Un exemple de cette correspondance est présentée sur la figure I.20.

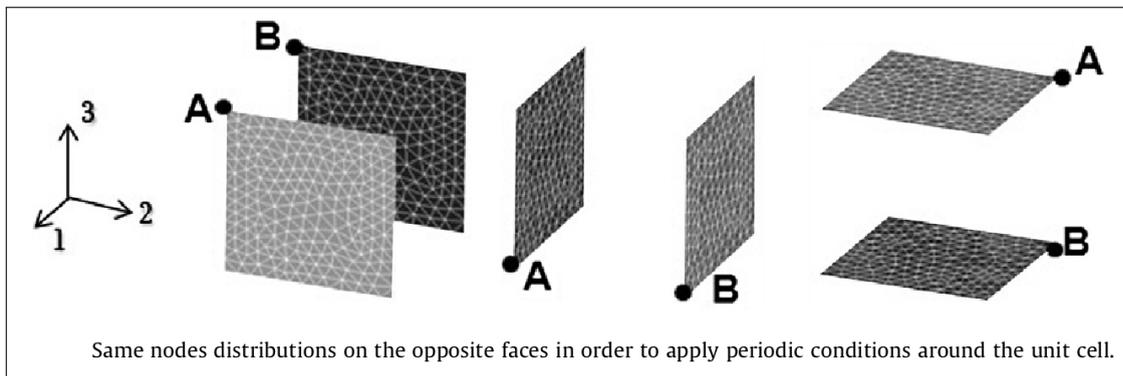


FIGURE I.20 – Correspondance des noeuds en PBC, Grasset-Bourdel et al. (2011).

I.5 Synthèse

Deux aspects importants de caractérisation des matériaux hétérogènes ont été présentés. Un est dit *inductif* et l'autre de nature *déductive*. La nature déductive qui cherche le lien entre le comportement macroscopique et les processus au niveau microscopiques a été choisi comme l'objectif final pour l'homogénéisation des matériaux étudiés dans ce travail. Dans ce chapitre, nous avons d'abord rappelé les étapes de l'homogénéisation, les méthodes de changement d'échelle et ensuite, les approches micromécaniques ainsi que leurs expressions analytiques. Les bornes encadrent les propriétés effectives, et les modèles donne des estimations approchées. Il existe plusieurs types de bornes qui se différencient par la finesse de description des échelles. Les estimations analytiques permettent, sous certaines hypothèses, d'estimer les propriétés effectives, pour quelques types de matériau hétérogène.

L'approche numérique basée sur la notion du *VER* est robuste pour la caractérisation des microstructures aléatoires. Les conditions de périodicité ont été choisies pour la simulation, à cause de sa convergence rapide. La démarche de caractérisation suivie dans cette étude est basée sur une approche numérique. Cette méthode a été développée pour le comportement élastique des élastomères par [Jean \(2009\)](#) puis appliquée aux fibres courtes par [Oumarou et al. \(2012\)](#).

Deuxième partie

Caractérisation, modélisation,
visualisation, analyse
morphologique et design des
microstructures

Chapitre II

Homogénéisation numérique : outils et méthodologie

"Bien modéliser pour mieux comprendre et mieux visualiser".

Résumé :

Le but de ce chapitre est de décrire la méthodologie de génération, de visualisation et de maillage des microstructures 3D. Cette partie est consacrée aux microstructures virtuelles biphasiques, contenant une distribution aléatoire des inclusions sphériques ou ellipsoïdales. Les trois étapes nécessaires pour une homogénéisation numérique seront développées : La génération des images, le maillage des images et les calculs numériques.

Sommaire

II.1 Objectifs	50
II.2 Génération des microstructures	51
II.3 Visualisation 3D des microstructures	56
II.4 Maillage 3D des microstructures	60
II.5 Problématiques liées au maillage éléments finis	62
II.6 Synthèse	63

II.1 Objectifs

Dans cette étude, la génération, la visualisation 3D et le maillage de microstructures aléatoires sont développés. On considère deux types de microstructures virtuelles des matériaux hétérogènes : (i) Une microstructure contenant des inclusions sans aucun contact entre eux et (ii) Une microstructure contenant des inclusions avec une interconnexion des particules voisines. Les algorithmes de la morphologie mathématique ont été utilisés pour générer ces microstructures.

Le matériau virtuel étudié est un matériau hétérogène biphasé, constitué d'une matrice renforcée par des inclusions de forme sphérique ou ellipsoïdale. La distribution des inclusions dans l'espace est aléatoire. Chaque phase est considérée linéaire élastique et homogène. Cela sous-entend que les inclusions sont bien dispersées dans la matrice et elles ont toutes le même rayon. Une distance de répulsion entre les inclusions (il n'y a pas de phénomènes d'aggrégation) est imposée pour les microstructures de type schéma de sphères dures (particules non-interconnectées). Cette distance a été éliminée dans le cas de schéma Booléen des sphères (particules interconnectées).

On rappelle que le schéma Booléen est l'union des particules dans une matrice. Ce schéma, introduit par [Matheron \(1975\)](#), est bien adapté à la description d'une microstructure aléatoire avec une interconnexion des inclusions. Pour les microstructures virtuelles, nous présentons dans la figure II.1 des exemples de morphologies générées à base de schéma Booléen et d'autres à base de schéma de sphères dures.

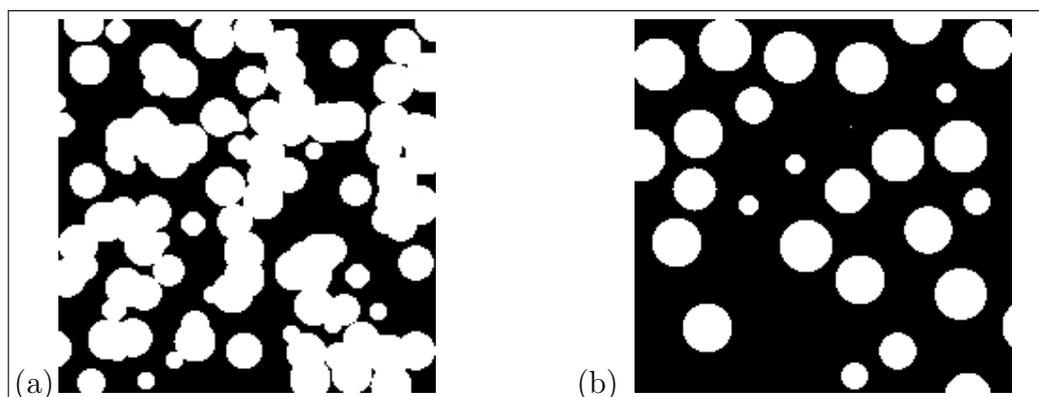


FIGURE II.1 – Microstructures aléatoires 2D : (a) schéma Booléen et (b) schéma de sphères dures.

Il apparaît que dans le modèle Booléen, il peut y avoir trois configurations différentes : (i) un contact des inclusions, (ii) une inter-pénétration des inclusions ou (iii) parfois aucun contact. À la différence d'un schéma de sphères dures dont lequel

l'implantation des inclusions est contrôlée par une distance de répulsion entre deux centres voisins, le schéma Booléen est généré sans aucune distance de répulsion.

II.2 Génération des microstructures

Dans notre étude, les microstructures 3D ont été générées par le processus aléatoire de Poisson. Ce processus est bien adapté aux microstructures aléatoires et isotropes. Il est la base de la plus part des modèles probabilistes. Ce processus a été utilisé par Kanit et al. (2003) pour la génération des microstructures aléatoires des mosaïques, puis par Jean (2009) pour la génération des microstructures des élastomères renforcés par le noir de carbone. L'intérêt des modèles aléatoires est de permettre facilement la création de nouveaux matériaux virtuels sans passer par les morphologies réelles des microscopes ou de la tomographie.

La distribution des particules dans le volume de la microstructure est générée de la façon suivante : les centres M_i des sphères (respectivement ellipses) sont générés aléatoirement dans l'espace selon un processus de Poisson. Cependant, pour les microstructures sans contact ni inter-pénétration des particules, nous imposons une distance de repulsion a afin d'empêcher le contact. Si la position M_i de l'inclusion ne satisfait pas la distance minimale de répulsion, elle est remplacée de nouveau jusqu'à ce que la condition soit vérifiée dans une autre position du volume. Des nouvelles inclusions sont rajoutées par la même façon jusqu'à ce qu'on obtient la fraction volumique souhaitée par la même distance a . Il faut noter que ce type de microstructures est connu sous le nom du schéma de sphères dures. Que ce soit dans le cas des inclusions sphériques ou ellipsoïdales, quatre configurations de positionnement de deux inclusions voisines dans une matrice sont possibles. La figure II.2 montre les différentes possibilités. On rappelle que, pour une microstructure à base du schéma de sphères dures, la seule configuration possible est celle présentée sur la figure II.2.a. Au contraire, les quatres configurations sont possibles dans le cas des microstructures à base d'un schéma Booléen.

Il est clair qu'il est difficile de générer des fractions volumiques supérieures à 30% en imposant une distance de répulsion. Lorsqu'on souhaite simuler des microstructures ayant une densité de particules supérieure, il faut implanter les sphères dans un ordre cristallographique (empilement cristallin). Par exemple, une distribution de type cubique face centrée permet d'atteindre une fraction volumique de $\simeq 74\%$, mais cette microstructure ne reste plus purement aléatoire. Une deuxième méthode pour générer les microstructures ayant des fractions volumiques plus importantes est d'utiliser des algorithmes plus sophistiqués comme l'algorithme SA (Simulated An-

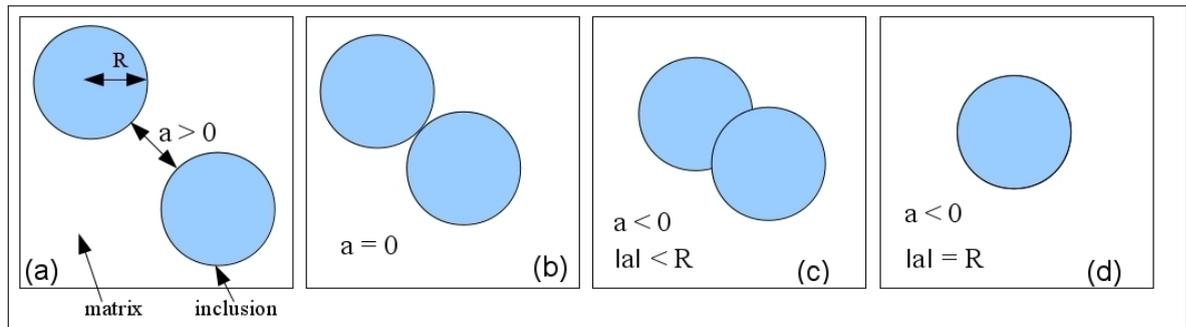


FIGURE II.2 – Les différentes possibilités pour positionner deux particules voisines dans une matrice.

nealing). Pour ces raisons, on se limite dans notre étude à des fractions volumiques $p < 30\%$ pour les particules sans contact.

Parmi les algorithmes les plus utilisés pour la génération et pour la simulation des matériaux hétérogènes on trouve aussi, *Random Sequential Adsorption* (RSA). Celui-ci consiste à générer de façon aléatoire des particules sphériques et identiques d'une manière séquentielle. Parmi les travaux qui se basent sur cet algorithme on trouve par exemple, [Segurado and Llorca \(2002\)](#), [Kari et al. \(2007a\)](#) et [Kari et al. \(2007b\)](#) pour les particules sphériques, puis [Pierard et al. \(2007\)](#) pour le cas des ellipses. Les figures II.3, II.4 et II.5 montrent des exemples de microstructures hétérogènes virtuelles générées par les deux algorithmes de la morphologie mathématique : RSA et le Processus de Poisson.

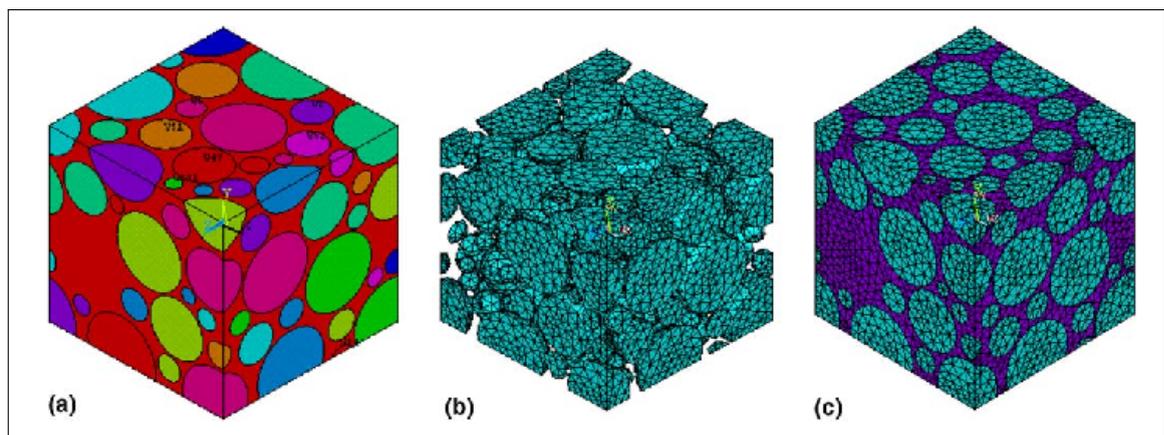


FIGURE II.3 – Microstructure générée par RSA : (a) image virtuelle, (b) maillage des particules et (c) maillage total du composite, [Kari et al. \(2007b\)](#).

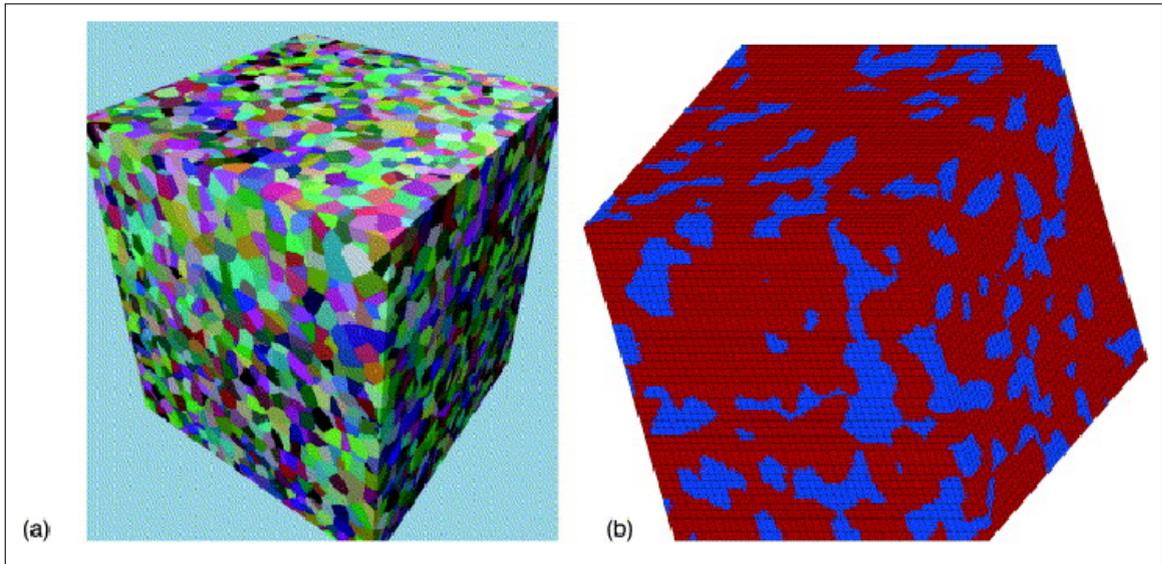


FIGURE II.4 – Mosaique de Voronoï généré par le processus de Poisson : (a) microstructure avec 8000 grain et (b) maillage de la microstructure, [Kanit et al. \(2003\)](#).

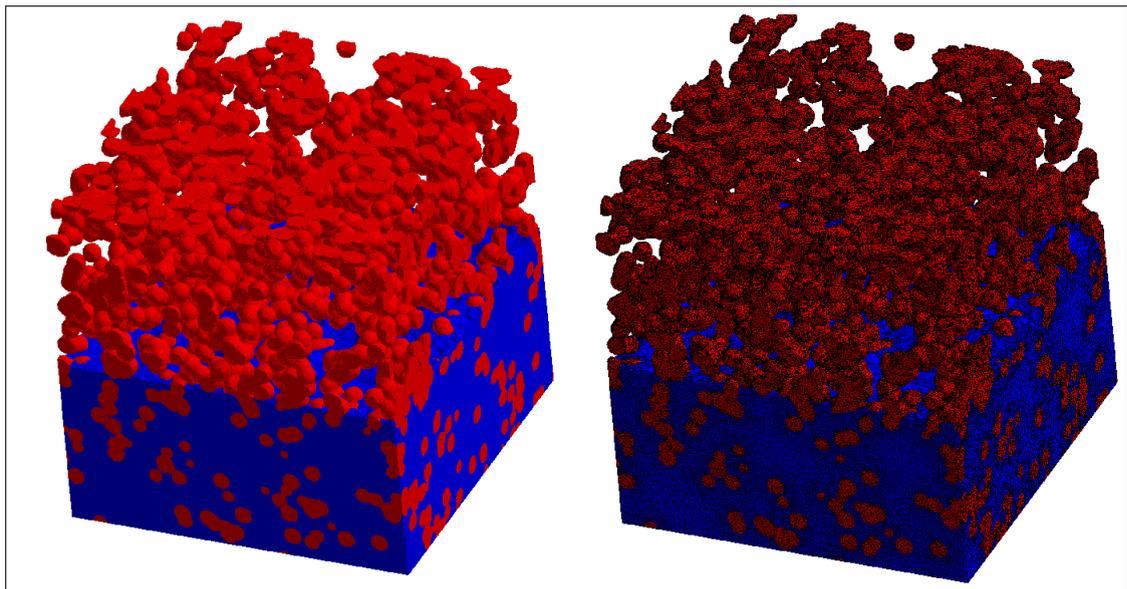


FIGURE II.5 – Microstructure virtuelle d'un élastomère chargé de particules, générée par le processus de Poisson et son maillage, [Jean \(2009\)](#).

Nous nous intéressons dans notre cas aux microstructures aléatoires générées virtuellement par le processus de Poisson. Les microstructures sont de type matrice-inclusion. Deux types de microstructures seront générées pour les différentes fractions volumiques. Des microstructures à base de schéma de sphères dures et d'autres à base de schéma Booléen des sphères. Les inclusions sont sphériques ou ellipsoïdales. La

figure II.6 montre les deux formes possibles pour le cas d'une inclusion ellipsoïdale. Sur cette figure, on distingue deux types de particules : une ellipse aplatie et l'autre de forme allongée. Cette dernière est préférée pour la modélisation à cause de sa forte anisotropie géométrique. Pour illustration, les paramètres morphologiques qui pilotent la génération d'une particule ellipsoïdale par un processus de Poisson sont présentées sur la figure II.7. On note que les positions M_i et les angles principaux α_i, β_i et γ_i sont choisis de manière aléatoire par le processus.

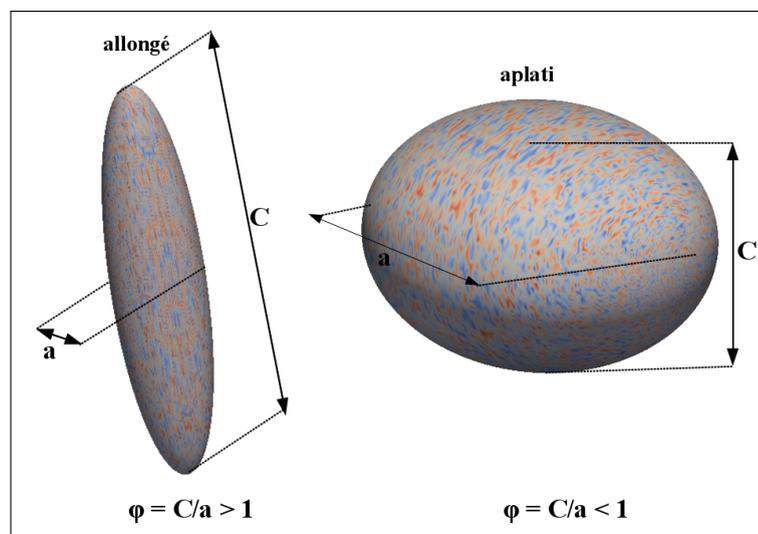


FIGURE II.6 – Les deux formes géométriques d'une particule ellipsoïdale.

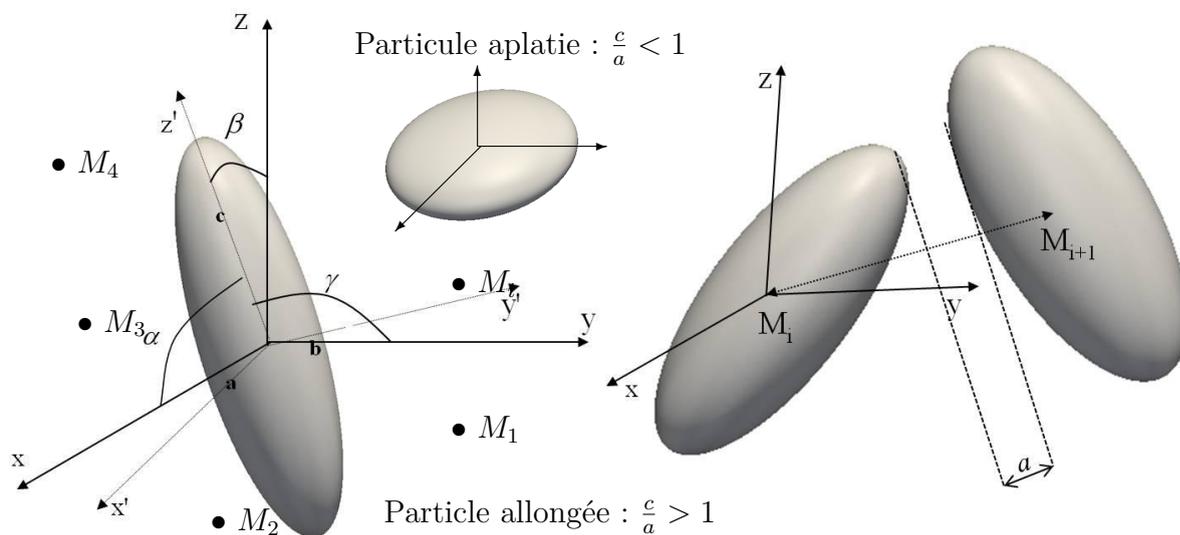


FIGURE II.7 – Coordonnées du système et les angles principales pour la simulation avec le processus de Poisson.

La figure II.8 illustre l'organigramme qui regroupe l'ensemble des étapes de génération d'une fraction volumique p souhaitées, pour N particules avec ou sans distance de répulsion a . Il faut noter que les paramètres morphologiques principaux d'une microstructure 3D qui pilotent la génération d'une fraction volumique p sont :

- Le volume total du matériau V .
- Le nombre des particules N dans la matrice.
- Le rayon des particules R ou leur volume V_s .
- La valeur de la distance de répulsion a .

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

$$p = N \frac{V_s}{V} = N \frac{\frac{4}{3}\pi R^3}{L^3} \quad (\text{II.1})$$

Avec L est la longueur du volume.

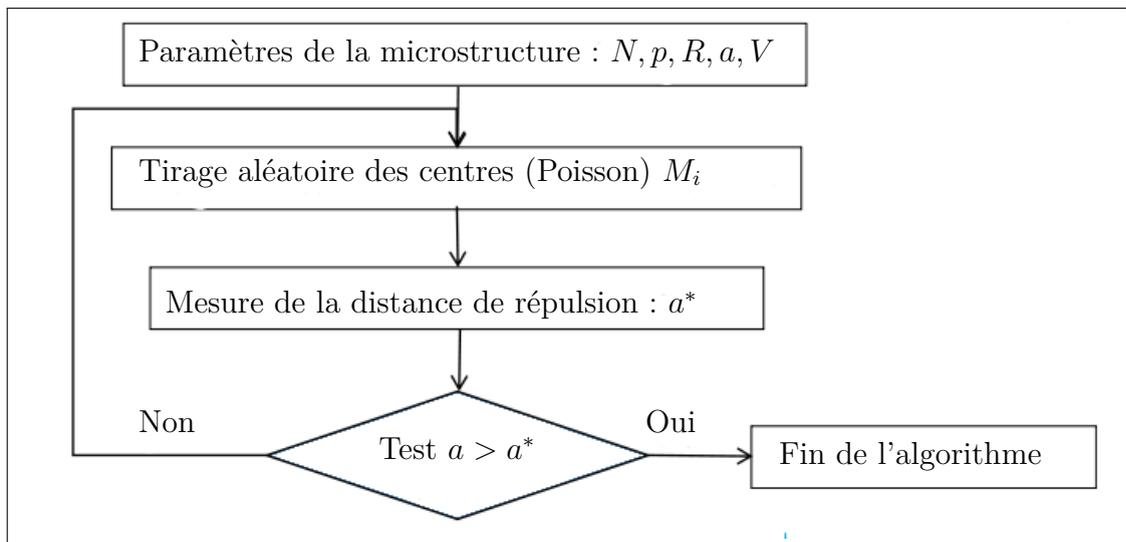


FIGURE II.8 – Organigramme de la méthode de Poisson.

II.3 Visualisation 3D des microstructures

Dans cette section, nous choisissons de présenter sous forme d'une visualisation 3D, l'ensemble des microstructures 3D générées pour les calculs EF. Les deux phases, matrice et particule, sont présentées séparément pour distinguer le positionnement et la forme de chacune des deux phases. La figure [II.9](#) montre des exemples de microstructures virtuelles contenant N particules sphériques distribuées aléatoirement dans l'espace selon le processus de Poisson. Les microstructures obtenues sont de type schéma Booléen, particules interconnectées, avec leurs complémentaires (phase matrice). Dans le cas d'une distribution aléatoire à base de schéma de sphères dures, sans contact, les microstructures obtenues et leurs schémas complémentaires pour les différentes formes des particules, sont données sur la figure [II.10](#).

Schéma Booléen des sphères

Complémentaire de schéma Booléen

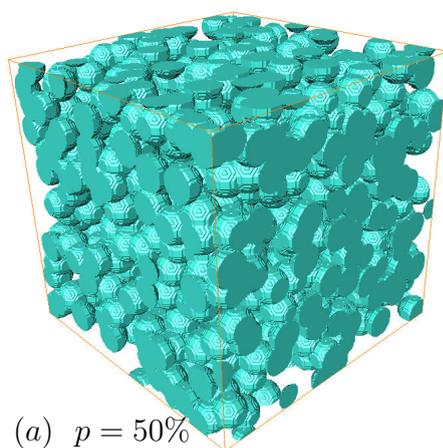
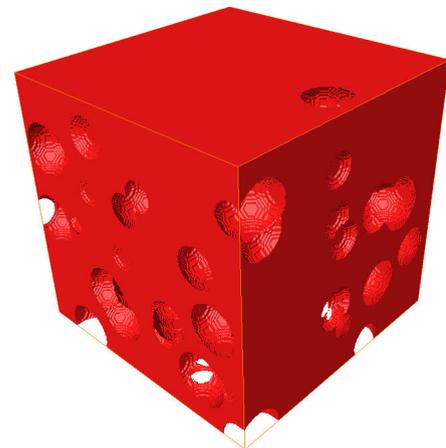
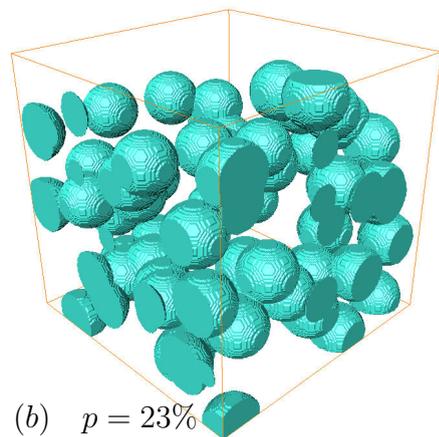
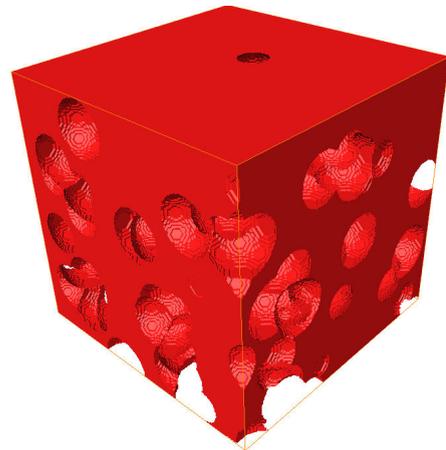
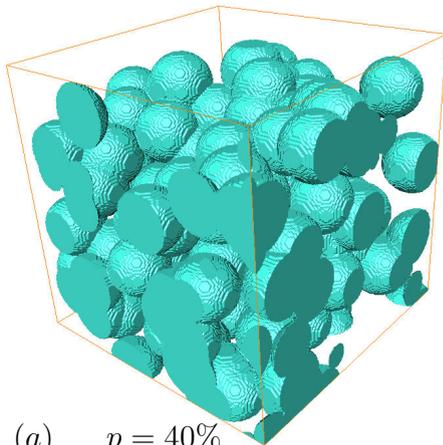


FIGURE II.9 – Simulation par Poisson d'un schéma Booléen et de son complémentaire de N particules distribuées aléatoirement dans l'espace. Microstructures étudiées.

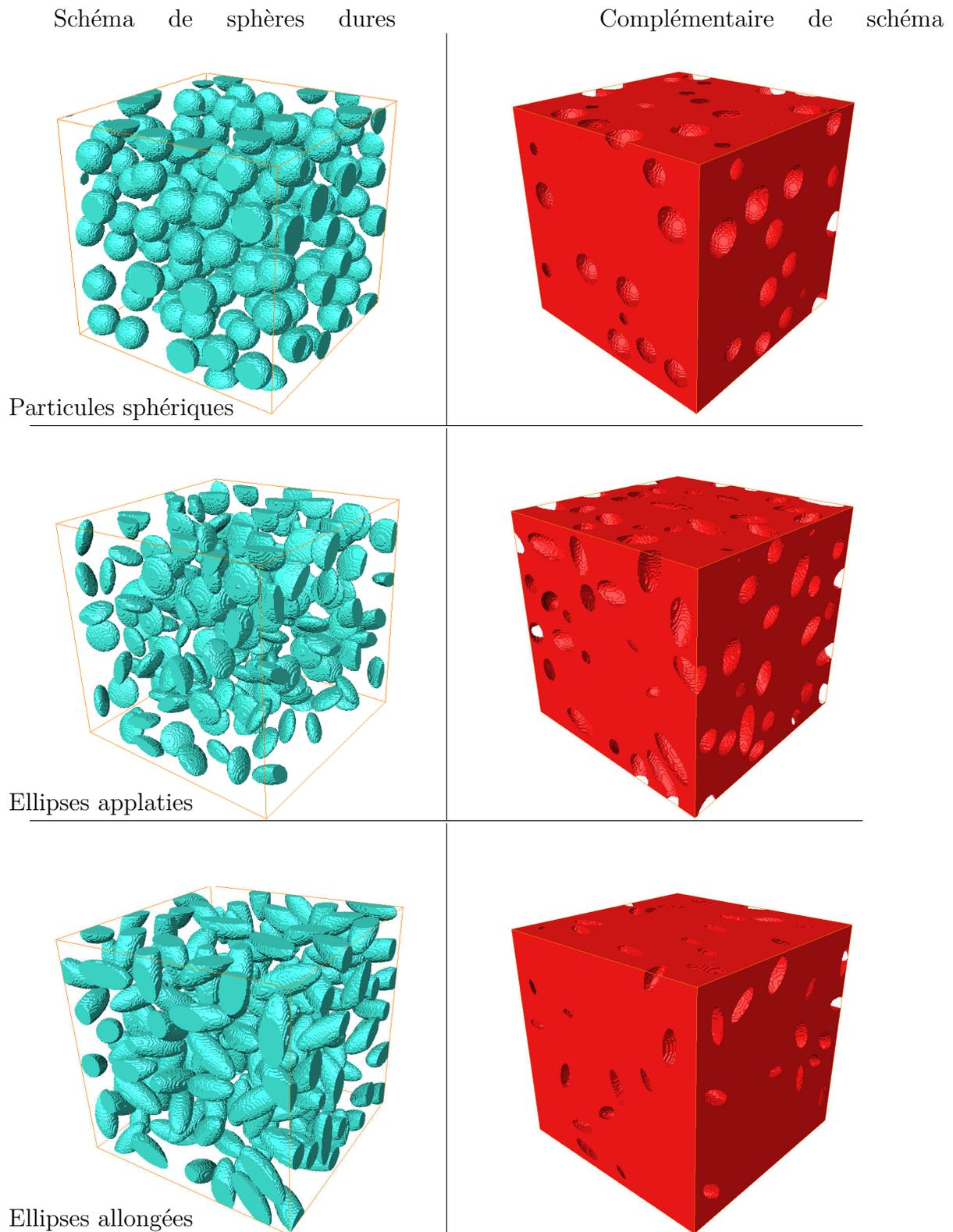


FIGURE II.10 – Simulation par Poisson d’un schéma de sphères dures et de son complémentaire de N particules distribuées aléatoirement dans l’espace. Microstructures étudiées avec $a > 0$.

Au final, les images 3D équivalentes à l'assemblage d'un schéma Booléen et de son complémentaire sont présentées par les microstructures illustrées sur la figure II.11. Le matériau virtuel obtenu est de type matrice inclusion présente les propriétés physiques d'un matériau réel. Ces microstructures hétérogènes seront utilisées pour la modélisation.

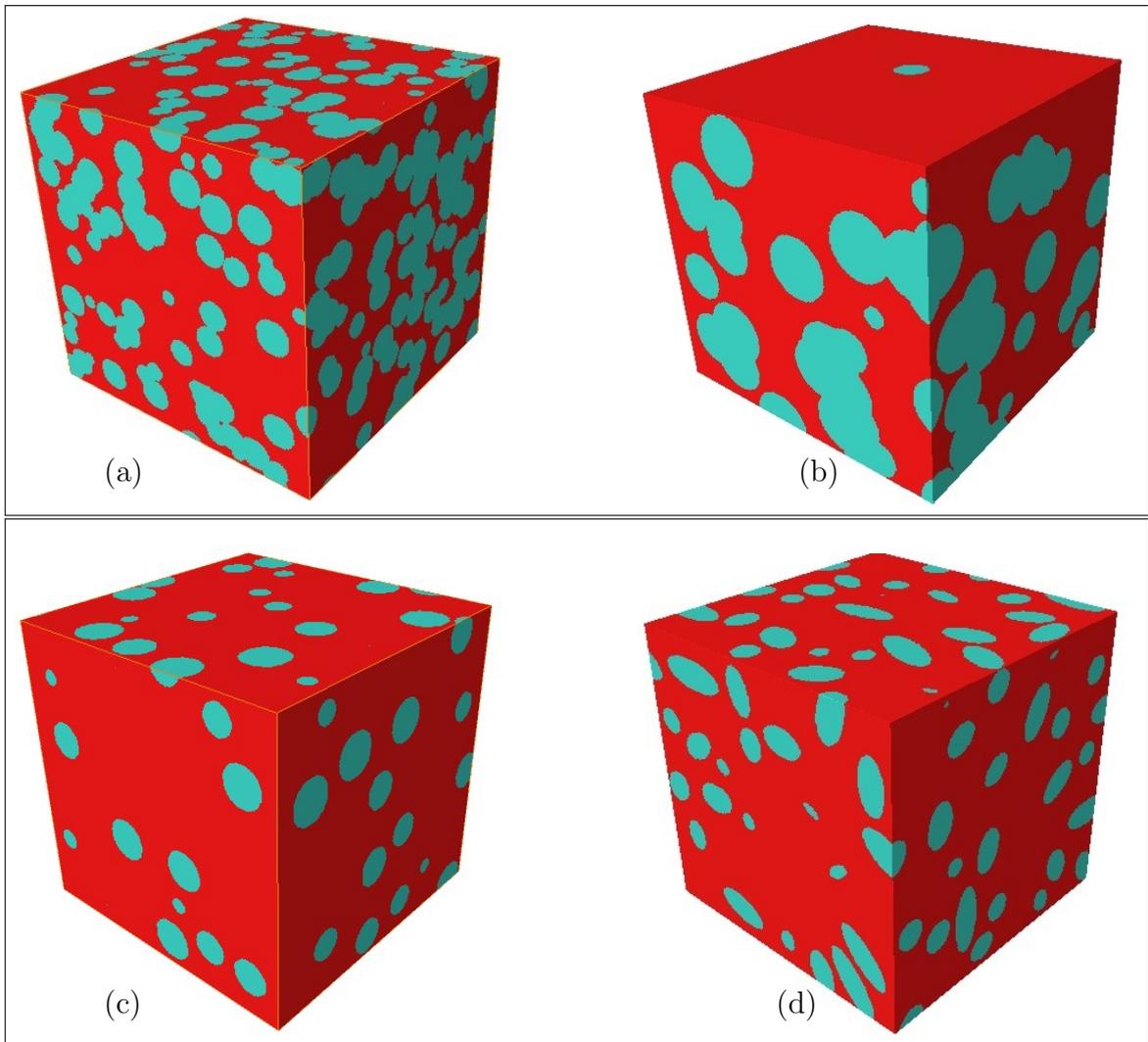


FIGURE II.11 – Résultat de l'association d'un schéma aléatoire et de son schéma complémentaire : (a,b) particules sphériques interconnectées, (c) particules sphériques non-interconnectées et (d) particules ellipsoïdales.

Dans un souci de représentation, on choisit ici de présenter un exemple de cas bidimensionnel des microstructures générées par le processus du Poisson. La figure II.12 présente une projection 2D des microstructures 3D de la figure II.10.

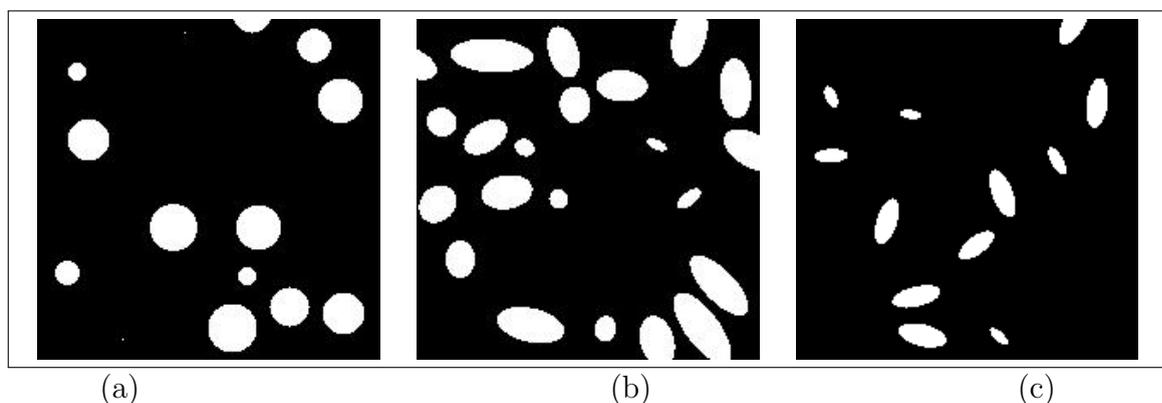


FIGURE II.12 – Projection 2D associée à chaque microstructure de la figure II.10 : (a) sphères, (b) ellipses aplaties et (d) ellipses allongées.

II.4 Maillage 3D des microstructures

Le choix des méthodes numériques pour résoudre le problème de microstructure nécessite la génération d'un maillage discrétisant la géométrie. La méthodologie pour créer et mailler un volume de matériau hétérogène s'articule principalement autour de trois étapes :

- représentation surfacique de matériau ;
- maillage surfacique ;
- maillage volumique (passage de surface vers le volume).

Dans ce travail, la représentation des géométries se fait en utilisant les outils de conception assistée par ordinateur (Zmaster). Les géométries surfaciques obtenues sont finalement introduites dans des logiciels pour une discrétisation réaliste. La figure II.13.a représente un exemple du maillage surfacique obtenu. Ce maillage contient 30 EF en longueur et 30 EF en largeur. Au total, on a une facette entourée par 900 éléments carrés de type C2D8.

Enfin, dans une troisième étape, on transforme le maillage 2D de la figure II.13.a vers un maillage volumique 3D. La figure II.13.b présente les géométries volumiques finales avec une discrétisation. Cette géométrie contient 30x30x30 EF, au total on a 27000 EF quadratique de type C3D27. L'étape suivante consiste à superposer ce maillage sur des images de microstructure 3D générées par le processus de Poisson. Une méthode de construction systématique appelée *méthode des éléments multiphasés* réalise cette opération.

Cette méthode a été mise en place par Lippmann et al. (1997). Elle consiste à superposer un maillage régulier sur une image réelle ou virtuelle de la microstructure. Cette méthode a été déjà utilisée par Barbe et al. (2001a) pour une étude élasto-

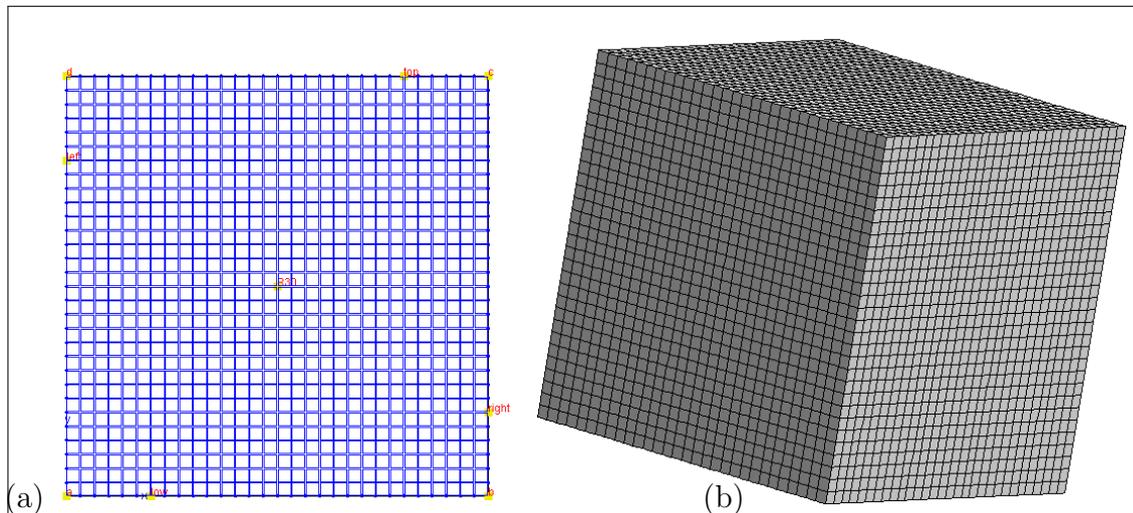


FIGURE II.13 – Maillage 2D et 3D de la géométrie d'une microstructure.

plastique des matériaux hétérogènes, puis par [Kanit et al. \(2006\)](#), [Jean \(2009\)](#) et [Oumarou et al. \(2012\)](#) pour le maillage des images réelles d'un composite obtenues par microscope à transmission.

Dans cette méthode, le comportement mécanique ou thermique associé aux phases est attribué à chaque point d'intégration de chaque élément. Le choix de cette méthode dans le cadre de ce travail vient du fait que dans les travaux précédents, une comparaison entre cette méthode et d'autres types de maillage a été effectuée (le cas par exemple de [Forest \(2006\)](#)). Selon les résultats finaux, on note que les valeurs des grandeurs macroscopiques sont identiques dans les deux cas du maillage, sachant que le nombre des EFs utilisé dans le cas d'un maillage multiphasique est inférieur au cas du maillage libre. Cette différence au niveau du nombre des EF influence le temps de compilation ainsi que la mémoire des machines demandée. Il est à noter que la méthode des éléments multiphasés nécessite peu de mémoire et peu du temps de convergence par rapport à la méthode de maillage libre.

Le maillage EF associé pour chaque microstructure est obtenu à l'aide de la méthode des éléments multiphasés, qui est présenté par la figure [II.14](#). On rappelle que ces microstructures sont générées selon une distribution poissonnienne, puis implémentées dans le code *ZeBuLoN* pour les calculs EF.

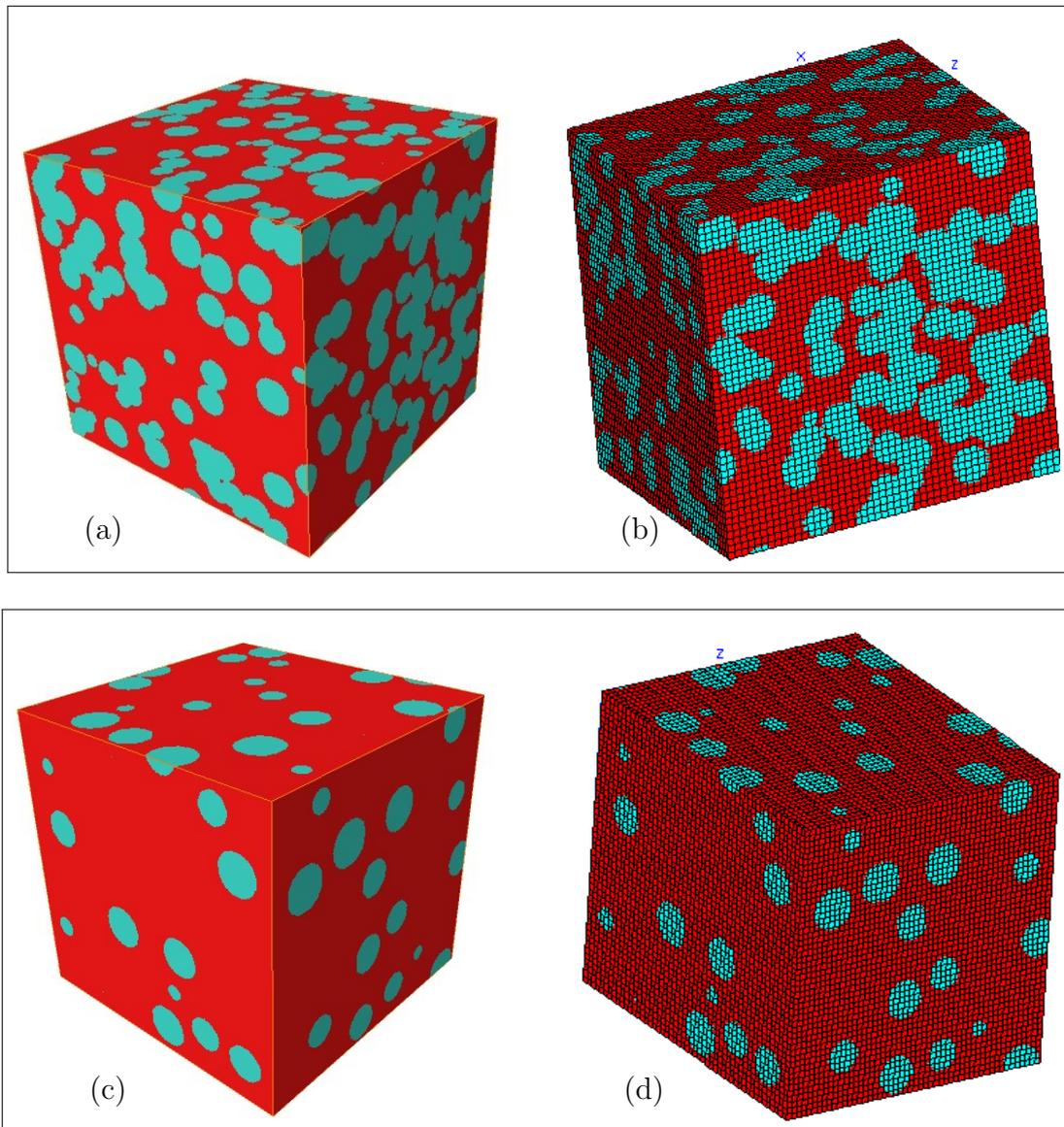


FIGURE II.14 – Maillage de microstructures hétérogènes : (a) schéma Booléen, (b) maillage associé, (c) schéma de sphères dures et (d) le maillage associé.

II.5 Problématiques liées au maillage éléments finis

La modélisation des matériaux hétérogènes par des techniques numériques est basée sur la construction d'un maillage représentatif. Face à ce problème, l'approche la plus naturelle consiste à traiter en premier lieu les surfaces de la microstructures (c'est-à-dire de mailler des surfaces pour un problème tri-dimensionnel). Bien que de nombreux efforts ont été réalisés depuis plusieurs années dans le but de développer de nouveaux algorithmes, les temps de maillage et la mémoire demandée sont de

l'ordre de plusieurs heures. Obtenir des estimations réelles avec la MEF nécessite une mémoire de RAM importante, divisée sur plusieurs processeurs. Par exemple, pour conduire à une convergence de notre calcul, on utilise un PC de 24 Go de RAM divisée sur 8 processeurs.

II.6 Synthèse

Dans ce chapitre, une méthodologie de construction et de maillage d'une microstructure hétérogène 3D virtuelle a été mise en place. La méthode utilisée est nommée "*méthode des éléments multiphasés*". La génération des particules dans l'espace est basée sur le processus aléatoire de Poisson.

Pour des inclusions avec une surface lisse, il faut définir une résolution des pixels très élevée. A l'opposé, la surface des particules contient quelques irrégularités, mais d'influence mineur sur les calculs numériques, [Kachanov and Sevostianov \(2005\)](#). Il faut noter aussi que la mémoire nécessaire pour un maillage fin doit être prise en compte et peut être un inconvénient lorsqu'on ne dispose pas de machines assez puissantes. L'ensemble des microstructures 3D simulées pour les calculs EF ont été présentées puis visualisées dans ce chapitre pour différentes configurations de matériaux hétérogènes.

Chapitre III

Effet de l'interconnexion des inclusions sur le comportement élastique effectif : approche numérique et statistique

Résumé

Nous envisageons de quantifier l'effet de l'interconnexion des particules sur les propriétés effectives et sur la taille du VER d'un matériau hétérogène. Deux microstructures ont été testées : (i) microstructure 1, à base d'un schéma de sphères dures sans interconnexions et (ii) microstructure 2, à base d'un schéma Booléen de sphères avec interconnexions. Dans cette investigation, les méthodes numériques sont couplées avec les lois statistiques de la morphologie mathématique pour déterminer la représentativité des résultats et pour déduire la taille optimale du VER. Ce VER est lié directement aux propriétés morphologiques, mécaniques et statistiques de la microstructure. On présente aussi une relation entre les propriétés de deux microstructures étudiées. Ces relations ont conduit à proposer un nouveau concept, nommé "morphologie équivalente".

Sommaire

III.1 Description des microstructures	66
III.2 Comportement mécanique des phases et conditions aux limites	67
III.2.1 Comportement des phases	67
III.2.2 Conditions aux limites et le calcul linéaire	68
III.2.2.1 Calculs en élasticité linéaire	68

III.2.2.2	Calculs en conduction thermique	69
III.2.2.3	Quelques valeurs des conditions aux limites	70
III.3	Homogénéisation numérique et fluctuation des propriétés macroscopiques	72
III.3.1	Génération des réalisations	72
III.3.2	Fluctuation de la fraction volumique	73
III.3.3	Fluctuation des propriétés apparentes	75
III.3.3.1	Convergence globale et densité de maillage	75
III.3.3.2	Estimation des propriétés apparentes	76
III.4	Analyse morphologique et statistique	84
III.4.1	Notion de la covariance	85
III.4.2	Caractérisation par la portée intégrale et par la variance	88
III.4.3	Concept de la morphologie équivalente	92
III.4.4	Variation du <i>VER</i> en fonction de la fraction volumique	94
III.5	Synthèse	95

III.1 Description des microstructures

L'étude précédente nous a permis d'obtenir, à partir d'un modèle aléatoire (le processus de Poisson), des images virtuelles représentant les matériaux hétérogènes recherchés. Dans cette partie, deux microstructures ont été considérées : (i) microstructure 1, à base d'un schéma de sphères dures sans interconnexion et (ii) microstructure 2, à base d'un schéma Booléen de sphères avec interconnexion. Les microstructures sont biphasiques de type matrice-inclusion. Le comportement de la matrice et de l'inclusion est élastique linéaire. Le maillage associé à l'image tridimensionnelle de la figure III.1 est obtenu en utilisant la méthode des éléments multiphasés.

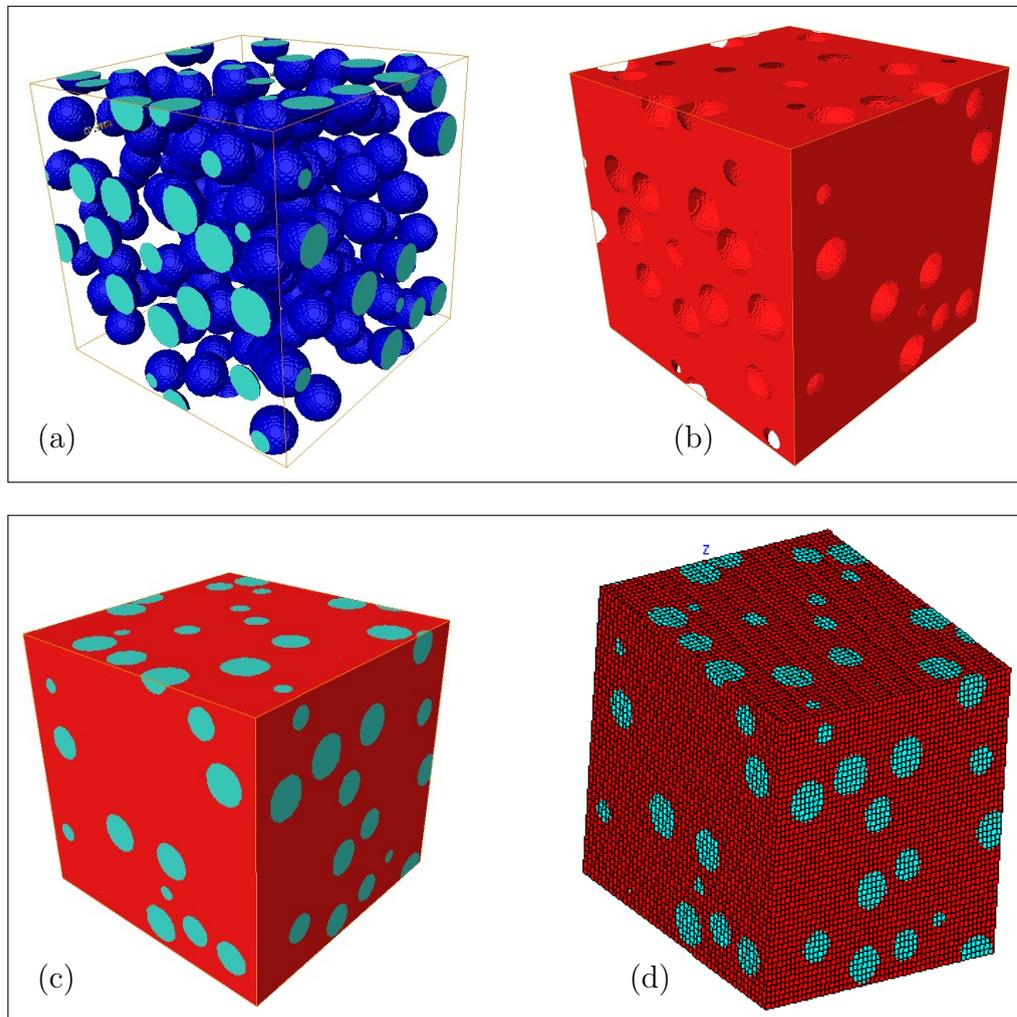


FIGURE III.1 – Exemple de microstructures 3D utilisées : (a) schéma de sphères dures, (b) complémentaire de schéma, (c) composite et (d) le maillage associé.

III.2 Comportement mécanique des phases et conditions aux limites

III.2.1 Comportement des phases

Les méthodes de calcul, utilisées dans la présente étude introduisent explicitement la morphologie 3D des matériaux hétérogènes dans le code de calcul par EF. Les propriétés effectives (le coefficient de compression k et le coefficient de cisaillement μ) sont évaluées pour différentes fractions volumiques p des particules : 23%, 40% et 50% et pour différents contrastes. Les modules élastiques présentés dans le tableau III.1 sont utilisés pour la modélisation numérique. Le comportement des particules sphériques est considéré comme élastique linéaire, de même pour la matrice, on considère un comportement élastique linéaire.

On définit le contraste d'une microstructure c_k (respectivement c_μ), comme le rapport entre k_i , le coefficient de compression de l'inclusion (respectivement μ_i le coefficient de cisaillement de l'inclusion), et k_m le coefficient de compression de la phase matrice (respectivement μ_m le coefficient de cisaillement de la matrice).

	Phases	k (GPa)	μ (GPa)	p	Distribution
Microstructure 1	Matrice	3	1.35	0.23	Sans interconnexion
	Inclusion	167	77		
	Contraste	$\simeq 56$	57		
Microstructure 2, cas 1	Matrice	8.33	3.84	0.4	Avec interconnexion
	Inclusion	833	384		
	Contraste	100	100		
Microstructure 2, cas 2	Matrice	8.33	3.84	0.5	Avec interconnexion
	Inclusion	833	384		
	Contraste	100	100		

TABLE III.1 – Comportement élastique associé à chaque phase de matériau.

Selon l'étude bibliographique présentée dans le chapitre I sur les conditions aux limites, on remarque que les PBC sont préférables pour les calculs EF. Les estimations numériques obtenues par PBC seront comparées avec celles obtenues par les conditions aux limites homogènes au contour (KUBC et SUBC) afin de déterminer la taille du VER . On note que, lorsqu'un volume V est suffisamment représentatif, les propriétés du matériau ne dépendent pas du type de conditions aux limites.

Dans ce paragraphe, on décrit les trois types de conditions aux limites, PBC, KUBC et SUBC. On utilise :

- PBC pour tous les calculs éléments finis sur les différentes tailles du volume, à

cause de sa convergence rapide.

- KUBC et SUBC pour déterminer la taille du VER .

III.2.2 Conditions aux limites et le calcul linéaire

Comme tous les problèmes de modélisation, il est nécessaire de définir des conditions aux limites afin de résoudre les équations constitutives dans le cas de l'élasticité ainsi pour les calculs en thermique.

III.2.2.1 Calculs en élasticité linéaire

On définit la relation qui relie le tenseur de déformation macroscopique E et le tenseur de contrainte macroscopique Σ sous la forme matricielle suivante :

$$\Sigma = C : E \quad (\text{III.1})$$

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

- Dans le cas des conditions KUBC (Kinematic uniform boundary condition) : le déplacement \underline{u} est imposé sur les noeuds de la surface extérieure. Le déplacement \underline{u} est s'écrit à partir du tenseur E comme suit :

$$\begin{cases} \underline{u} = E \cdot \underline{x} & \forall \underline{x} \in \partial V \\ E = \frac{1}{V} \int \epsilon(\underline{x}) dV \end{cases} \quad (\text{III.2})$$

avec $\epsilon(\underline{x})$ est le tenseur de déformation locale.

- Dans le cas des conditions SUBC (Static uniform boundary condition) : on applique sur la surface extérieure du volume V un effort surfacique $T = \sigma \cdot \underline{n}$ qui s'écrit à partir du tenseur Σ comme suit :

$$\begin{cases} \sigma \cdot \underline{n} = \Sigma \cdot \underline{n} & \forall \underline{x} \in \partial V \\ \Sigma = \frac{1}{V} \int \sigma(\underline{x}) dV \end{cases} \quad (\text{III.3})$$

avec $\sigma(\underline{x})$ est le tenseur de contrainte locale.

- Dans le cas des PBC (Periodic boundary condition) : le déplacement \underline{u} imposé sur les noeuds de la surface extérieure ∂V est périodique. Il s'écrit en fonction du

tenseur de déformation homogénéisé E et d'une fluctuation périodique $\underline{\nu}$ comme suit :

$$\begin{cases} \underline{u} = E.\underline{x} + \underline{\nu} & \forall \underline{x} \in \partial V \\ E = \frac{1}{V} \int \epsilon(\underline{x}) dV \end{cases} \quad (\text{III.4})$$

La fluctuation est périodique car elle prend la même valeur en deux points homologues de facettes ou droites opposées.

Il est à noter que ces conditions aux limites existent aussi dans le cas de l'homogénéisation thermique, c.à.d. pour l'estimation de la conductivité thermique qui est l'objectif des chapitres suivants.

III.2.2.2 Calculs en conduction thermique

La méthodologie et l'utilisation des conditions aux limites dans un problème thermique sont décrites ci-dessous. Par la loi de Fourier, on relie le vecteur flux thermique \underline{q} au gradient de température $\underline{\nabla}T$ par l'intermédiaire du tenseur de la conductivité thermique λ :

$$\underline{q} = - \lambda \underline{\nabla}T \quad (\text{III.5})$$

Avec T la température et $\underline{\nabla}T$ son gradient.

- Dans le cas des conditions de type UGT (Uniform gradient of temperature at the boundary), on applique sur la surface extérieure d'un volume V un gradient de température $\underline{\nabla}T$:

$$T = \underline{G}.\underline{x} \quad \forall \underline{x} \in \partial V \quad (\text{III.6})$$

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

$$\underline{G} = \frac{1}{V} \int \underline{\nabla}T dV \quad (\text{III.7})$$

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

$$\underline{Q} = \langle \underline{q} \rangle = \frac{1}{V} \int \underline{q} dV \quad (\text{III.8})$$

- Dans le cas des conditions de type PBC (Periodic boundary conditions), on applique sur les noeuds de la surface extérieure d'un volume V une température périodique T qui s'écrit de la manière suivante :

$$T = \underline{G} \cdot \underline{x} + t \quad \forall \underline{x} \in \partial V \quad (\text{III.9})$$

Avec t la fluctuation périodique.

- Dans le cas des conditions de type UHF (Uniform heat flux at the boundary), on applique sur la surface extérieure d'un volume V un flux \underline{q} qui correspond à la moyenne des flux locaux.

La figure III.2.a représente l'ensemble des paramètres nécessaires pour appliquer ces conditions aux limites. Par exemple on trouve, les noeuds, les facettes du volume, les droites, les points et le contour extérieur. L'ensemble de ces paramètres est nommé les *nsets*. Il faut noter que dans le cas des conditions aux limites périodiques, la correspondance entre les noeuds des facettes opposées est obligatoire comme illustrée la figure III.2.b. Si cette correspondance est absente dans un volume hétérogène, les calculs EF conduisent à des résultats non représentatifs. Le premier travail pour nos microstructures est d'assurer cette correspondance.

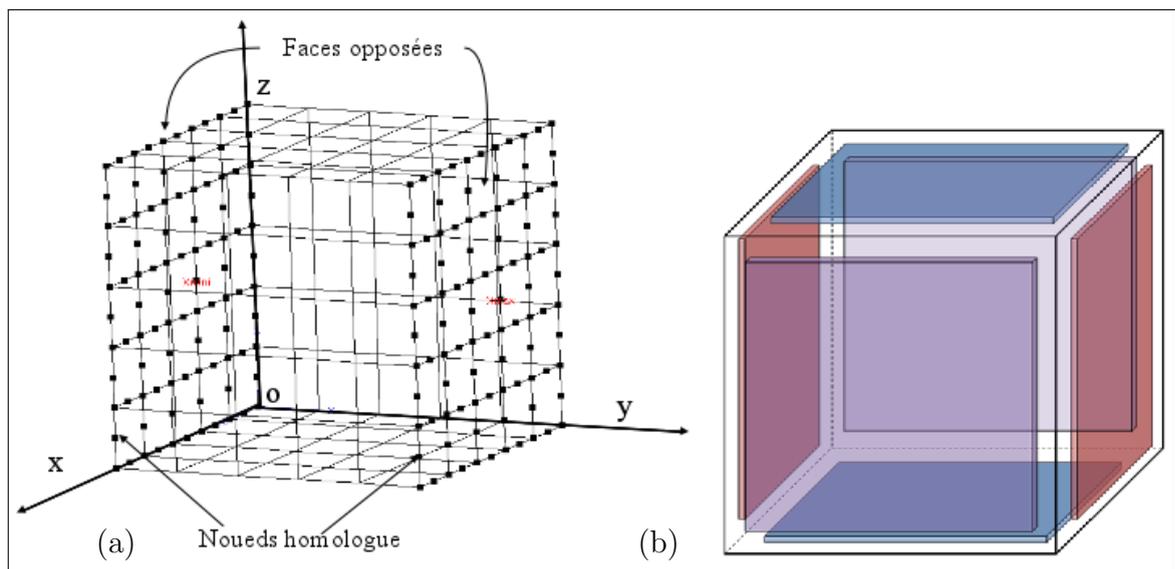


FIGURE III.2 – Conditions aux limites : (a) les noeuds d'un volume et (b) les faces et les noeuds opposés en PBC.

III.2.2.3 Quelques valeurs des conditions aux limites

La méthodologie de calculs des propriétés élastiques et thermiques est présentée dans cette partie. Cette méthode s'applique au coefficient de compression k , au coefficient de cisaillement μ et à la conductivité thermique λ .

Dans le cas des conditions KUBC et PBC, on considère le système comme suit :

- Pour les coefficients de compression k et de cisaillement μ , on impose :

$$E_k = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad E_\mu = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{III.10})$$

Avec E_k et E_μ sont les tenseurs de déformation macroscopique.

Les modules élastiques apparents sont calculés en considérant l'énergie de déformation macroscopique selon le lemme de Hill-Mandel, [Nemat-Nasser and Hori \(2005\)](#). L'expression de ces modules pour le cas PBC et KUBC est donnée par [Kanit et al. \(2003\)](#), [Jean \(2009\)](#) et [Nguyen et al. \(2011\)](#) :

$$k^{app} = \langle \sigma \rangle : E_k = \frac{1}{3} \text{trace}[\langle \sigma \rangle] = \frac{1}{3} (\langle \sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33} \rangle) \quad (\text{III.11})$$

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

- Pour les calculs thermiques :

Pour déterminer la conductivité thermique, on définit toutes les composantes du vecteur gradient de température uniforme selon les conditions. On récupère ainsi les composantes du tenseur de la conductivité thermique selon [Nguyen et al. \(2011\)](#) comme suit :

$$\lambda = \frac{\langle \underline{q} \rangle_x \cdot \langle \underline{\nabla T} \rangle_x + \langle \underline{q} \rangle_y \cdot \langle \underline{\nabla T} \rangle_y + \langle \underline{q} \rangle_z \cdot \langle \underline{\nabla T} \rangle_z}{(\langle \underline{\nabla T} \rangle_x)^2 + (\langle \underline{\nabla T} \rangle_y)^2 + (\langle \underline{\nabla T} \rangle_z)^2} \quad (\text{III.13})$$

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

$$\underline{G} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (\text{III.14})$$

La conductivité thermique homogénéisée en tenant compte des équations [III.13](#) et [III.14](#) est donnée par :

$$\lambda = \frac{1}{3} \text{trace}(\langle \underline{q} \rangle) \quad (\text{III.15})$$

III.3 Homogénéisation numérique et fluctuation des propriétés macroscopiques

L'objectif de l'homogénéisation numérique est d'estimer les propriétés sur différentes tailles de volume hétérogène. Deux types des propriétés homogénéisées sont considérées. Une propriété morphologique représentée par la fraction volumique p et deux propriétés élastiques représentées par le coefficient de compression k et le module de cisaillement μ . Le comportement de chaque phase est présenté sur le tableau III.1. Les conditions aux limites de périodicité ont été appliquées sur le contour extérieur des volumes.

III.3.1 Génération des réalisations

Pour étudier les fluctuations des propriétés macroscopiques, plusieurs tailles du volume, nommées réalisations, ont été générées pour les microstructures 1 et 2. Durant la construction, chaque taille de ces volumes contenant un nombre spécifique d'inclusions N . Par conséquent, l'augmentation de la taille du volume revient à augmenter le nombre des inclusions N , tout en gardant la même fraction volumique p . Pour chaque taille V (ou N), différentes réalisations n sont considérées. Ces réalisations qui ont le même volume, sont différenciées au niveau de la distribution des inclusions et au niveau de leurs degrés d'interconnexions. Nous rappelons que le long de cette section, la microstructure des matériaux hétérogènes étant modélisée à l'aide de schémas aléatoires, les propriétés effectives sont alors obtenues par moyennation d'ensemble sur différentes réalisations (notion d'ergodicité).

La méthodologie de la génération des réalisations est basée sur la technique de sous-volume. Cette technique a été introduite par d'autres études, comme par exemple la caractérisation des microstructures d'un géo-matériau par Griffiths et al. (2012) et Paiboon et al. (2013). Chaque N est équivalent à un sous-volume v_i comme présenté sur la figure III.3. Le tableau III.2 donne la distribution de ces réalisations en fonction de N qui varie entre 1 et 250.

v_i	v_1	v_2	v_3	v_4	v_5	v_6	V
N	1	5	20	50	100	200	250
n	216	40	20	15	9	3	2

TABLE III.2 – Nombre de réalisations n pour chaque v_i contenant N particules.

On note ici que les petits volumes v_i nécessitent un nombre important de réalisations n pour atteindre la représentativité, au contraire pour les grands volumes (v_6

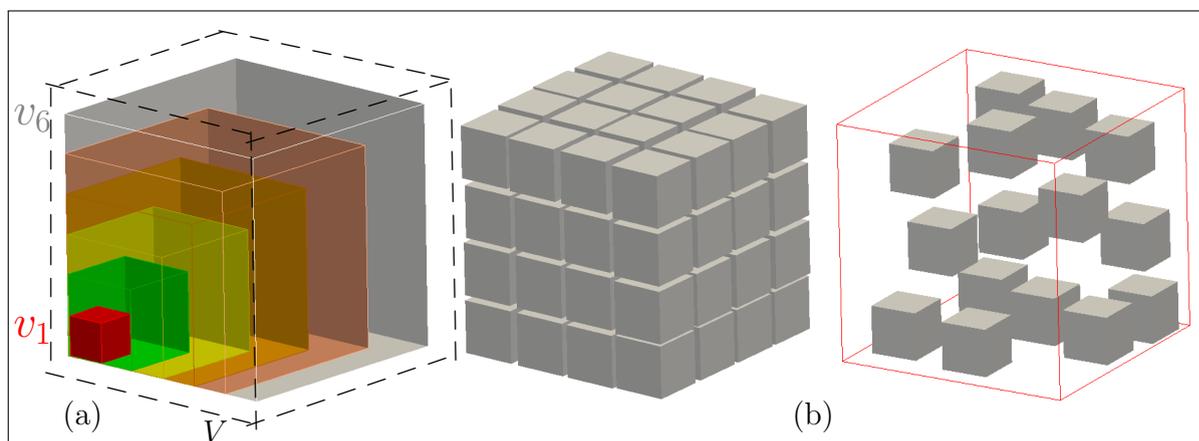


FIGURE III.3 – Génération des réalisations : (a) différentes taille de volume pour le calcul des propriétés dans le VER et (b) exemple de réalisations v_i distribuées aléatoirement dans le VER.

et V), où quelques réalisations sont suffisantes pour représenter la totalité du VER .

L'ensemble de résultats obtenus par ces réalisations sont utilisés pour décrire la fluctuation de la fraction volumique p , les fluctuations des propriétés mécaniques, la variation de l'erreur EF autour des propriétés apparentes, le calcul des paramètres statistiques de la microstructure et finalement la détermination de la taille du VER .

III.3.2 Fluctuation de la fraction volumique

L'objectif ici est de quantifier la variation de la fraction volumique apparente p^a des microstructure contenant N inclusions sans interconnexion (microstructure 1), et la fraction volumique réelle p , obtenue par le même N dans le cas de microstructures avec interconnexion (microstructure 2). Il est évident que pour construire les deux fractions volumiques, on utilise la relation suivante :

$$p^a = N \frac{V_s}{V_c} \quad (\text{III.16})$$

avec V_s le volume d'une sphère et V_c le volume total du matériau hétérogène. Dans le cas de la microstructure 1, avec une distance de répulsion, on obtient : $p = p^a$ et $p \leq p^a$ dans le cas de la microstructure sans distance de répulsion. On note :

- p^a : est générée en imposant une distance de répulsion.
- p : est générée sans aucune distance de répulsion.

Pour déterminer les fluctuations des propriétés morphologiques et mécaniques, le volume total du matériau réparti en tailles différentes selon le nombre des inclusions souhaitées : 1, 2, 5, 10, 50, 100, 200 et 250. Les distributions présentées sur le tableau

III.2 sont utilisées pour chaque v_i tout en gardant la même fraction volumique. Les sous-volumes sont pris aléatoirement dans la microstructure du *VER* comme expliqué par la figure III.4.

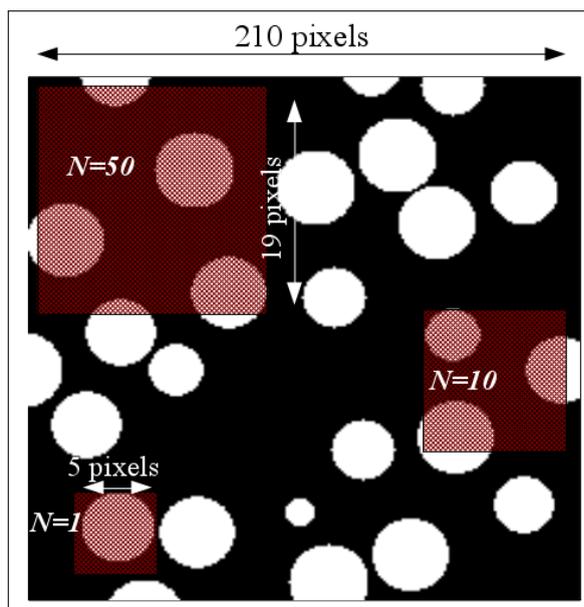


FIGURE III.4 – Prises d'image pour la détermination des fluctuations.

Nous avons testé différentes tailles de volumes du matériau 2, pour l'ensemble des réalisations générées. L'objectif est de comparer les fractions volumiques apparentes p^a et réelles p pour chaque nombre d'inclusions N , afin d'établir une relation entre les deux fractions volumiques. La figure III.5 montre la variation de p/p^a en fonction de N . On constate que, pour des volumes larges, la variation de la fraction volumique relative $\tilde{p} = p/p^a$ admet une valeur asymptotique à partir de $N > 50$ inclusions. On déduit donc pour un volume large, saturé par des inclusions que :

$$\tilde{p} = \frac{p}{p^a} = 0.59 \simeq 0.6 \quad (\text{III.17})$$

Cette équation montre qu'environ 40% du volume total des inclusions sphériques est interconnecté pour une fraction volumique de 40% souhaitée initialement. Cette équation est très intéressante du point de vue morphologique. Par exemple, pour générer un composite avec une fraction volumique réelle p de particules interconnectées, on doit utiliser un nombre d'inclusions N non-interconnectées qui donne $1.67p^a$.

D'après cette figure, on peut introduire la notion du *VER* morphologique. C'est le volume élémentaire minimum pour lequel l'étude des propriétés morphologiques est représentative. Dans notre cas, on remarque qu'à partir de $N = 50$ inclusions les

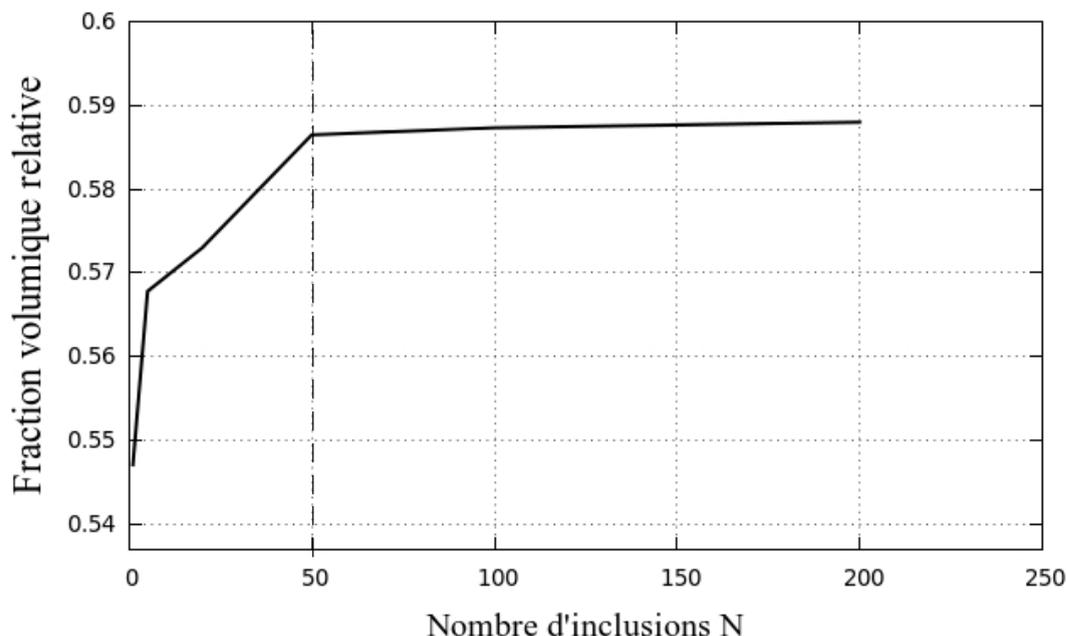


FIGURE III.5 – Variation de p/p^a en fonction du nombre d'inclusions N .

résultats morphologiques sont représentatifs (figure III.5).

Dans ce qui suit, on va essayer de mettre en évidence d'autres relations entre les paramètres pour les deux microstructures. Le fittage des résultats numériques via les lois de la morphologie mathématique permet d'élaborer ces nouvelles relations. Tout d'abord, on commence par les estimations numériques des propriétés mécaniques en utilisant les différentes réalisations n , puis on termine par l'analyse et l'étude de la représentativité de ces propriétés.

III.3.3 Fluctuation des propriétés apparentes

III.3.3.1 Convergence globale et densité de maillage

La densité de maillage est définie comme le volume du matériau présenté par un EF. A cet effet, des microstructures 3D de 200 inclusions spécifiques à ce genre de calculs ont été construites. Le nombre des particules sphériques et la géométrie des microstructures sont inchangés, mais différentes résolutions du maillage sont utilisées. La figure III.6 montre la variation du coefficient de compression k en fonction du nombre des EFs. Le nombre des noeuds varie de 756 (pour un maillage contenant 125 EF) jusqu'à 116281 (pour un maillage contenant 27000 EF) tout en gardant le même nombre d'inclusions. La figure III.6 montre que le coefficient k diminue rapidement pour les petits maillages puis tend vers une convergence totale pour le

cas des grands volumes. Cette figure montre aussi que le nombre des EFs qui assure la convergence globale des propriétés effectives est autour de 27000 EF pour une microstructure de 200 inclusions. A partir de ce résultat, il apparait qu'une densité de 135 éléments quadratiques par particule est nécessaire pour une précision de 1%. Dans la suite de nos simulations, nous considérons cette densité avec les conditions de périodicités.

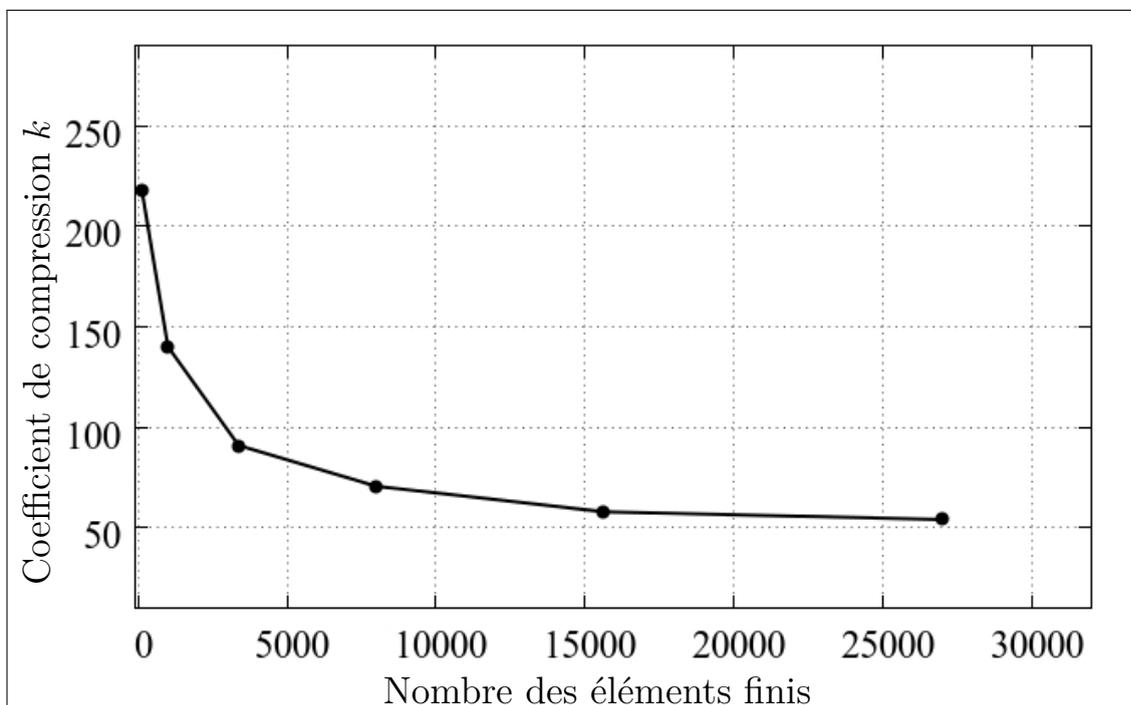


FIGURE III.6 – Variation du module k en fonction du nombre des EF pour les différentes grilles de maillage.

III.3.3.2 Estimation des propriétés apparentes

Dans nos calculs, les propriétés mécaniques des matériaux hétérogènes sont étudiées pour les différentes tailles de volume et avec plusieurs réalisations. Les petits volumes nécessitent plusieurs réalisations afin d'obtenir une convergence acceptable. Par contre, dans le cas des grandes tailles, quelques réalisations sont suffisantes pour estimer les propriétés macroscopiques. Des études préliminaires ont été effectuées sur des élastomères chargés de noir de carbone, [Jean \(2009\)](#), en utilisant cette méthodologie. Ils ont montré que dans un *VER*, une seule réalisation est suffisante pour estimer les propriétés effectives.

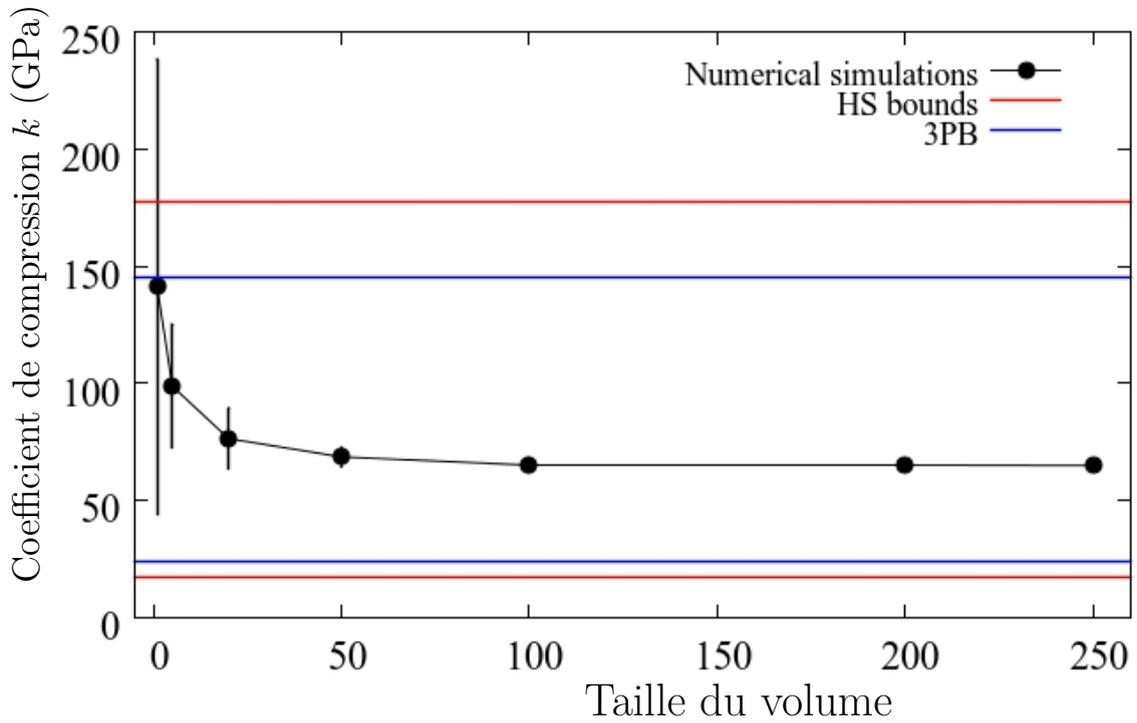
Le coefficient de compression apparent k^a et le coefficient de cisaillement apparent μ^a sont déterminés pour chaque réalisation avec des conditions aux limites

périodiques. L'ensemble des résultats obtenus sont donnés en fonction du nombre des particules N , qui est équivalent à une taille v_i . Les figures III.7, III.8 et III.9 montrent la variation des propriétés élastiques en fonction de la taille des volumes, les valeurs moyennes de l'ensemble des réalisations et les intervalles de confiance. Il apparaît que la dispersion des résultats diminue avec l'augmentation de N , jusqu'à une convergence totale. L'erreur EF est représentée par des barres verticales. On remarque que cette erreur diminue lors de l'augmentation de la taille N , puis elle tend vers zéro pour le VER . On peut déduire aussi que le VER est atteint avec une erreur qui vaut zéro avec quelques réalisations.

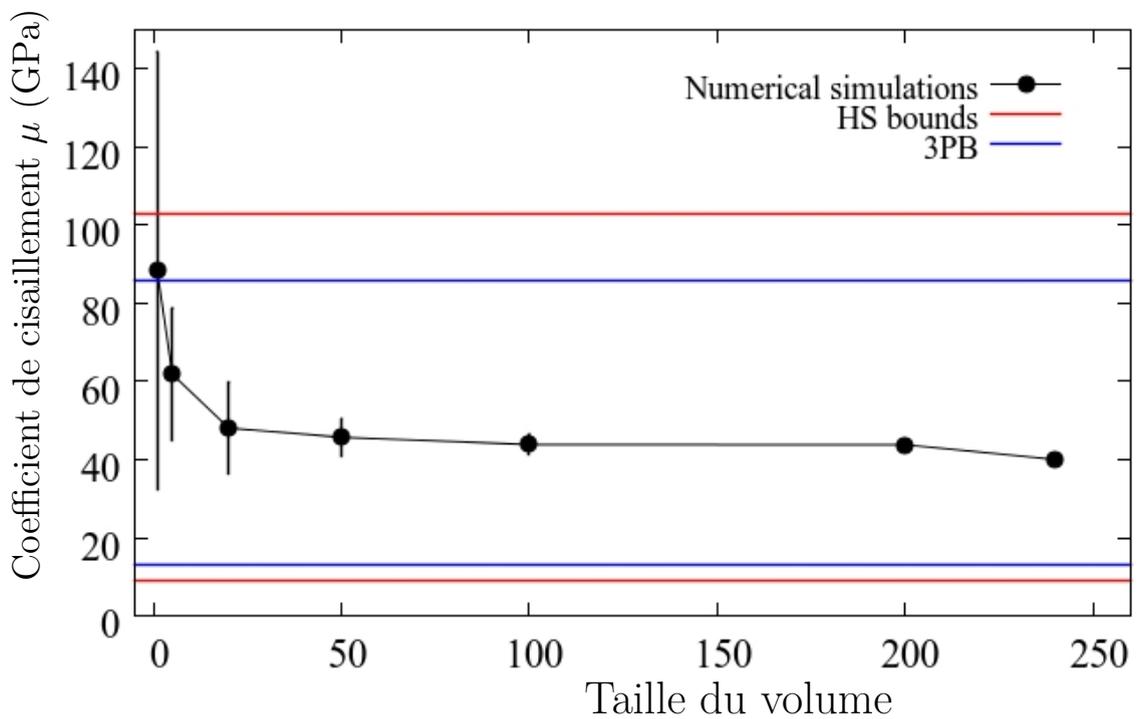
Les résultats de la simulation numérique sont comparés avec ceux obtenus par la théorie de l'homogénéisation analytique. Les bornes analytiques de Hashin-Shtrikman (HS bounds), les bornes d'ordre trois (3PB) et le modèle auto-cohérent généralisé de Christensen and Lo (1979) sont utilisés pour l'approche analytique (voir l'annexe pour les expressions mathématiques). Il apparaît que les résultats de la simulation sont systématiquement situés entre les bornes analytiques d'ordre trois et convergent vers la borne inférieure de 3PB. La différence entre les estimations analytiques et les calculs numériques est autour de 30 à 40 % pour les grandes fractions volumiques. Cette différence diminue avec la diminution de la fraction volumique et du contraste. Le tableau III.3 regroupe l'ensemble des résultats obtenus avec les différentes approches.

	Coefficient	HS^-	GSC	Erreur (%)	Simulations	HS^+
Microstructure 1	k	4.38	4.38	26	5.5	20.18
	μ	2.16	2.08	49	3.1	11.72
Microstructure 2 : cas 1	k	17.06	—	—	55	177.5
	μ	9.04	—	—	37	103.05
Microstructure 2 : cas 2	k	21.36	—	—	120	238.58
	μ	11.59	—	—	80	135.51

TABLE III.3 – Résultats de l'homogénéisation numérique comparés aux estimations analytiques.

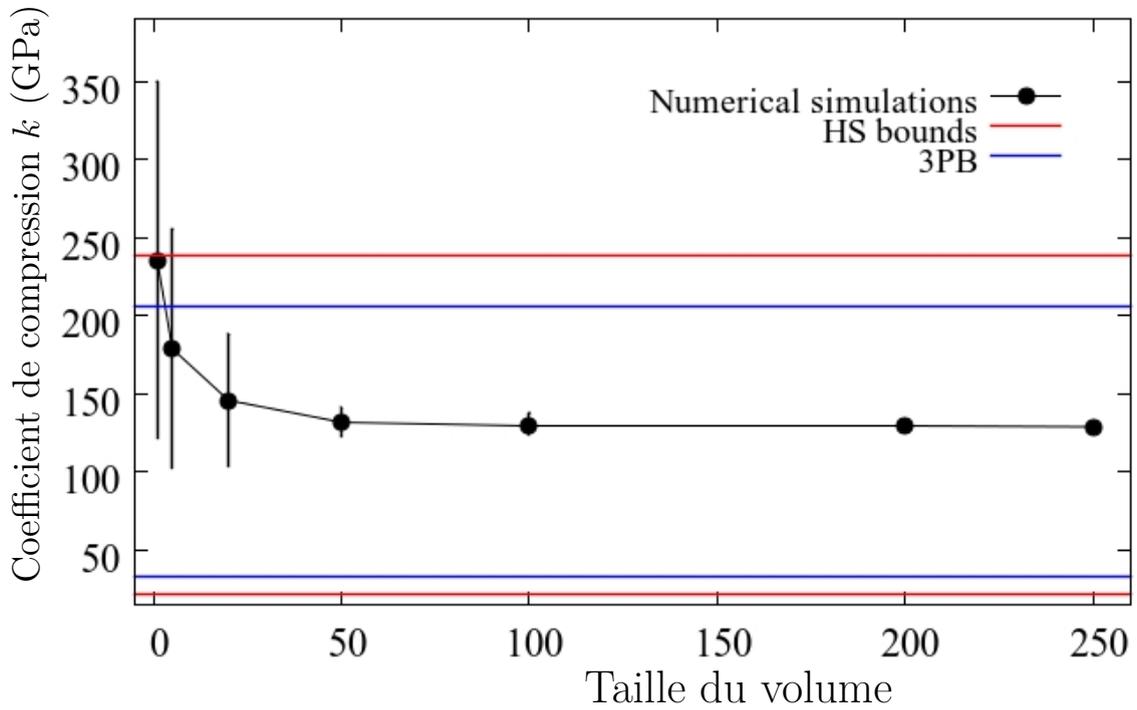


(a)

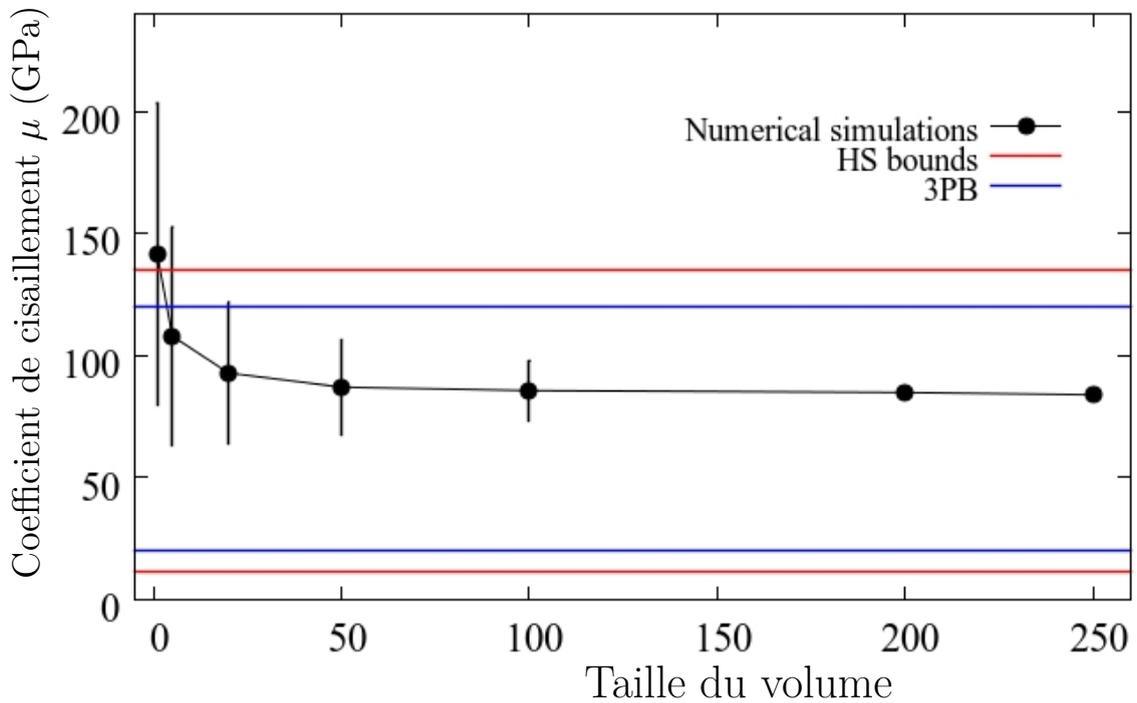


(b)

FIGURE III.7 – Propriétés homogénéisées, en PBC, en fonction de la taille du matériau 2, cas 1. (a) coefficient de compression et (b) coefficient de cisaillement.

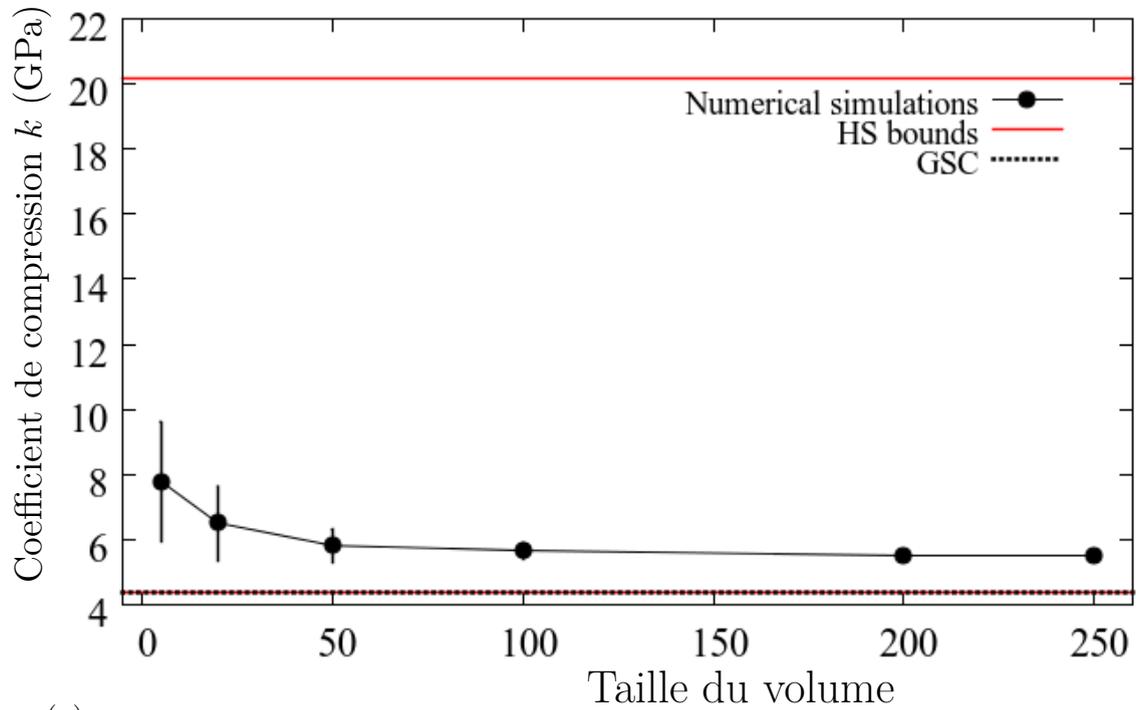


(a)

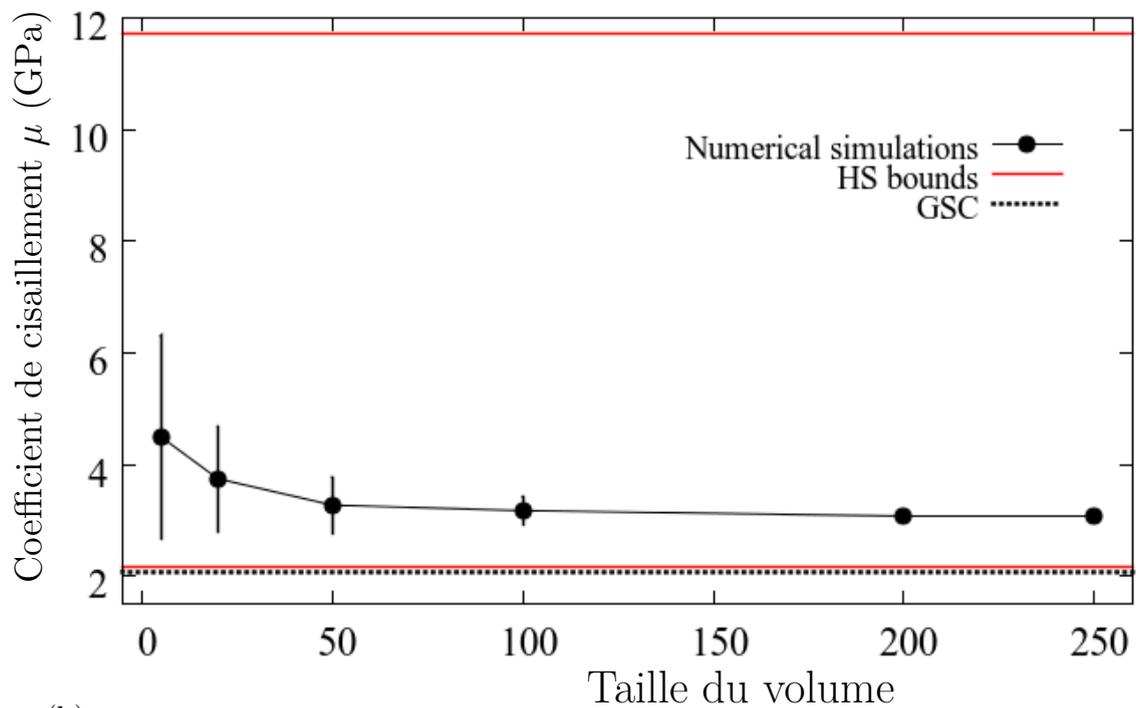


(b)

FIGURE III.8 – Propriétés homogénéisées, en PBC, en fonction de la taille du matériau 2, cas 2. (a) coefficient de compression et (b) coefficient de cisaillement.



(a)



(b)

FIGURE III.9 – Propriétés homogénéisées, en PBC, en fonction de la taille du matériau 1. (a) coefficient de compression et (b) coefficient de cisaillement.

Les figures III.10, III.12 et III.14 illustrent des exemples de calculs sur des volumes de matériau dans le cas de coefficient de cisaillement μ . Ces figures montrent la distribution locale des modules élastiques ainsi que la déformation macroscopique des volumes dans le plan xy par rapport à l'état initial de la géométrie. Dans le cas de coefficient de compression k , la distribution locale et la déformation des volumes sont présentées sur les figures III.11, III.13 et III.15. Ces figures montrent aussi le changement du comportement local dans chacune des deux phases de la microstructure. A partir des résultats obtenus on remarque que dans le cas des fortes interconnexions, le comportement des inclusions change lentement comparé avec le cas des particules isolées seules ou non-interconnectées.

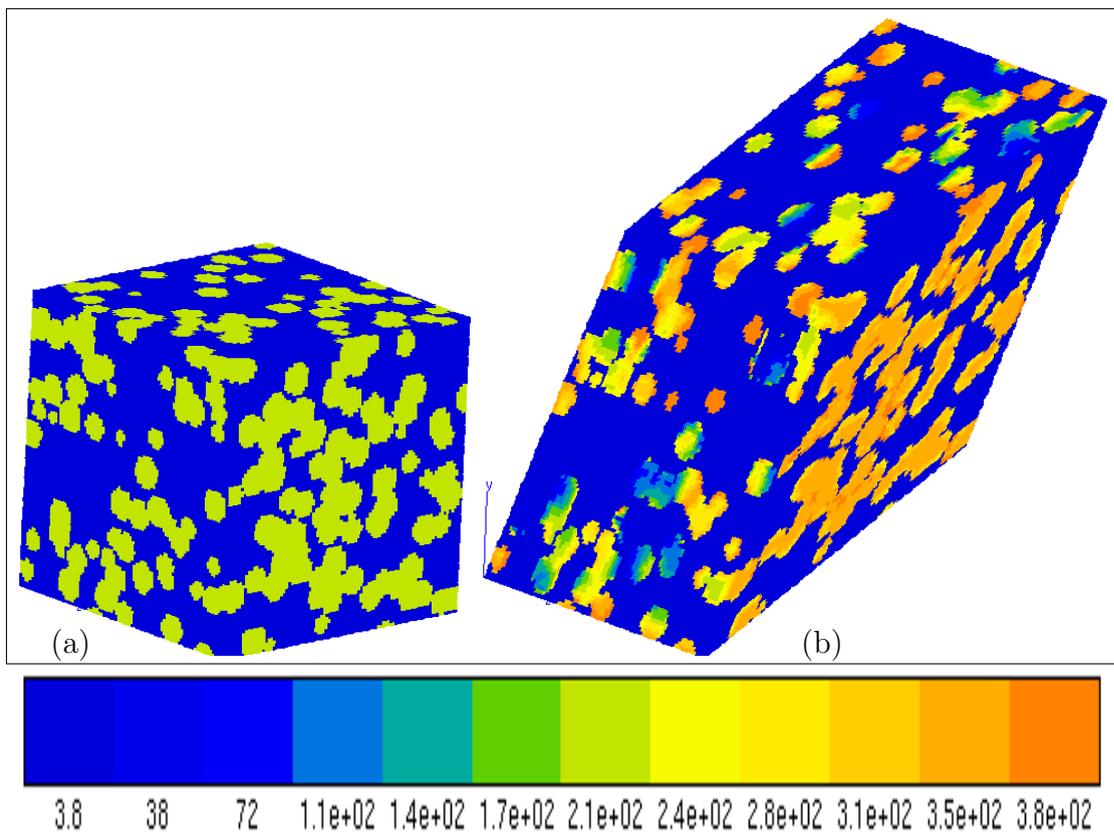


FIGURE III.10 – Distribution locale du module de cisaillement μ dans un volume de fraction $p = 50\%$: (a) maillage initial et (b) déformation dans le plan xy .

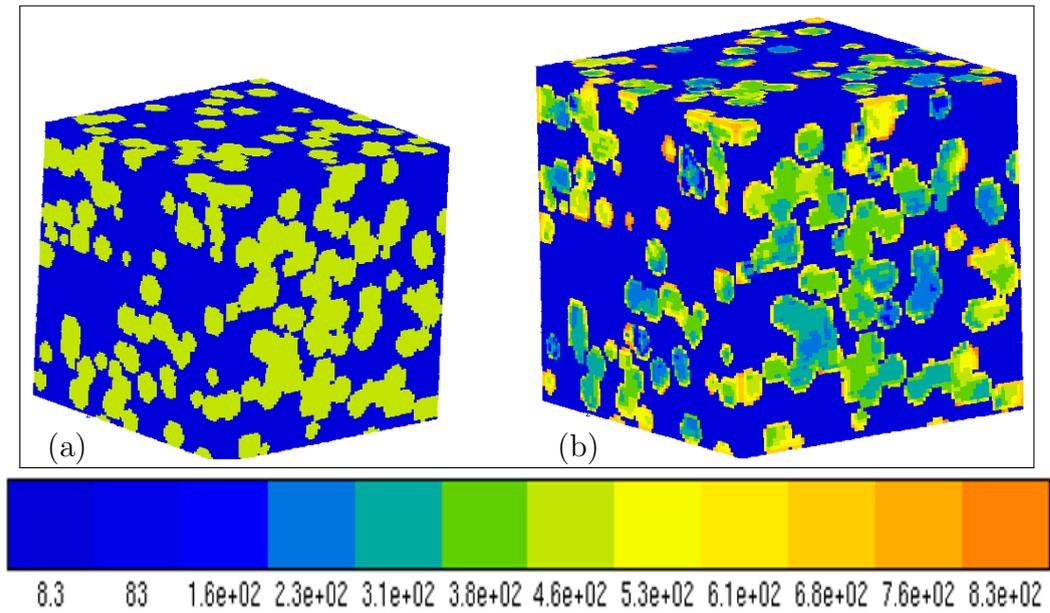


FIGURE III.11 – Distribution locale du module de compression k pour une fraction volumique $p = 50\%$: (a) maillage initial et (b) déformation du volume.

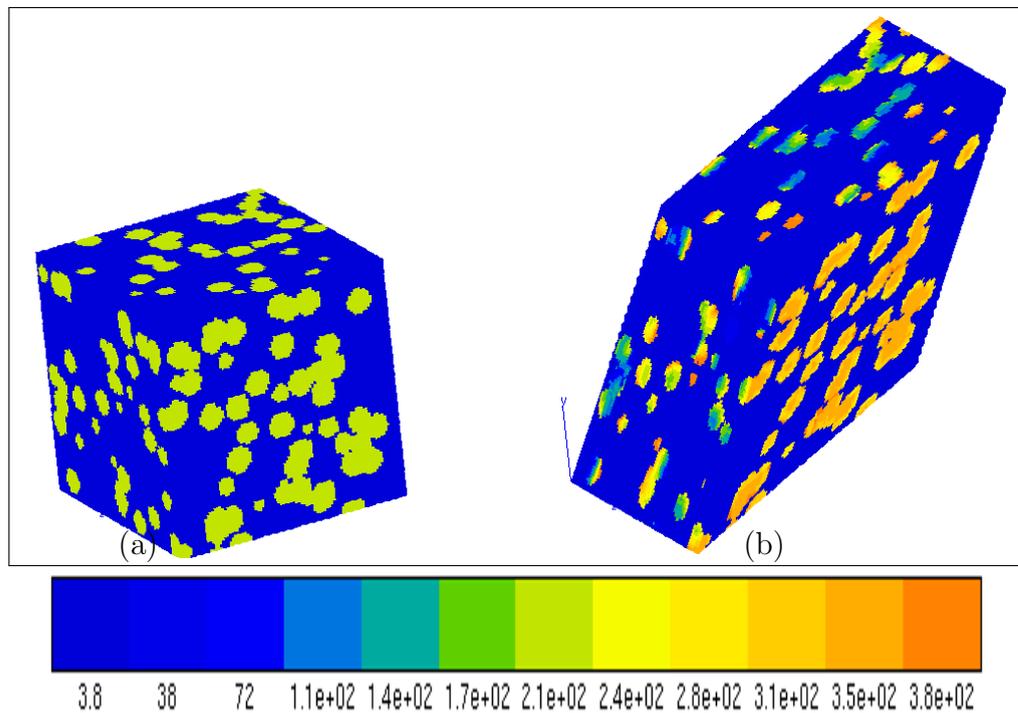


FIGURE III.12 – Distribution locale du module de cisaillement μ pour une fraction $p = 40\%$: (a) maillage initial et (b) déformation dans le plan xy .

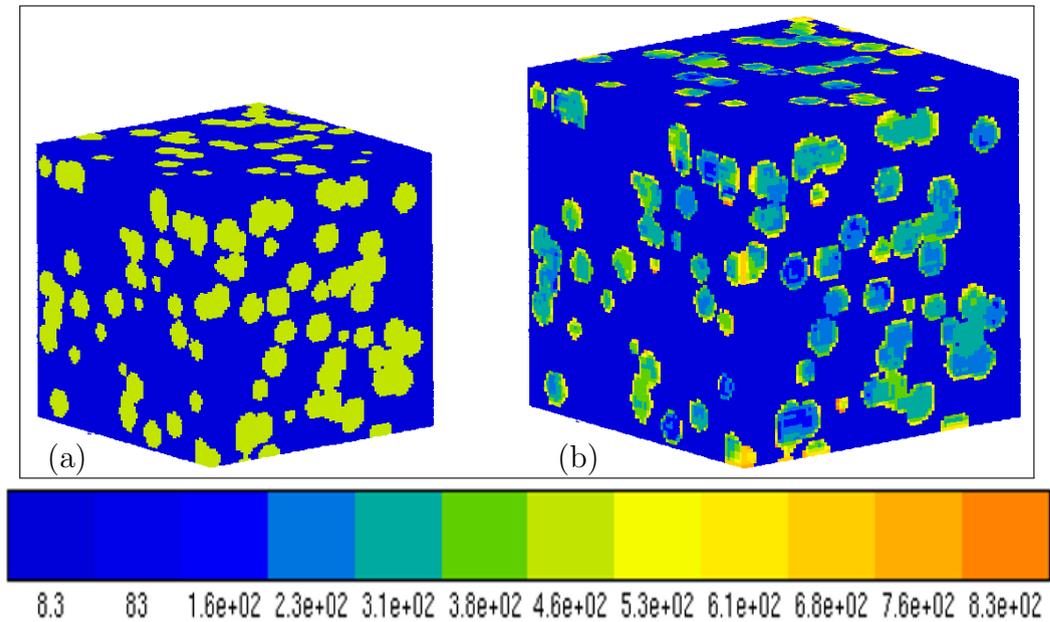


FIGURE III.13 – Distribution locale du module de compression k pour une fraction $p = 40\%$: (a) maillage initial et (b) volume déformé.

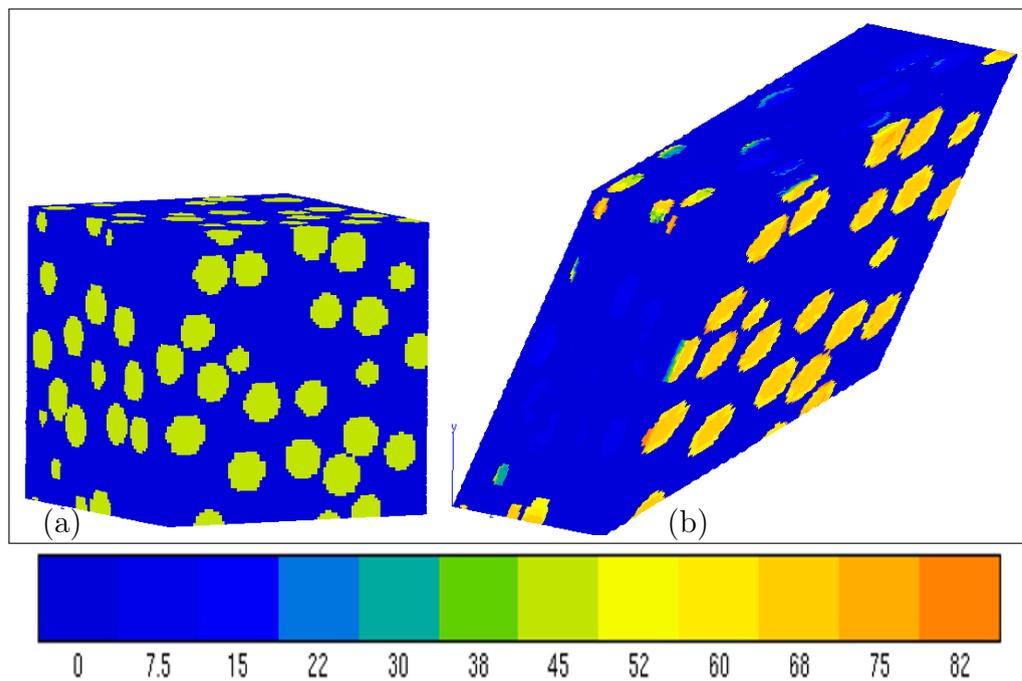


FIGURE III.14 – Distribution locale du module de cisaillement μ pour une fraction $p = 23\%$: (a) maillage initial et (b) déformation dans le plan xy .

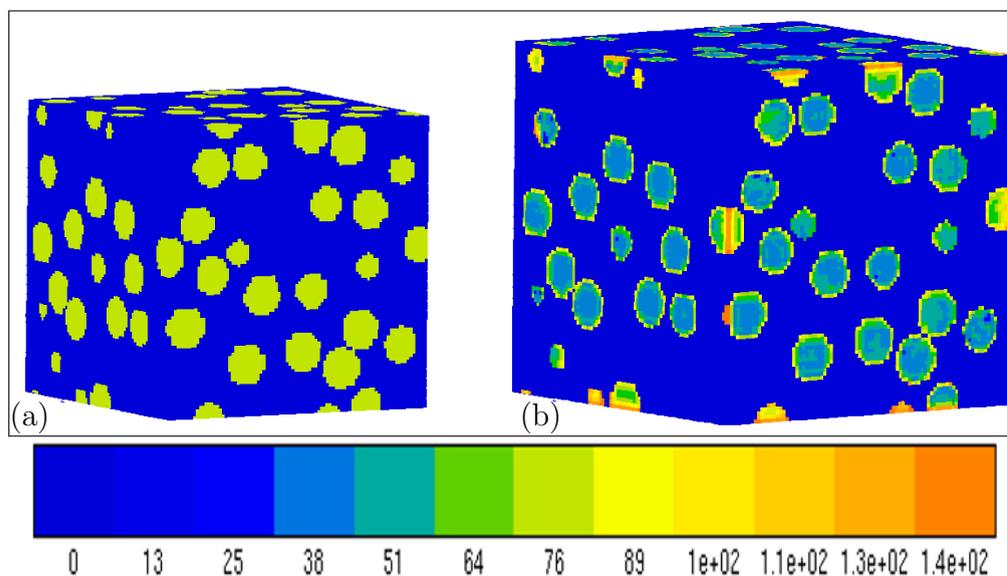


FIGURE III.15 – Distribution locale du module de compression k pour une fraction $p = 23\%$: (a) maillage initial et (b) déformation du volume.

En réalité, la caractérisation des matériaux hétérogènes à l'échelle microscopique fournit des informations importantes pour le comportement macroscopique. Ceci parce que les petits détails microscopiques peuvent donner lieu à des différences dans la réponse macroscopique. Il est donc évident d'introduire les méthodes statistiques, qui permettent une analyse approfondie à l'échelle microscopique de la microstructure.

Les résultats de la simulation numérique, obtenus par les différentes réalisations, présentés dans la section précédente, seront couplés avec les lois statistiques. La représentativité de ces résultats et l'effet de l'interconnexion sur le macro-comportement élastique seront examinés.

III.4 Analyse morphologique et statistique

L'analyse morphologique des microstructures est d'une importance primordiale en mécanique des matériaux hétérogènes. La détermination de certains paramètres statistiques de la microstructure est l'un des aspects clés pour développer des matériaux à haute performance mécanique. Ce développement a été obtenu par l'analyse de l'échelle microscopique (la distribution, la forme et l'orientation des particules) où le comportement global dépend de cette échelle.

Dans cette partie, on propose de formaliser des corrélations entre les paramètres morphologiques des deux microstructures 1 et 2 considérées. Il faut noter que les

outils de la morphologie mathématique, tels que la covariance et la portée intégrale, sont utilisés pour déterminer ces corrélations. Ils seront parfois utilisés pour la mesure de l'anisotropie et la disposition spatiale des inclusions dans la matrice. Cette méthode de caractérisation a été introduite par [Jean \(2009\)](#) pour l'homogénéisation élastique et diélectrique d'un élastomère hétérogène, puis par [Dirrenberger \(2012\)](#) pour les microstructures architecturées et finalement pour la caractérisation élastoplastique des matériaux hétérogènes par [Fritzen et al. \(2012\)](#).

Nous allons rappeler ici les principales définitions de chaque outil utilisé. L'objectif est d'étudier l'influence de l'interconnexion des inclusions sur le comportement des microstructures biphasées. La différence entre les microstructures 1 et 2 est envisagée dans cette partie en introduisant la notion de la portée intégrale et de la covariance.

III.4.1 Notion de la covariance

Cette notion donne la probabilité pour que deux points de coordonnées x et $x+h$ appartiennent à la même phase. Autrement dit, c'est la probabilité $g(h)$ pour qu'un segment longueur de h , appartient à la même phase B du matériau hétérogène, [Matheron \(1975\)](#), on écrit :

$$C(x, x+h) = g\{x \in B, x+h \in B\} \quad (\text{III.18})$$

Pour une microstructure 3D la covariance $C(x, x+h)$ est calculée comme le nombre de pixels appartenant à la phase i à la fois dans l'image et dans celle de son homologue translatée par $x+h$. La figure [III.16](#) montre le principe de calcul de covariance. La variation de $C(x, x+h)$ en fonction de h est appelée covariogramme. Pour une valeur de $h=0$, le nombre de pixels en commun dans les deux images est maximal. La covariance alors maximale, correspond à la valeur de la fraction volumique p de la phase des inclusions. Si h augmente le nombre des pixels communs diminue pour converger vers p^2 .

Dans la littérature, on trouve la variation de quelques covariogrammes pour les matériaux hétérogènes. Les figures [III.17](#) et [III.18](#) présentent des exemples de variation de la covariance pour des microstructures hétérogènes biphasées. Cette notion sera utilisée pour quantifier la différence entre les microstructures des deux matériaux 1 et 2 considérés. On remarque que sur les diagrammes de covariance, nommés covariogrammes, on peut déterminer quelques propriétés morphologiques comme la fraction volumique réelle et la taille des particules. On remarque aussi que les covariogrammes ont une valeur asymptotique pour la quelle la courbe atteint son palier

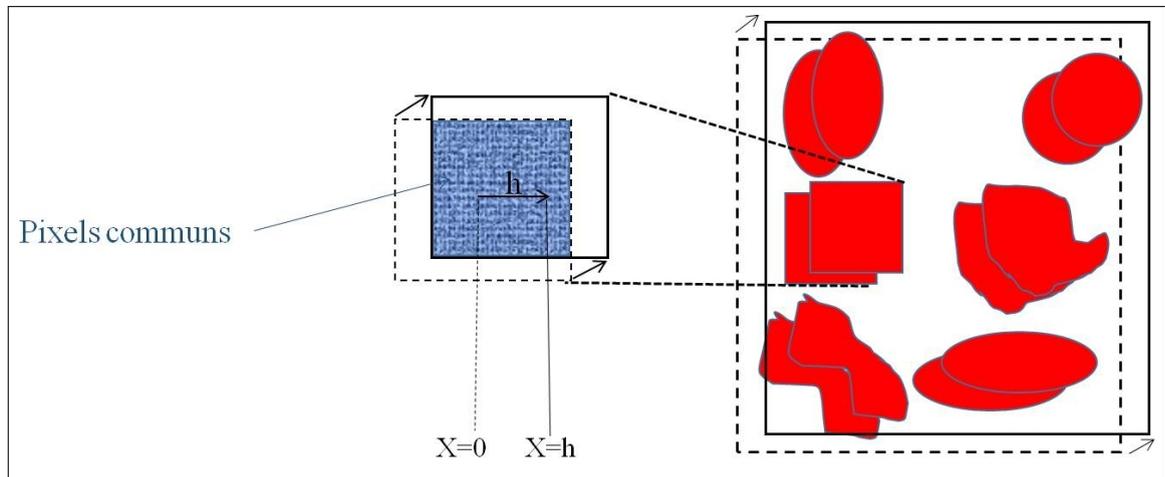


FIGURE III.16 – Principe de calcul de la covariance.

à p^2 . Cette distance est la longueur caractéristique ou la portée. Généralement, cette distance dépend de la taille des particules dans la microstructure.

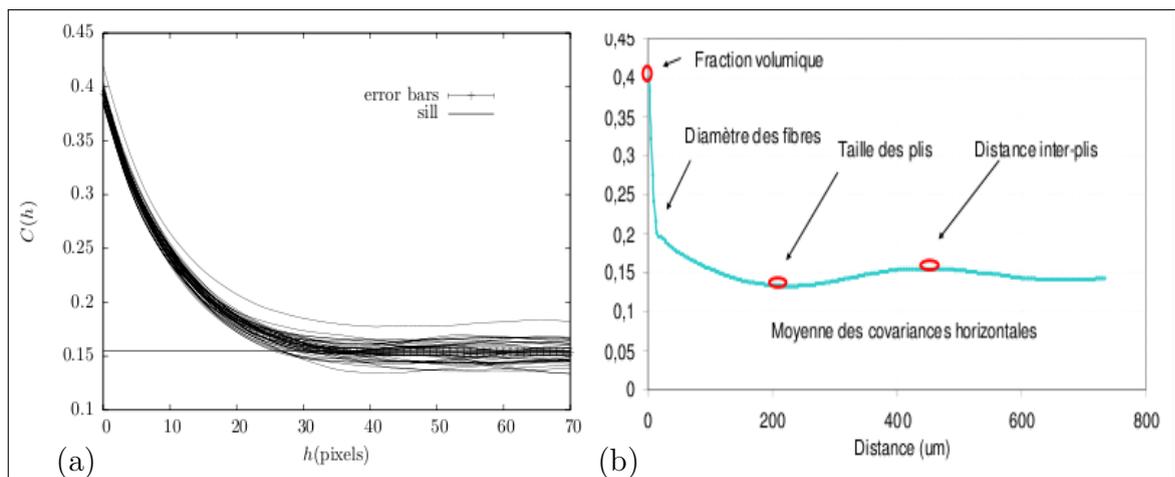


FIGURE III.17 – Exemple de covariogrammes pour : (a) élastomère étudié par [Jean \(2009\)](#) et (b) les fibres courtes étudiées par [Oumarou et al. \(2012\)](#).

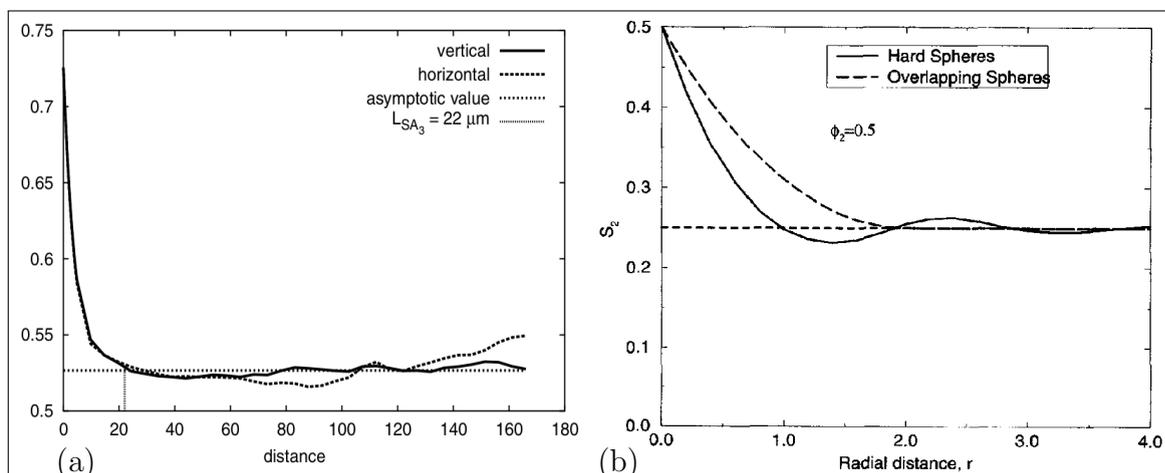


FIGURE III.18 – Exemple de covariogrammes : (a) microstructures réelles étudiées par Kanit et al. (2006) et (b) microstructures virtuelles étudiées par Torquato (1997).

Dans notre travail, on procède par l'étude du diagramme de covariance pour les deux microstructures 1 et 2. Cette covariance est obtenue à partir des images générées par le processus de Poisson. L'objectif est de déduire la différence entre les microstructures avec ou sans interconnexion des particules sphériques. Les portées ou les longueurs caractéristiques, L_1 et L_2 , des deux microstructures 1 et 2 respectivement sont comparées. La figure III.19 montre les covariogrammes des deux microstructures. On constate que : $L_2 = 2L_1$ dans le cas unidirectionnel, comme le cas de Torquato (1997) pour les particules rigides. Notre étude s'intéresse au cas 3D dont les longueurs sont : $L_2 = 2^3 L_1$. Puisque la longueur L dépend du volume des particules, on peut déduire que le rapport entre le volume des inclusions sphériques des deux microstructures est égale à $2^3 = 8$.

L'évolution de la covariance suivant les trois directions donne l'anisotropie géométrique. En évidence, les covariogrammes obtenus montrent que les microstructures contenant 200 inclusions sans interconnexion sont plus isotropes que la microstructure avec 200 inclusions interconnectées. Par conséquent, l'interconnexion des inclusions influence l'anisotropie des microstructures hétérogènes.

Les résultats obtenus par la technique de la covariance seront validés par le fittage des résultats numériques via les lois statistiques de la morphologie mathématique. La variance et la portée intégrale sont les deux paramètres utilisés dans la caractérisation par l'approche statistique.

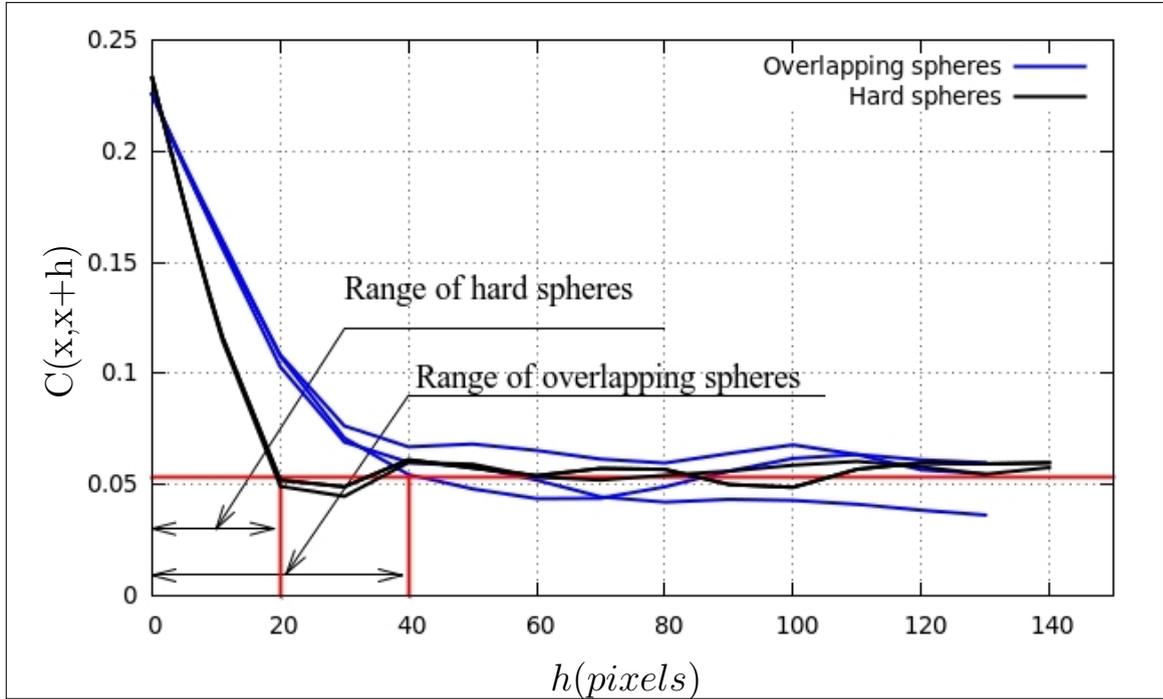


FIGURE III.19 – Comparaison entre les covariances des deux microstructures 1 et 2, de fraction volumique $p = 23\%$, El Moumen et al. (2013).

III.4.2 Caractérisation par la portée intégrale et par la variance

La portée intégrale est un paramètre statistique qui nous permet de caractériser une microstructure de type matrice-inclusion. Cette portée intégrale A a été introduite par Kanit et al. (2003) pour étudier la taille du VER des microstructures de mosaïque de Voronoï, puis utilisée par Jean (2009) pour la caractérisation morphologique et dielectrique des élastomères chargés de noir de carbone. Elle sera utilisée dans cette étude pour quantifier l'effet de l'interconnexion des inclusions sur le comportement des microstructures hétérogènes. La détermination du sens physique de ce paramètre permet de mieux comprendre la taille et le comportement d'un matériau pour les quels les paramètres mesurés ont une bonne représentativité.

La portée intégrale est définie mathématiquement par la relation :

$$A = \frac{1}{C(x, 0) - C(x, h)^2} \int (C(x, h) - C(x, 0)^2) dh \quad (\text{III.19})$$

Dans ce qui suit, on exploite la relation entre ce paramètre et d'autres paramètres statistiques, mécaniques (k et μ) et morphologiques de la microstructure.

En considérant une grandeur aléatoire $Z(x)$, définie sur un volume fini V , on

écrit la variance de cette grandeur par :

$$D_Z^2 = E((Z(x) - E(Z(x)))^2) \quad (\text{III.20})$$

$$= E(Z(x)^2) - E(Z(x))^2 \quad (\text{III.21})$$

$$= \frac{1}{V} \int Z(x)^2 dx - \left(\frac{1}{V} \int Z(x) dx \right)^2 \quad (\text{III.22})$$

En réalité dans la partie calcul EF, et pour l'ensemble des réalisations n , le volume total V contenant N inclusion, est découpé en N' sous-volumes de même volume v (figure III.20). Sur ces petits volumes on mesure les champs moyens Z_v comme suit :

$$Z_v = \frac{1}{v} \int Z(x) dx \quad (\text{III.23})$$

La moyenne de cette grandeur sur le volume total V est égale à :

$$\langle Z_v \rangle_V = \frac{1}{N'} \sum Z_v \quad (\text{III.24})$$

$$= \frac{1}{N'} \sum \frac{1}{v} \int Z(x) dx \quad (\text{III.25})$$

$$= \frac{1}{V} \int Z(x) dx \quad (\text{III.26})$$

Enfin, la variance de la valeur moyenne Z_v sur le volume V :

$$D_Z^2(v) = E((Z(v) - E(Z(v)))^2) \quad (\text{III.27})$$

$$= E(Z(v)^2) - E(Z(v))^2 \quad (\text{III.28})$$

$$= E(Z(v)^2) - \langle Z_v \rangle_V^2 \quad (\text{III.29})$$

$$= E(Z(v)^2) - \left(\frac{1}{V} \int Z(x) dx \right)^2 \quad (\text{III.30})$$

Lorsque v est suffisamment grand ($v \gg A$), [Matheron \(1975\)](#) propose une relation entre les différentes propriétés de la microstructure comme suivant :

$$D_Z^2(v) = D_Z^2 \frac{A}{v} \quad (\text{III.31})$$

Avec A la portée intégrale. En fait pour déterminer cette portée intégrale, on décompose le volume de la microstructure V en sous-volumes v et on procède par

la technique du fittage de la lois III.31. La variance $D_Z^2(v)$ est calculée à partir de l'ensemble des réalisations n de chaque sous-volume v .

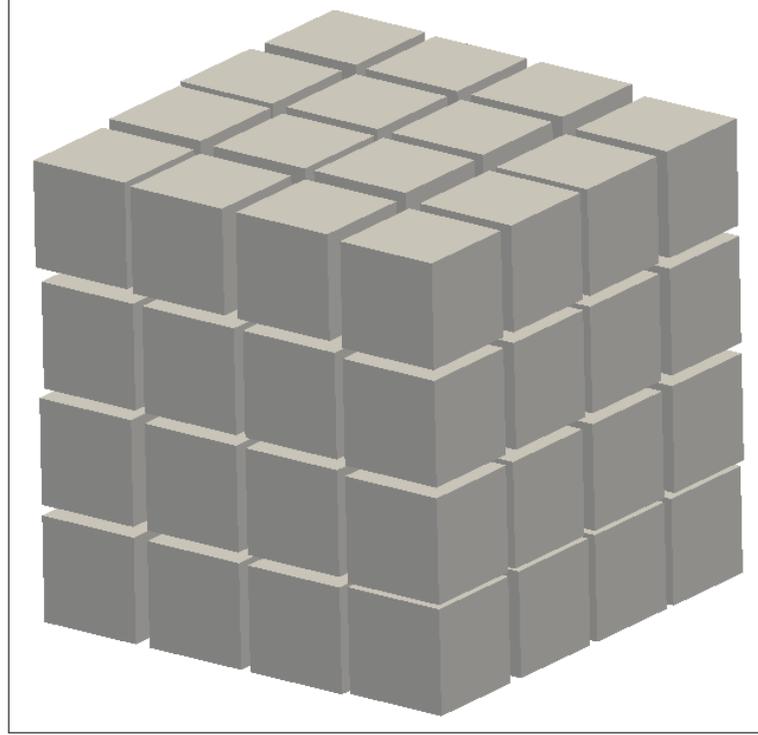


FIGURE III.20 – Decoupage d'un volume V en $N' = 64$ sous-volumes de volume v .

Dans le cas d'une microstructure biphasée, de type matrice continue et inclusion discontinue, [Caillaud et al. \(1994\)](#) ont proposé une expression de la pointe variance D_Z^2 pour le coefficient de compression k et pour le coefficient de cisaillement μ . Cette relation est donnée comme suit :

$$\begin{cases} D_k^2 = p(1-p)(k_i - k_m)^2 \\ D_\mu^2 = p(1-p)(\mu_i - \mu_m)^2 \end{cases} \quad (\text{III.32})$$

La variation de la variance $D_{k,\mu}^2(N)$ en fonction du nombre des inclusions N , de la fraction volumique fixée p et de la portée intégrale A en tenant compte des deux relations III.31 et III.32 est donnée comme suit :

$$\begin{cases} D_k^2(N) = p(1-p)(k_i - k_m)^2 \frac{A}{N} \\ D_\mu^2(N) = p(1-p)(\mu_i - \mu_m)^2 \frac{A}{N} \end{cases} \quad (\text{III.33})$$

Avec $Z = k, \mu$ sont les propriétés élastiques de la phase des inclusions (i) et de la matrice (m).

La variation de la variance en fonction de la taille du volume dans le cas du com-

portement élastique est donnée par la figure III.21. Il faut noter que cette variance a été déterminée à partir de l'ensemble des réalisations de chaque volume.

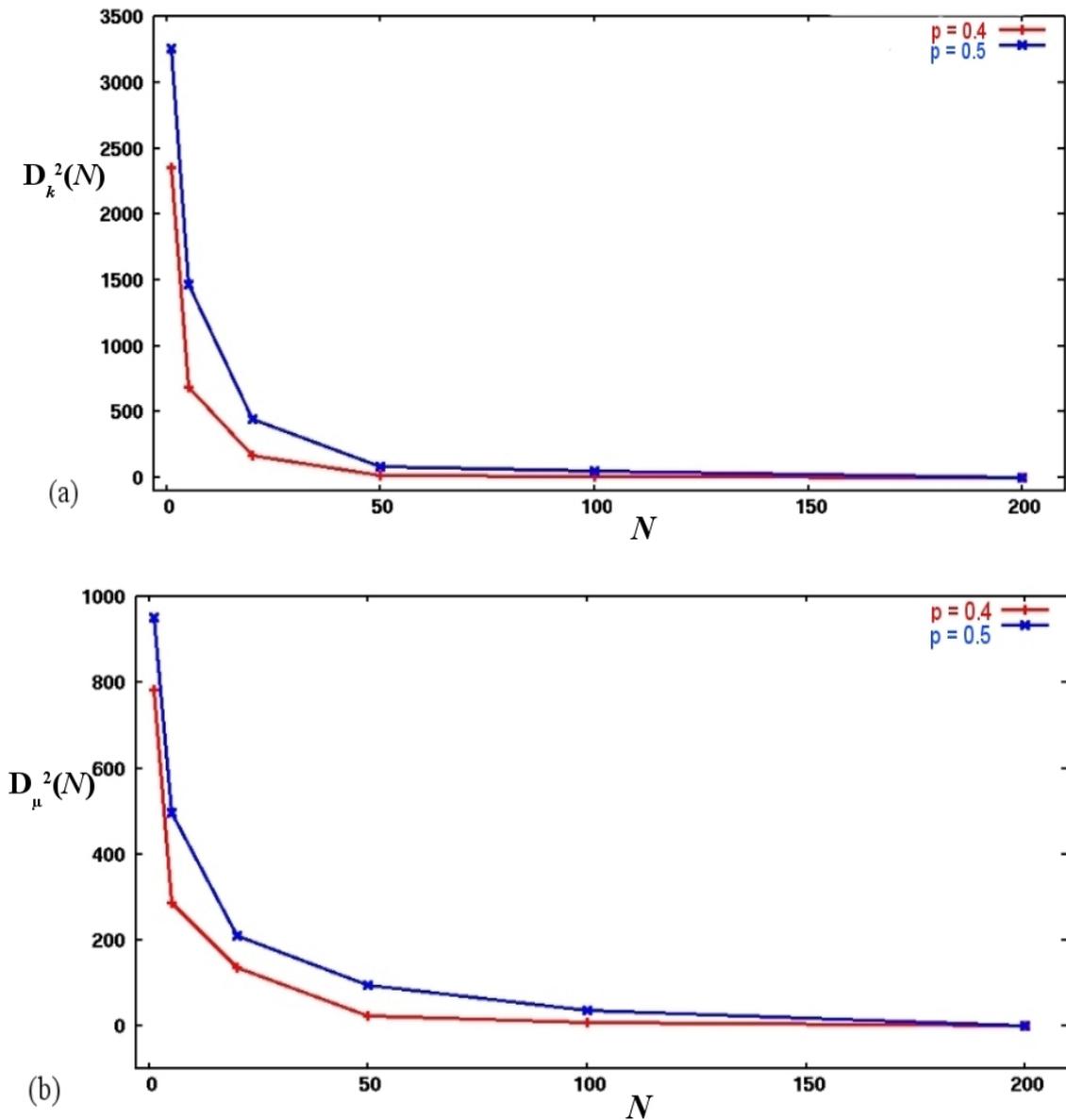


FIGURE III.21 – Variation de la variance en fonction de la taille du volume : (a) coefficient de compression et (b) coefficient de cisaillement

A partir de ces graphes, on remarque que la variance diminue puis converge vers zéro si on se rapproche du *VER*. Cela démontre que pour les volumes larges, l'ensemble des réalisations donne la même valeur de la propriété estimée, et qu'une seule réalisation est suffisante pour la prédiction d'un comportement élastique. Au contraire, dans le cas des petits volumes où la variance est importante, la représentativité des résultats est achevée en utilisant plusieurs sous-volumes.

Les résultats de calcul numérique obtenus par les sous-volumes, ont été utilisés pour déterminer la variance $D_{k,\mu}^2(N)$. La méthode de fittage entre $D_{k,\mu}^2(N)$ et chaque N selon l'équation III.33, donne les valeurs de la portée intégrale A , notée A_{F_1} et A_{F_2} , pour les microstructures 1 et 2 respectivement. Ces valeurs sont comparées avec le rapport $A^* = p/N_{VER}$, qui correspond au volume d'une inclusion dans le VER . On écrit :

$$A^* = \frac{p}{N_{VER}} = \frac{p}{V_{VER}} \quad (\text{III.34})$$

L'ensemble des résultats de fittage est reporté dans le tableau III.4, pour les différentes configurations étudiées et pour les différentes propriétés estimées.

Microstructure		p	$A^* = p/N_{RVE}$	A_F	A_F/A^*
Microstructure 1	k	0.23	0.0011	0.001	1
	μ	0.23	0.0011	0.001	1
Microstructure 2 : cas 1	k	0.4	0.002	0.016	8
	μ	0.4	0.002	0.018	9
Microstructure 2 : cas 2	k	0.5	0.0025	0.019	7.6
	μ	0.5	0.0025	0.020	8

TABLE III.4 – Comparaison des portées intégrales dans chaque microstructure.

Récemment, [Jeulin \(2012\)](#) observe que la portée intégrale A ne dépend pas de volume de microstructure V , à condition que ce volume soit suffisamment large, pour assurer la stationnarité du champ en minimisant l'effet des conditions aux limites. On démontre ici, que ce volume est supérieur ou égal au VER .

Une autre interprétation est proposée pour ce paramètre A par [Kanit et al. \(2003\)](#). Selon les auteurs, c'est un paramètre qui dépend de la taille des grains pour une microstructure de mosaïque de Voronoï. Dans cette thèse, on combine les résultats des deux approches précédentes pour déduire une interprétation commune. On propose que la portée intégrale A est un paramètre purement morphologique égal au volume d'une inclusion (interprétation de [Kanit et al. \(2003\)](#)) dans le VER déterministe (interprétation de [Jeulin \(2012\)](#)).

III.4.3 Concept de la morphologie équivalente

À partir de nos résultats de covariance et de fittage, il apparaît que A ne représente que le volume d'une inclusion dans le VER des microstructures à base de schéma de sphères dures. Tandis que, dans le cas des inclusions à base de schéma Booléen, elle est égale à 8 fois le volume d'une inclusion dans le VER

(tableau III.4). On écrit alors, $A_1 = A_{F_1} = p^a/N_{VER_1}$ pour la microstructure 1 et $A_2 = A_{F_2} = 8(p/N_{VER_2})$ pour la microstructure 2. Avec N_{VER} étant le nombre des inclusions dans chaque VER . On peut donc proposer une approximation de la portée intégrale comme suit :

$$\begin{cases} A = A_1 = \frac{p^a}{N_{VER}} & : \text{Pour le schéma de sphères dures} \\ A = A_2 \simeq 8\frac{p}{N_{VER}} & : \text{Pour le schéma Booléen} \end{cases} \quad (\text{III.35})$$

On compare les deux expressions, on déduit une relation entre les portées intégrales A_1 et A_2 des deux microstructures :

$$A_2 = 8A_1 \Rightarrow \frac{p}{N_{VER_2}} = 8\frac{p^a}{N_{VER_1}} \quad (\text{III.36})$$

D'après les équations III.17 et III.36, on en déduit le rapport entre les deux tailles du VER :

$$\frac{0.6 p^a}{N_{VER_2}} = 8\frac{p^a}{N_{VER_1}} \Rightarrow \left(\frac{N_{VER_1}}{N_{VER_2}}\right) \simeq 13 \quad (\text{III.37})$$

On remarque que la taille du VER des microstructures sans interconnexion des inclusions (VER_1) et plus large que le VER des microstructures avec interconnexion (VER_2). Cela à cause de la distance de répulsion entre les particules voisines dans la première microstructure.

Comme A représente le volume d'une inclusion dans chaque microstructure, on peut établir une relation entre les rayons des inclusions R_1 de la microstructure 1 et R_2 pour la microstructure 2 :

$$A_2 = 8A_1 \Rightarrow \frac{4}{3}\pi R_2^3 = 8\frac{4}{3}\pi R_1^3 \implies R_2 = 2R_1 \quad (\text{III.38})$$

Ce résultat confirme celui obtenu par la covariance (figure III.19). Cela veut dire que le rayon des sphères dans la morphologie originale, avec interconnexion des inclusions (microstructure 2), admet un rayon équivalent dans une morphologie équivalente sans interconnexion deux fois plus grand, afin d'obtenir la même portée intégrale A , et par conséquent les mêmes propriétés élastiques.

A partir de ces relations morphologiques entre les deux microstructures, nous proposons le concept de la morphologie équivalente (CME). Les relations d'équivalence III.17, III.37 et III.38 qui lient les propriétés des deux microstructures seront utilisées pour définir cette notion, qui est valable pour l'estimation des propriétés élastiques.

Ce concept consiste à substituer une microstructure contenant des inclusions

interconnectées de rayon R_1 par une autre microstructure fictive contenant des inclusions non-interconnectées de rayon $R_2 = 2R_1$. Ces deux microstructures n'ont pas nécessairement les mêmes tailles du *VER* mais elles ont les mêmes propriétés élastiques. Ce concept est illustré par la figure III.22, conduit à une simplification de la détermination des propriétés élastiques effectives.

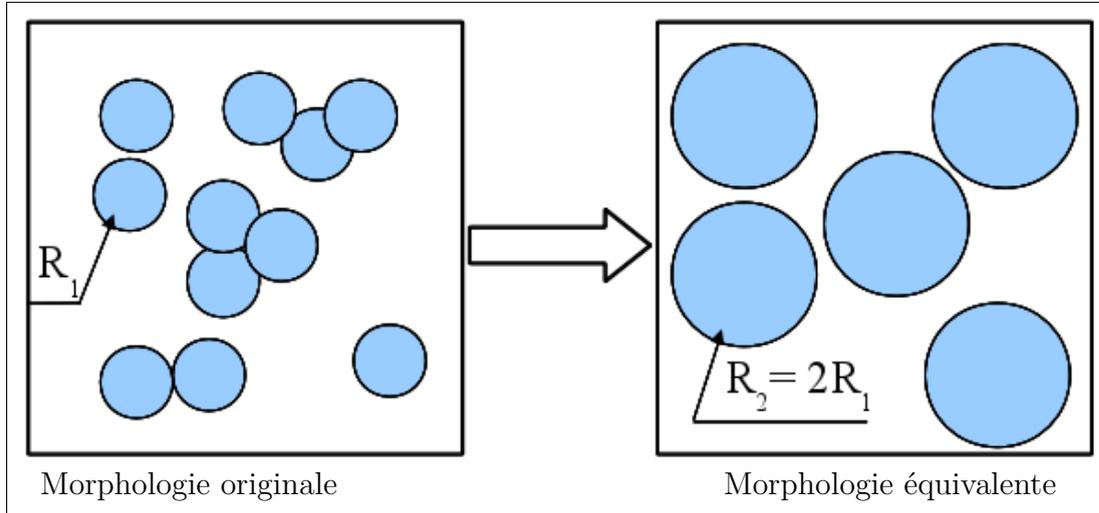


FIGURE III.22 – Concept de la morphologie équivalente.

Par exemple dans notre cas : la microstructure 2 peut être remplacée par la microstructure 1, à condition que la variation de la fraction volumique satisfait l'équation III.17. Le rapport entre les deux *VER* est donné par l'équation III.37 et la relation entre les rayons des inclusions de chaque microstructure est donnée par l'équation III.38.

III.4.4 Variation du *VER* en fonction de la fraction volumique

On peut déterminer pour une erreur absolue ϵ_{abs} autour d'une propriété effective Z , la taille du *VER*, à partir de la connaissance de quelques paramètres morphologiques, mécaniques et statistiques de la microstructure. L'utilisation des lois de la morphologie mathématique permet de quantifier cette taille. Le cas de l'équation utilisée par Jean (2009) pour les élastomères sera utilisée dans cette étude pour nos microstructures. Cette équation est de la forme suivante :

$$V(n) = \frac{4}{\epsilon_{abs}^2} p(1-p)(Z_i - Z_m)^2 \frac{A}{n} \quad (\text{III.39})$$

Avec n est le nombre des réalisations dans un volume V .

La taille du VER est définie par un volume qui ne dépend pas du nombre de réalisations n . Autrement dit, une seule réalisation est suffisante pour estimer le comportement élastique, on a $n(V = VER) = 1$. Par conséquent, on peut déduire une estimation à partir de l'équation III.39 pour une erreur ϵ_{abs} fixée :

$$V_{VER} = \begin{cases} V_{VER_1} = \frac{4p(1-p)(Z_i - Z_m)^2}{\epsilon_{abs}^2} \frac{p^a}{V_{VER_1}} \\ V_{VER_2} = \frac{4p(1-p)(Z_i - Z_m)^2}{\epsilon_{abs}^2} 8 \frac{p}{V_{VER_2}} \end{cases} \quad (III.40)$$

Cette équation donne la taille du VER , à partir de la seule connaissance de la fraction volumique p et les propriétés mécaniques de chaque phase. D'une manière générale, on peut écrire la variation du VER en fonction de la fraction volumique pour une microstructure aléatoire comme suit :

$$V_{VER}^2 = \frac{4p(1-p)(Z_i - Z_m)^2}{\epsilon_{abs}^2} p = \zeta p^2(1-p) \quad (III.41)$$

Où ζ est une constante qui dépend des propriétés élastiques et de l'erreur absolue.

III.5 Synthèse

L'objectif de ce chapitre est de quantifier la différence entre deux microstructures hétérogènes. La première à base d'un schéma Booléen des sphères et la seconde à base d'un schéma de sphères dures. L'effet de l'interconnexion des inclusions a été étudié par les techniques d'homogénéisation et les lois statistiques de la morphologie mathématique. Plusieurs tailles des volumes (réalisations) des deux microstructures ont été générées. L'ensemble de ces réalisations sont utilisées pour déterminer la fluctuation des propriétés macroscopiques, la variation du VER en fonction de la fraction volumique, la variation de la variance et les portées intégrales de chaque microstructure. La notion de la portée est validée comme un paramètre purement morphologique ; à savoir *le volume d'une inclusion dans le VER des microstructures à base du schéma de sphères dures*. Par contre, dans le cas du schéma Booléen des sphères, elle est égale à 8 fois le volume d'une inclusion dans le VER . L'ensemble des résultats nous a conduit à proposer un nouveau concept appelé "*le concept de la morphologie équivalente*". Ce concept consiste à remplacer une microstructure contenant des inclusions interconnectées, par une autre dite morphologie équivalente contenant des inclusions non-interconnectées.

Chapitre IV

Application du concept de la morphologie équivalente à la conductivité thermique des milieux poreux

Résumé :

On s'intéresse dans cette partie, à l'étude de la conductivité thermique effective des matériaux poreux. L'homogénéisation thermique est réalisée sur des microstructures aléatoires contenant chacune des pores sphériques ou ellipsoïdales. Deux types de microstructures seront considérées : microstructure 1 avec une distribution aléatoire des pores non-interconnectés (schéma de sphères dures) et microstructure 2 contenant des pores interconnectés (schéma Booléen). L'objectif est de quantifier la différence entre ces deux microstructures, afin de trouver des relations entre leurs paramètres morphologiques et leurs comportements thermiques. Les conditions aux limites périodiques sont appliquées pour l'approche numérique. La variance, la covariance et la portée intégrale sont utilisées pour l'approche statistique. Le concept de la morphologie équivalente présenté dans le troisième chapitre pour le comportement élastique sera validé dans cette partie pour le cas de la conductivité thermique des matériaux poreux.

Sommaire

IV.1 Approche d'homogénéisation numérique	98
IV.1.1 Comportement thermique des phases	98
IV.1.2 Equations constitutives et conditions aux limites	99
IV.1.3 Densité de maillage thermique	99

IV.1.4	Homogénéisation numérique en transfert thermique	100
IV.1.4.1	Fluctuations de la fraction volumique des pores	101
IV.1.4.2	Fluctuation de la conductivité apparente et effective	102
IV.1.4.3	Effet du contraste et de la porosité	106
IV.2	Analyse thermique par l'approche statistique	111
IV.2.1	Identification de la portée intégrale dans une microstructure poreuse	111
IV.2.2	Variation du VER thermique	112
IV.2.3	Concept de la morphologie équivalente	115
IV.3	Synthèse	117

IV.1 Approche d'homogénéisation numérique

Durant ces dernières années, le transfert thermique dans les matériaux poreux présente un important intérêt dans de nombreuses applications de type chimique, mécanique, géologique, environnemental et pétrolière. Les applications récentes des matériaux poreux s'étalent aux domaines de la microélectronique et ceux du bio-médical. Pour ces raisons, l'étude de la conductivité thermique dans un matériau poreux en utilisant les différentes approches est d'une importance primordiale pour les équipements industriels.

Dans cette étude, l'analyse multi-échelle de la conductivité thermique effective par les approches analytiques, numériques et statistiques sera développée. Deux types de microstructures ont été utilisées : microstructure 1 à base d'un schéma des sphères dures (pores non-interconnectés) et microstructure 2 à base d'un schéma Booléen de sphère (pores interconnectés). La notion de la variance, la covariance et de la portée intégrale est utilisée pour la caractérisation statistique. Les conditions aux limites périodiques sont utilisées pour la simulation numérique. La notion de la morphologie équivalente proposée dans le troisième chapitre pour les calculs d'élasticité sera validée dans cette partie pour la conductivité thermique.

IV.1.1 Comportement thermique des phases

Le matériau considéré a une microstructure aléatoire virtuelle de type matrice-inclusion. Les inclusions sont simulées par des pores. Le comportement de la matrice et des pores est thermiquement linéaire.

La conductivité thermique de la phase matrice varie entre $\lambda_m = 0.3$ et 1000 W/m.K qui correspond respectivement au plâtre et au diamant. Pour la phase des pores, on considère une conductivité $\lambda_i = 0.024 \text{ W/m.K}$. La fraction volumique p du matériau est contrôlée par la taille et le nombre des pores. Cette fraction varie entre $p = 5\%$ à $p = 50\%$.

Pour les calculs thermiques, trois cas de configurations (tableau [IV.1](#)) sont considérés. Ces configurations concernent l'étude du comportement des deux microstructures poreuses.

- Microstructure 1 : contenant une distribution des pores non-interconnectés.
- Microstructure 2 : contenant une distribution des pores interconnectés.

La génération et le maillage de ces deux microstructures ont été présentés dans le deuxième chapitre. La méthode des éléments multiphasés a été utilisée pour la superposition d'une grille et une microstructure poreuse. Selon [Zhou et al. \(2012\)](#), cette méthode est plus répandue dans le domaine du thermique et elle donne des

	λ_m (W/m.K)	λ_i (W/m.K)	contraste
Cas 1	0.3	0.024	12.5
Cas 2	0.5	0.024	20.8
Cas 3	0.6	0.024	25

TABLE IV.1 – Comportement thermique de différentes configurations étudiées.

bonnes estimations de la conductivité thermique.

IV.1.2 Equations constitutives et conditions aux limites

Le point le plus important pour la simulation thermique des matériaux par l'approche numérique est le choix des conditions aux limites appliquées sur un volume élémentaire V . En général, le transfert de chaleur par conduction dans un matériau poreux est décrit par la loi de Fourier, comme suit :

$$\underline{q} = - \underline{\lambda} \underline{\nabla T} \quad (\text{IV.1})$$

Avec \underline{q} est le flux thermique, $\underline{\lambda}$ est le tenseur symétrique de la conductivité thermique, T la température et $\underline{\nabla T}$ le gradient de la température.

En effet, comme dans le cas des problèmes élastiques, les conditions aux limites thermiques doivent aussi satisfaire le critère de Hill, [Wu et al. \(2013\)](#).

Dans cette étude, nous nous intéressons aux microstructures poreuses purement aléatoires. Pour ce type de matériaux, [Nguyen et al. \(2011\)](#) ont montré que les conditions aux limites périodiques convergent rapidement en fonction de la taille du VER comparées aux autres conditions aux limites thermiques, UGT (Uniforme Gradient of Temperature) et UHF (Uniforme Heat Flux). La méthodologie d'application et d'utilisation de ces conditions aux limites sont décrites dans la première partie du troisième chapitre.

IV.1.3 Densité de maillage thermique

Dans cette partie, la convergence de la conductivité thermique macroscopique dans un matériau poreux a été vérifiée. Nous essayons d'obtenir le nombre minimum des éléments finis nécessaires pour mailler un pore.

La densité du maillage est définie comme le volume du matériau représenté par un EF. À cette effet, une microstructure 3D spécifique contenant des pores sphériques aléatoires a été considérée. Le nombre des pores et la géométrie de la microstructure sont inchangés, mais différentes densités (résolutions) de maillage ont été utilisées.

Le nombre des noeuds allant de 208 (maillage contient 9 EFs) à 116281 (maillage contient 27000 EFs) pour le même volume V contenant $N = 200$ pores.

La figure IV.1 montre les résultats de la simulation de la conductivité thermique macroscopique en fonction du nombre des EF utilisés pour chaque densité. On remarque que la conductivité thermique diminue rapidement pour les petits maillages puis se stabilise pour les maillages plus fins. Cette figure montre également que le nombre des FEs dans lequel la convergence commence est d'environ 15000 EF/200 pores. Cela veut dire qu'une densité de maillage de 75 éléments quadratiques par pore est nécessaire, pour une précision de 1%. Suite à cette étude, une densité de 135 EF/pore a été adoptée pour avoir une précision autour de 0.1%.

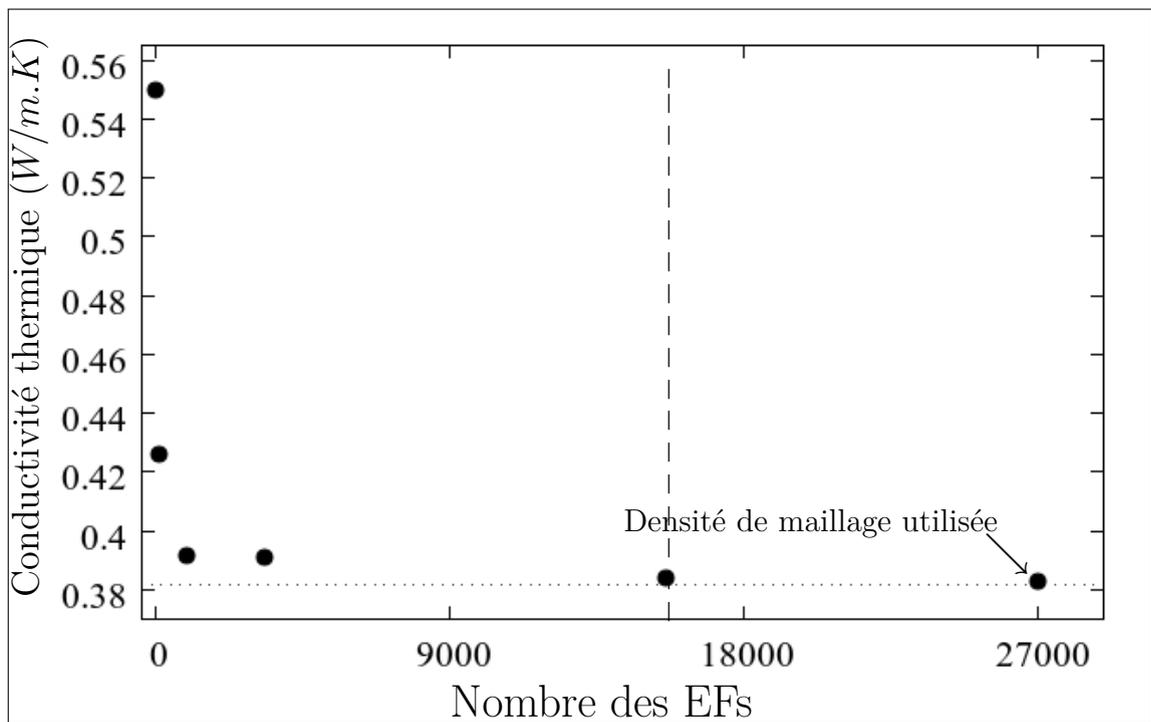


FIGURE IV.1 – Variation de la conductivité thermique en fonction du nombre des éléments fins.

IV.1.4 Homogénéisation numérique en transfert thermique

On rappelle que les propriétés apparentes ont été définies comme le résultat du calcul EF obtenu par des volumes inférieurs au VER . Pour chaque volume V de matériau poreux contenant N pores, n différentes réalisations ont été créées et les PBC ont été appliquées pour estimer la conductivité thermique. Ensuite, pour chaque taille de volume V , la valeur moyenne et l'intervalle de confiance sur les conductivités thermiques macroscopiques sont représentés graphiquement. Les résultats sont

donnés en fonction de N . Le nombre de réalisations n , utilisé pour chaque volume V contenant N pores, est donné dans le tableau IV.2.

En effet, chaque réalisation donne deux propriétés : une propriété morphologique, c'est-à-dire la fraction volumique de pores p et une propriété thermique, c'est-à-dire la conductivité thermique macroscopique. L'ensemble des résultats obtenus sont utilisés pour décrire la fluctuation de la fraction volumique des pores, la fluctuation de la conductivité thermique apparente, et la variation de la taille du VER thermique en fonction de p et du contraste c .

	v_1	v_2	v_3	v_4	v_5	v_6	V
N	2	5	20	50	100	200	250
n	216	40	20	15	9	3	2

TABLE IV.2 – Nombre de réalisations n pour chaque sous volume contenant N pores.

IV.1.4.1 Fluctuations de la fraction volumique des pores

En général, pour les matériaux poreux, on distingue deux types de fractions volumiques. La fraction volumique apparente p^a obtenue par N pores non-interconnectés et la fraction volumique réelle p obtenue par le même nombre des pores N , mais avec possibilité d'interconnexion.

L'objectif de cette partie est de déterminer une relation, ou une équivalence, entre les deux fractions volumiques p^a et p . Dans le cas des matériaux poreux non-interconnectés, la fraction volumique p^a est évaluée à partir de l'équation suivante :

$$p^a = N \frac{V_s}{V_{total}} \quad (\text{IV.2})$$

Avec V_s est le volume d'un pore et V_{total} le volume total du matériau. Afin de comparer la variation des deux fractions volumiques apparentes et réelles, p^a et p , plusieurs volumes ont été considérés en augmentant le nombre de pores N entre 2 et 250. La figure IV.2 montre la variation de la fraction volumique relative p/p^a en fonction de N pour l'ensemble des réalisations présentées dans le tableau IV.2. L'objectif ici est d'obtenir une relation entre p et p^a dans le cas des volumes larges. On remarque que la fraction volumique relative admet une valeur asymptotique autour de 0.28.

A partir des résultats numériques, il semble que la fraction volumique des pores interconnectés est équivalente à une certaine fraction volumique des pores non-interconnectés. Ces résultats signifient aussi que 70% du volume total des pores est interconnecté. On peut écrire pour les grands volumes :

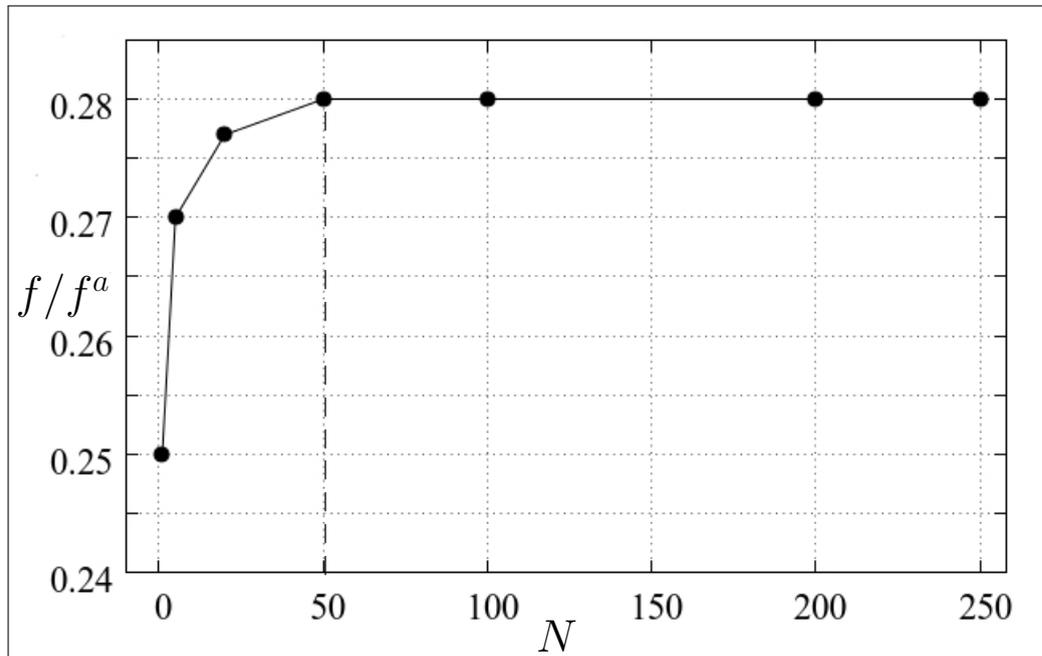


FIGURE IV.2 – Variation de la fraction volumique relative p/p^a en fonction de N pour une microstructure poreuse.

$$p \simeq 0.28 p^a \quad (\text{IV.3})$$

IV.1.4.2 Fluctuation de la conductivité apparente et effective

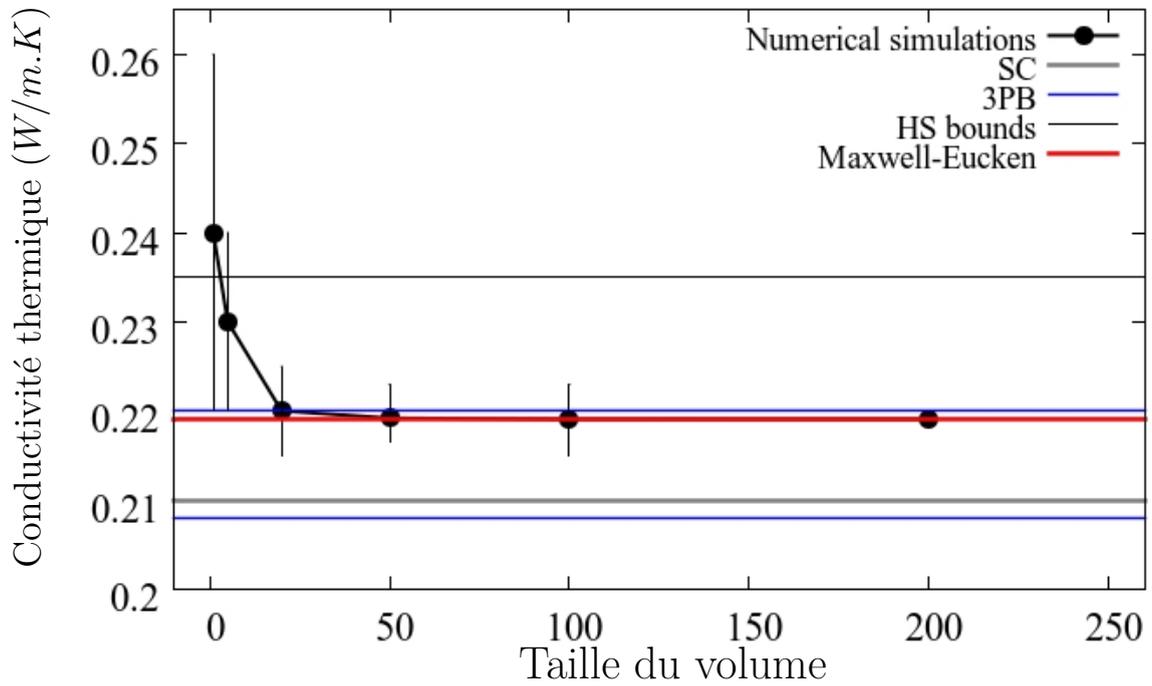
Pour l'homogénéisation numérique de la conductivité thermique des matériaux poreux, des exemples de résultats de la simulation sont présentés respectivement sur les figures IV.3 et IV.4 pour les deux microstructures 1 et 2. Ces figures représentent la variation des valeurs moyennes et leurs intervalles de confiance en fonction de la taille du volume de matériaux poreux. Elles montrent aussi que la dispersion des résultats diminue lorsque la taille de la microstructure augmente. L'erreur EF autour de la conductivité effective est représentée par des barres verticales. Cette erreur diminue avec l'augmentation du volume V . Il faut noter que l'erreur tend vers zéro lorsque le volume $V = VER$. Cela veut dire qu'une réalisation est suffisante pour décrire le comportement thermique d'une microstructure poreuse.

Ces figures présentent aussi les estimations obtenues par l'approche analytique en utilisant les modèles et les bornes. Concernant ces estimations analytiques, on considère pour les bornes : les bornes de HS et les bornes d'ordre trois (3PB) et pour les modèles, on présente : les deux formes de modèle de Maxwell (ME1 et ME2) et l'auto-cohérent (SC). Les résultats numériques obtenus dans le VER de chaque

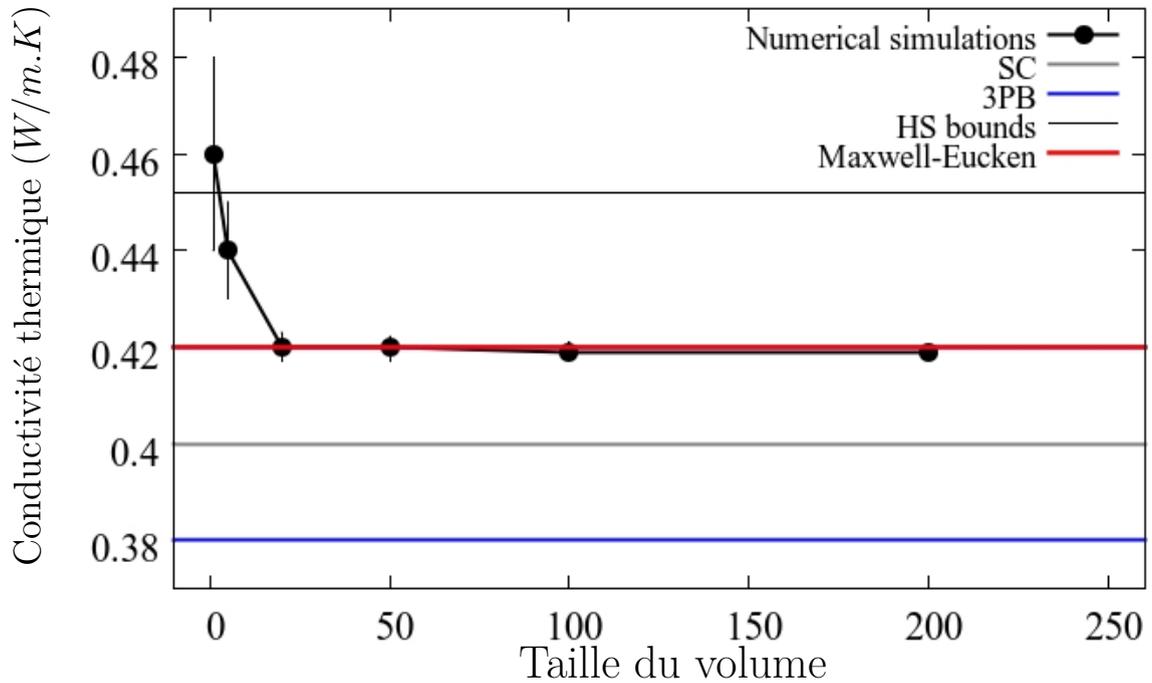
microstructure est présenté sur le tableau IV.3. On remarque que, l'ensemble des résultats converge vers la borne supérieure de 3PB. En général, selon Smith (1976) il faut noter que la conductivité effective obtenue par la simulation numérique est proche de la borne inférieure de 3PB pour une matrice moins conductible par rapport aux pores. A l'inverse, pour un matériau poreux, où la matrice est beaucoup plus conductible, les résultats de la simulation convergent vers la borne supérieure.

	Cas	HS^-	ME 2	$3PB^-$	SC	PBC	ME 1	$3PB^+$	HS^+
Microstr ucture 1	1	0.137	0.140	0.208	0.210	0.218	0.218	0.220	0.235
	2	0.170	0.170	0.330	0.340	0.355	0.360	0.360	0.383
	3	0.180	0.180	0.380	0.400	0.418	0.420	0.420	0.454
Microstr ucture 2	1	0.137	0.140	0.200	0.210	0.218	0.218	0.220	0.235
	2	0.170	0.170	0.300	0.340	0.360	0.360	0.360	0.383
	3	0.180	0.180	0.340	0.400	0.420	0.420	0.420	0.454

TABLE IV.3 – Comparaison entre les résultats de l'approche numérique et ceux de l'approche analytique d'une microstructure poreuse de fraction volumique $p = 0.23$.

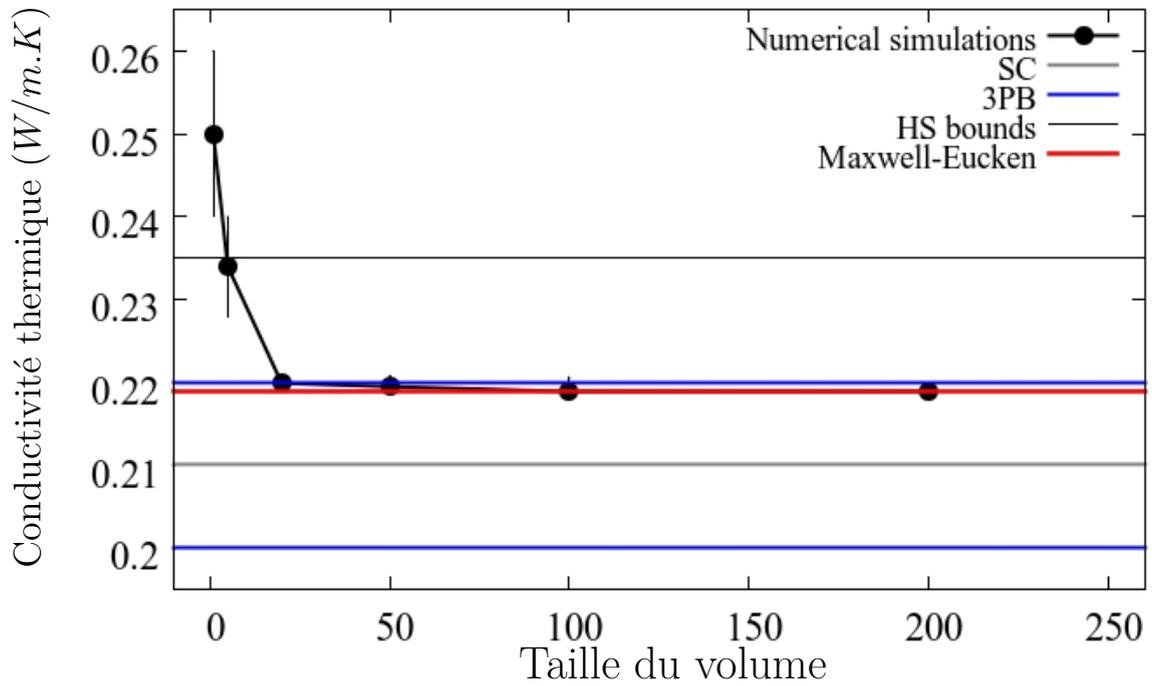


(a)

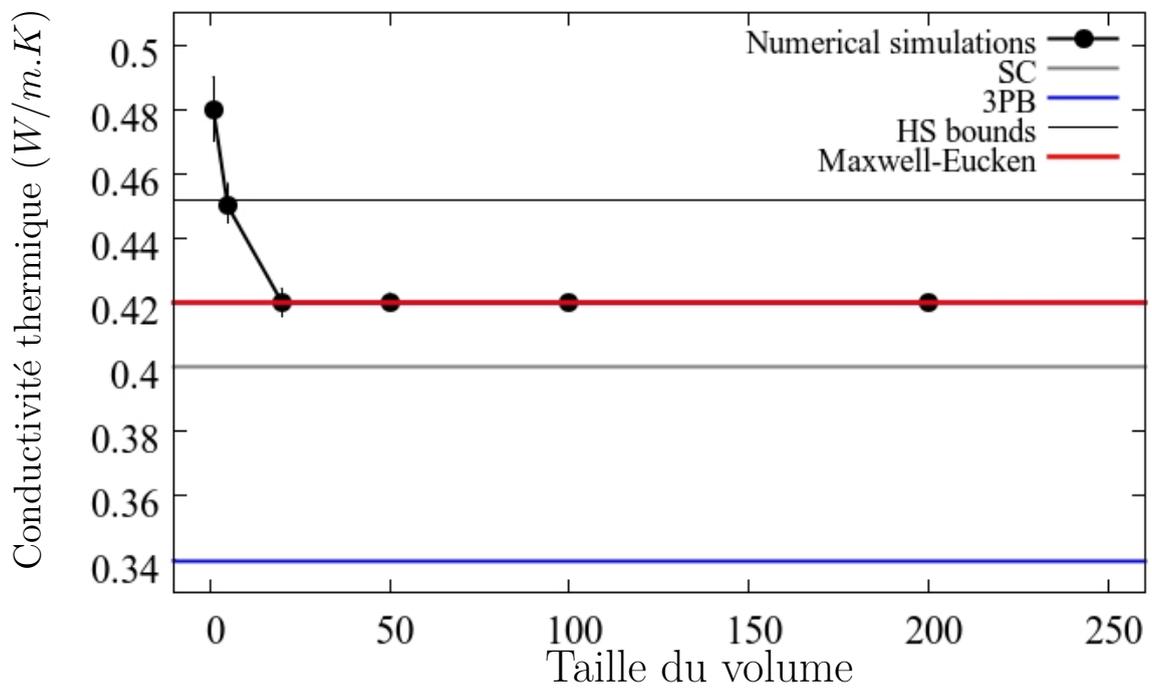


(b)

FIGURE IV.3 – Variation de la conductivité thermique apparente en fonction de la taille du volume dans une microstructure contenant des pores non-interconnectés : (a) cas 1 et (b) cas 3.



(a)



(b)

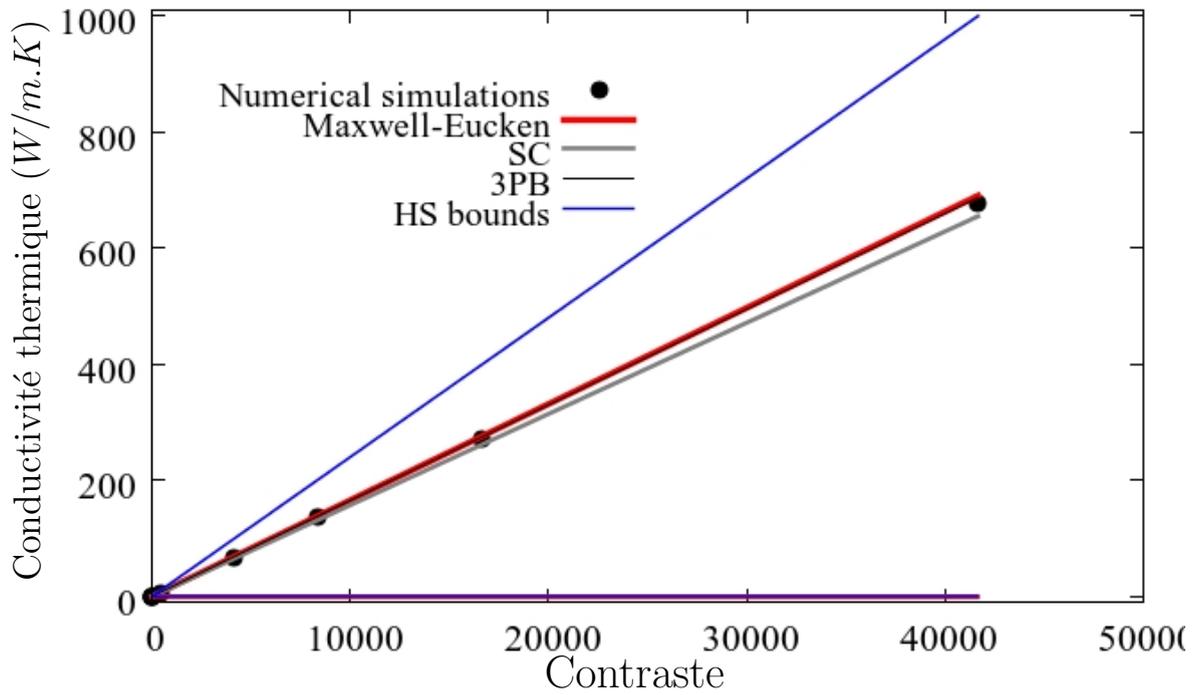
FIGURE IV.4 – Variation de la conductivité thermique apparente en fonction de la taille du volume dans une microstructure contenant des pores interconnectés : (a) cas 1 et (b) cas 3.

IV.1.4.3 Effet du contraste et de la porosité

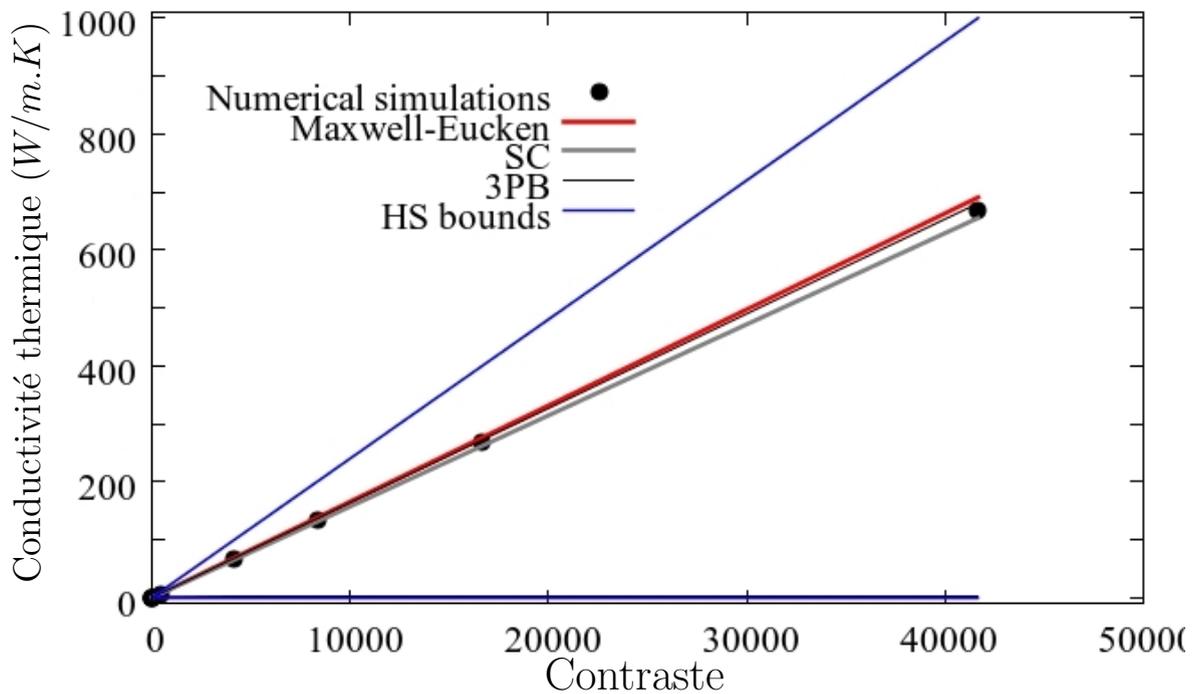
On rappelle que le contraste d'un matériau poreux est défini par $c = \lambda_m/\lambda_i$. L'effet de ce contraste sur la conductivité thermique des microstructures poreuses est donnée sur la figure IV.5. De même, l'effet de la fraction volumique et de la forme des pores sur la conductivité est aussi étudié, puis présenté respectivement sur les figures IV.6 et IV.7.

A partir des résultats numériques, il semble que la forme des pores a un effet mineur sur la conductivité thermique dans le cas des faibles contrastes. On note que la conductivité thermique augmente avec l'augmentation du contraste d'une façon linéaire. A l'inverse de la fraction volumique des pores, la conductivité thermique diminue avec l'augmentation de la proportion des pores. Il apparaît aussi que pour 50 % des pores, la conductivité est réduite de 0.6 à 0.24 $W/m.K$.

Les figures IV.5, IV.6 et IV.7 montrent que la différence maximale entre les simulations numériques et les estimations analytiques est obtenue pour une grande valeur de contraste avec une fraction volumique des pores importante. On déduit aussi que les bonnes estimations analytiques sont données par le modèle de Maxwell-Eucken (ME) et 3PB, en particulier pour les faibles valeurs de contraste.



(a)



(b)

FIGURE IV.5 – Variation de la conductivité thermique en fonction du contraste d'une microstructure de pores : (a) non-interconnectées et (b) interconnectées.

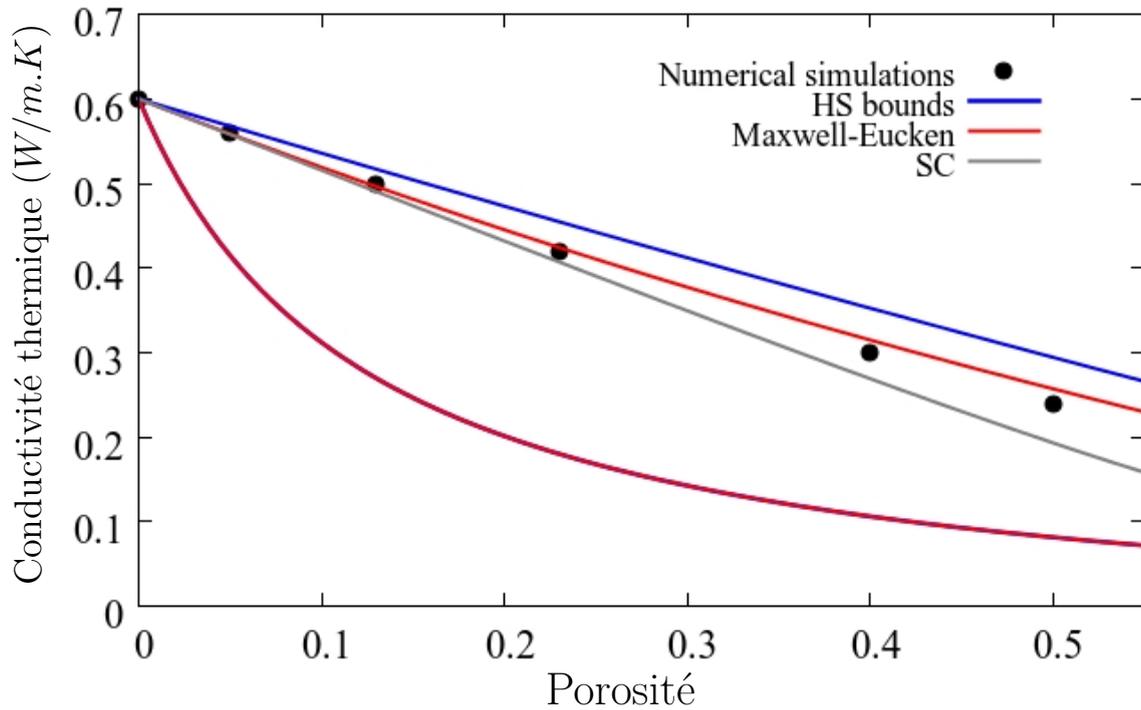


FIGURE IV.6 – Variation de la conductivité thermique en fonction de la fraction volumique des pores pour un contraste $c = 25$.

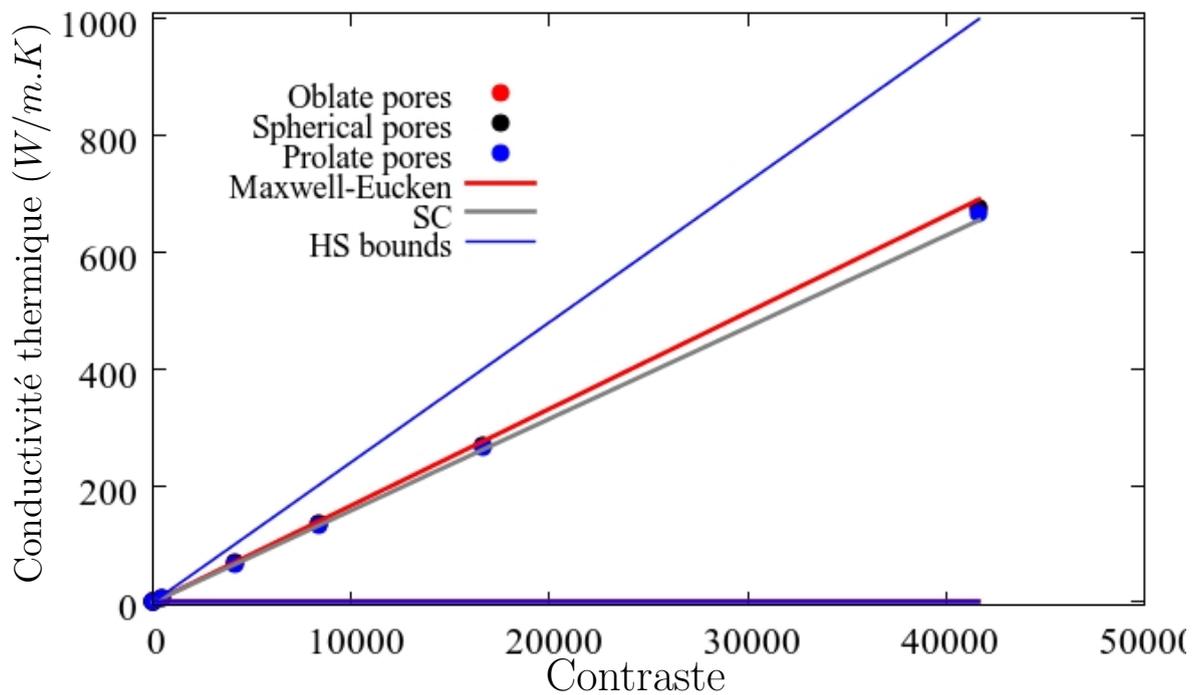


FIGURE IV.7 – Variation de la conductivité thermique pour les différentes formes des pores, $p = 0.23$.

Nous présentons quelques images 3D des microstructures après l'application des conditions aux limites thermiques. Les figures IV.8, IV.9 et IV.10 montrent la distribution de la conductivité thermique locale dans le *VER* pour différentes configurations étudiées dans ce chapitre. L'effet de la porosité, du contraste et de la forme sur la conductivité locale est aussi présenté. A partir de ces figures, nous observons que pour les faibles contrastes, les phases gardent leurs comportements initiaux, à l'inverse pour les cas des contrastes élevés, les comportements des phases sont modifiés. On note que, pour le cas des pores non-interconnectés, les calculs numériques sont limités à une fraction volumique $p \leq 0.23$, à cause de la percolation des particules qui est d'environ $p \simeq 0.28$, [Rintoul and Torquato \(1997\)](#).

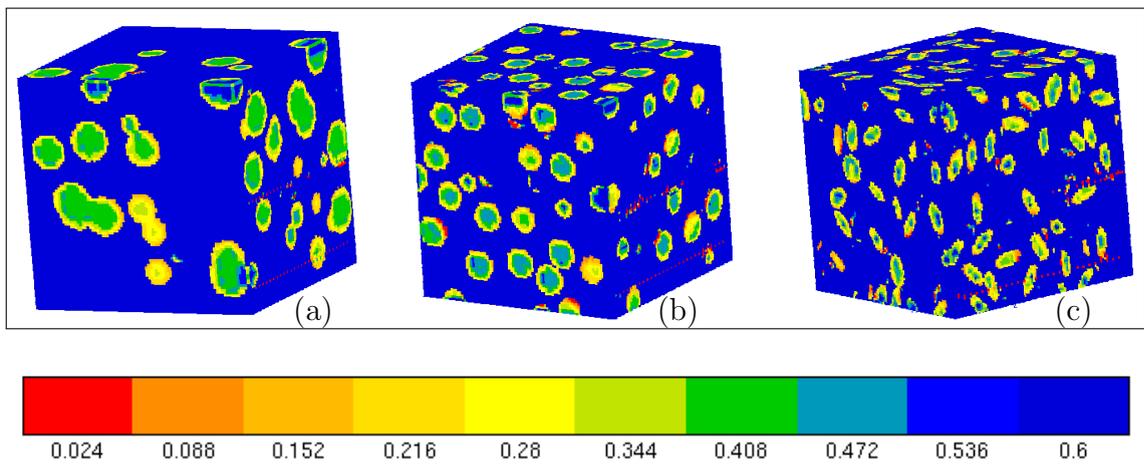


FIGURE IV.8 – Distribution locale de la conductivité pour une porosité $p = 0.23$: (a) pores sphériques interconnectés, (b) pores sphériques non-interconnectés et (c) pores ellipsoïdaux non-interconnectés.

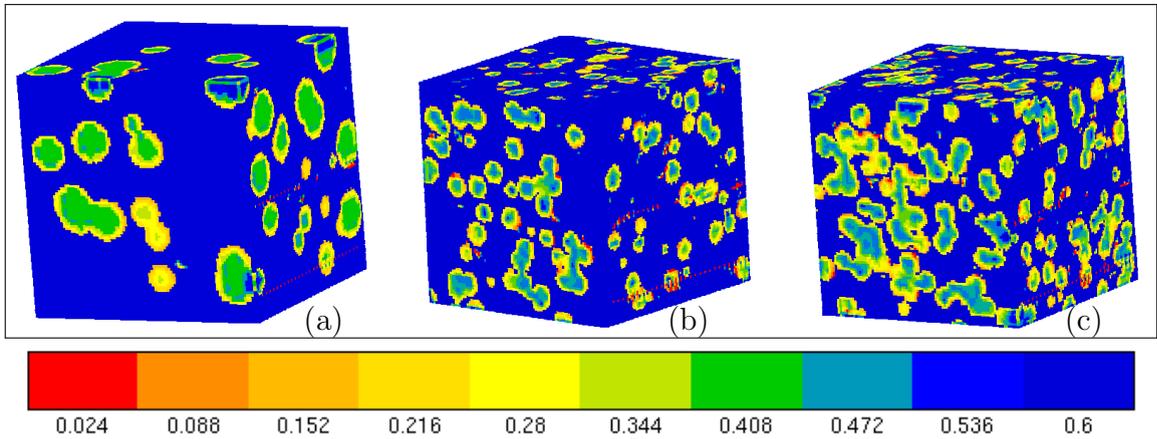


FIGURE IV.9 – Effet de la fraction volumique sur la conductivité thermique locale : (a) $p = 0.23$, (b) $p = 0.4$ et $p = 0.5$.

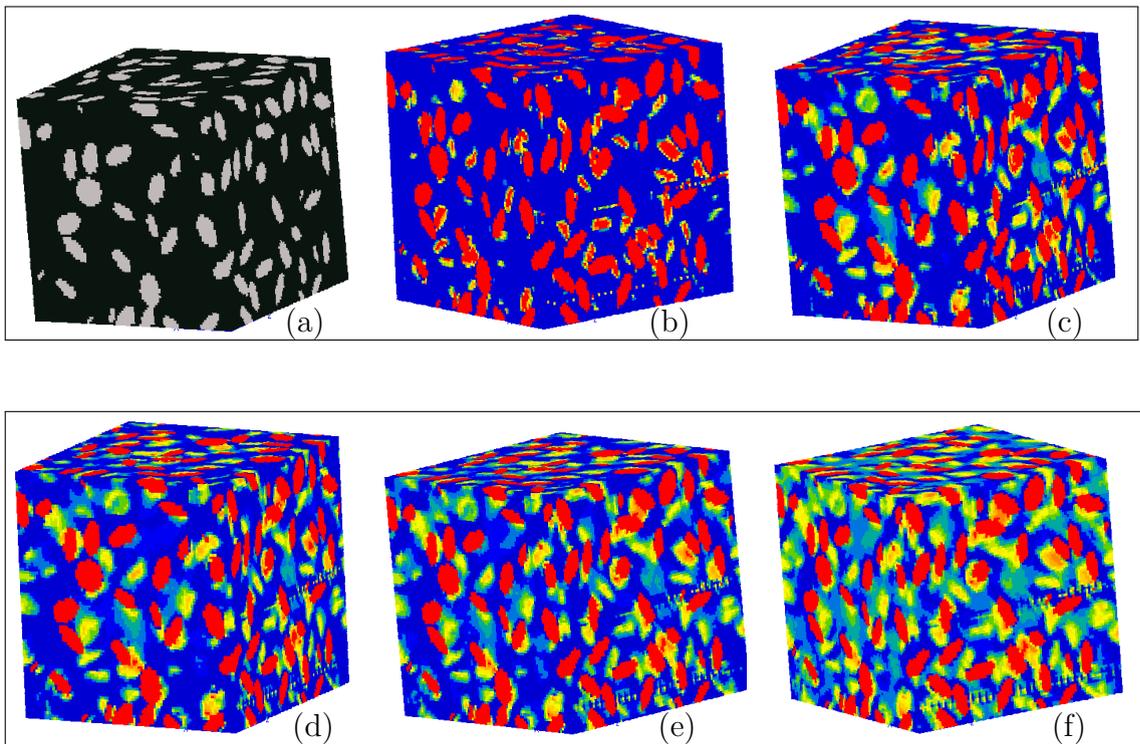


FIGURE IV.10 – Effet du contraste sur la conductivité thermique locale : (a) image initiale, (b) $c = 417$, (c) $c = 4167$, (d) $c = 8334$, (e) $c = 16667$ et (f) $c = 41667$.

IV.2 Analyse thermique par l'approche statistique

En se basant sur les résultats de l'homogénéisation numérique, l'identification des paramètres statistiques, donne un certain nombre d'avantages pour la détermination du comportement des microstructures poreuses. Les lois statistiques de la morphologie mathématique couplées avec les valeurs numériques peuvent être utilisées pour étudier la représentativité et l'anisotropie des microstructures aléatoires. Afin d'avoir une prédiction précise de la conductivité thermique, le VER statistique sera utilisé puis lié à tous les paramètres de la microstructure. La variation de ce VER en fonction de la fraction volumique des pores et du contraste sera présentée.

IV.2.1 Identification de la portée intégrale dans une microstructure poreuse

Les lois statistiques de la morphologie mathématique peuvent être utilisées pour l'analyse thermique des microstructures poreuses. Cette technique a été utilisée pour la caractérisation thermique d'un élastomère par [Jean \(2009\)](#). Elle sera étendue au caractérisation thermique d'une microstructure poreuse. Pour un matériau hétérogène, nous avons montré dans le chapitre 3 la relation entre les propriétés mécaniques et les paramètres statistiques (Equation III.33). En fonction de la conductivité λ , cette équation devient :

$$D_{\lambda}^2(N) = p(1-p)(\lambda_i - \lambda_m)^2 \frac{A}{N} \quad (\text{IV.4})$$

Sachant que la fraction volumique p et la conductivité de chaque phase sont connues, il est possible de quantifier la portée intégrale A en utilisant la méthode de fittage via l'équation IV.4, entre la variance $D_{\lambda}^2(N)$ et le nombre des pores N . La méthodologie suivie dans cette section et la même que celle utilisée dans les sections précédentes. En effet, deux portées intégrales seront comparées pour les deux microstructures poreuses. La portée intégrale notée A_F obtenue par le fittage des valeurs de l'homogénéisation numérique et la portée intégrale A^* proposée dans cette étude comme $A^* = p/VER$.

Le tableau IV.4 regroupe l'ensemble des résultats des deux portées intégrale A_F et A^* pour chaque microstructure. A partir des résultats, on remarque que la portée intégrale de la microstructure 1 est le volume d'un pore dans le VER (p/VER) et dans le cas de la microstructure 2 on a $A = 8(p/VER)$. Finalement on peut écrire :

$$\begin{cases} A^{non-interconnexion} = A^h = \frac{p^a}{N_{VER}} \\ A^{interconnexion} = A^o \simeq 8 \frac{p}{N_{VER}} \end{cases} \quad (IV.5)$$

	microstructure 1			microstructure 2		
Cas	1	2	3	1	2	3
p	0.23	0.23	0.23	0.23	0.23	0.23
N_{VER}	15	20	20	15	15	15
$A^* = p/N_{VER}$	0.015	0.012	0.012	0.016	0.016	0.016
A_F	0.015	0.012	0.013	0.13	0.135	0.145
$A_F/A^* \simeq$	1	1	1	8	8	9

TABLE IV.4 – Comparaison entre les portées intégrales des deux microstructures.

IV.2.2 Variation du VER thermique

Dans ce paragraphe, on s'intéresse aux variations de la taille du VER thermique en fonction de la fraction volumique des pores et du contraste. Nous avons déterminé dans le cas des composites, la variation du VER en fonction de la portée intégrale et d'autres paramètres de la microstructure. Par la même méthodologie, on démontre aussi que pour une microstructure poreuse, la variation du VER en introduisant la notion de A est donnée comme suit :

$$V_{VER} = \frac{4p(1-p)(\lambda_i - \lambda_m)^2}{\epsilon_{abs}^2} A \simeq \begin{cases} \frac{4p(1-p)(\lambda_i - \lambda_m)^2}{\epsilon_{abs}^2} \frac{p^a}{V_{VER}} : \text{Microstructure 1} \\ \frac{4p(1-p)(\lambda_i - \lambda_m)^2}{\epsilon_{abs}^2} 8 \frac{p}{V_{VER}} : \text{Microstructure 2} \end{cases} \quad (IV.6)$$

Cette relation est aussi valable pour le comportement thermique d'un milieu poreux, puisque la notion de la portée intégrale A est la même pour un composite ou un milieu poreux.

L'équation IV.6 présente le volume ou la taille minimale qu'il fallait avoir pour homogénéiser la conductivité thermique autour d'une erreur absolue ϵ_{abs} , pour une fraction volumique p et un contraste $c = \lambda_m/\lambda_i$. D'une manière générale, on obtient à partir de l'équation IV.6 la variation de la taille du VER en fonction de la fraction volumique p seule ($VER(p)$), puis en fonction du contraste c seul ($VER(c)$). On a :

$$\begin{cases} VER(p) = \alpha p \sqrt{1-p} \text{ avec } \alpha = \frac{2\lambda_i}{\epsilon_{abs}} |1-c|, & c \in]0 : \infty[\\ VER(c) = \beta |1-c| \text{ avec } \beta = \frac{2\lambda_i}{\epsilon_{abs}} p \sqrt{1-p}, & p \in [0 : 1] \end{cases} \quad (\text{IV.7})$$

En fonction du contraste c , la variation du VER est équivalente à la variation d'une fonction définie sur un intervalle du contraste $]0 : \infty[$ comme suit :

$$VER(c) = \begin{cases} \beta(1-c) & \text{Si } c \leq 1 \\ \beta(c-1) & \text{Si } c \geq 1 \end{cases} \quad (\text{IV.8})$$

La figure IV.11.a montre la variation du VER thermique dans une microstructure poreuse en fonction de p et de c . Comme dans le cas de la microstructure des composites, le VER des matériaux poreux augmente avec l'augmentation de la fraction volumique des pores. Ces variations ont une valeur maximale autour de $p = 0.67$ puis diminuent au delà de cette limite (cas des mousses). Ces variations sont valables pour n'importe quelle valeur de λ_m .

La variation de la taille du VER en fonction du contraste d'une microstructure poreuse est présentée sur la figure IV.11.b. Cette figure montre que, quelque soit la valeur de β , l'augmentation du contraste nécessite une augmentation de la taille du volume pour laquelle les propriétés effectives sont représentatives. On remarque aussi qu'un milieu poreux à contraste élevé nécessite un large VER par rapport à un milieu moins contrasté.

En général, on détermine la variation de la taille du VER thermique dans une microstructure poreuse en fonction de la fraction volumique p d'une part, puis d'une autre part en fonction du contraste c . Ces variations sont étudiées comme une fonction à une seule variable. Il est possible d'étudier les fluctuations du VER thermique comme une fonction à deux variables p et c en développant l'équation IV.7. A partir de cette équation on a :

$$V_{VER}(p, c) = \frac{2\lambda_i}{\epsilon_{abs}} p \sqrt{1-p} |1-c| \quad (\text{IV.9})$$

Par exemple, pour une erreur absolue fixée à $\epsilon_{abs} = 0.005$, on a la variation du VER thermique en fonction de p et c est donnée par :

$$f(p, c) = 10p \sqrt{1-p} |1-c| \quad (\text{IV.10})$$

La figure IV.12 présente les variations de cette fonction dans l'espace. Elle montre également les fluctuations du VER en fonction de p, c . On note que la projection de

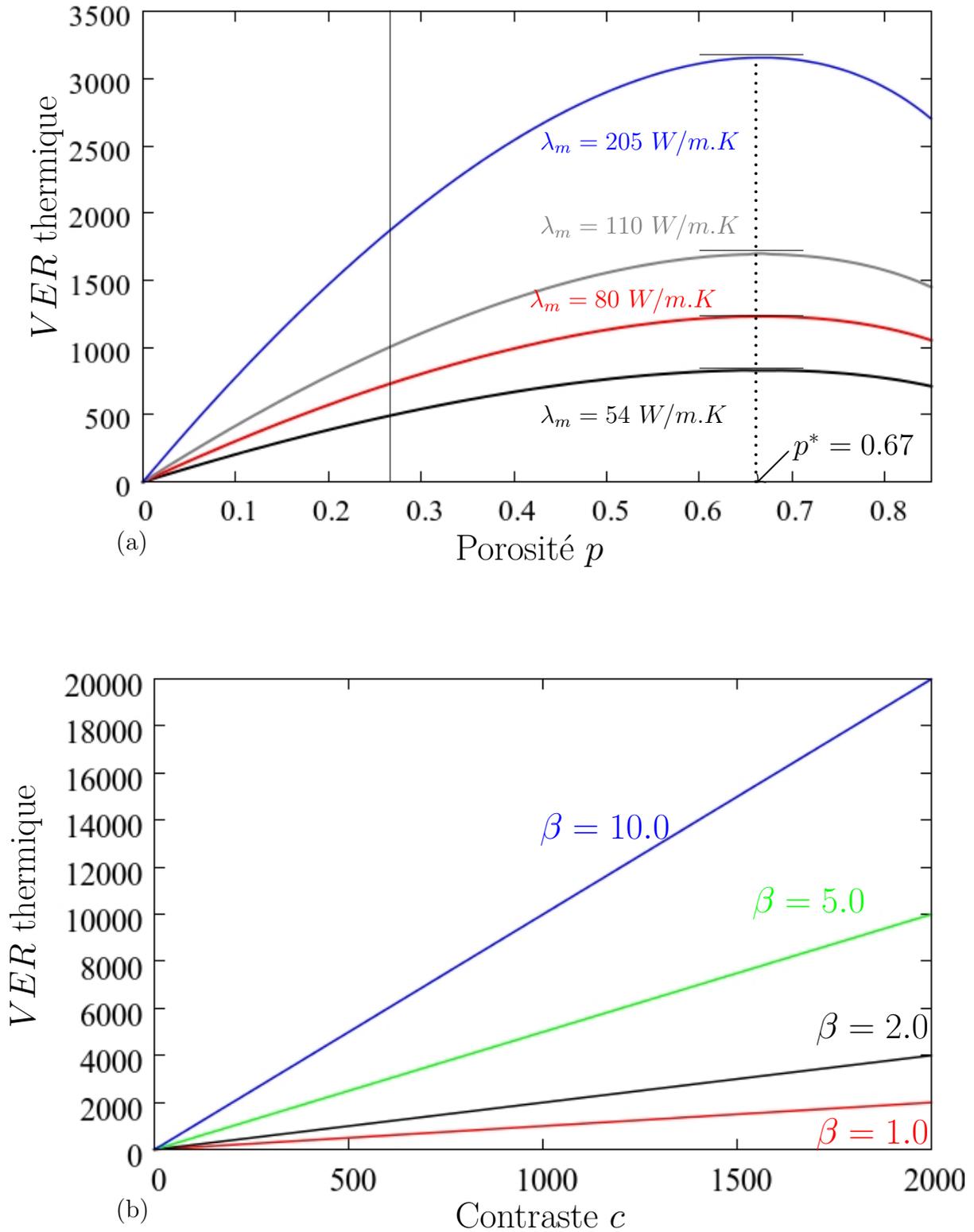


FIGURE IV.11 – Variation du VER thermique dans une microstructure poreuse : (a) en fonction de la fraction volumique et (b) en fonction du contraste.

ces variations sur un seul axe donne les résultats présentés sur la figure IV.11.

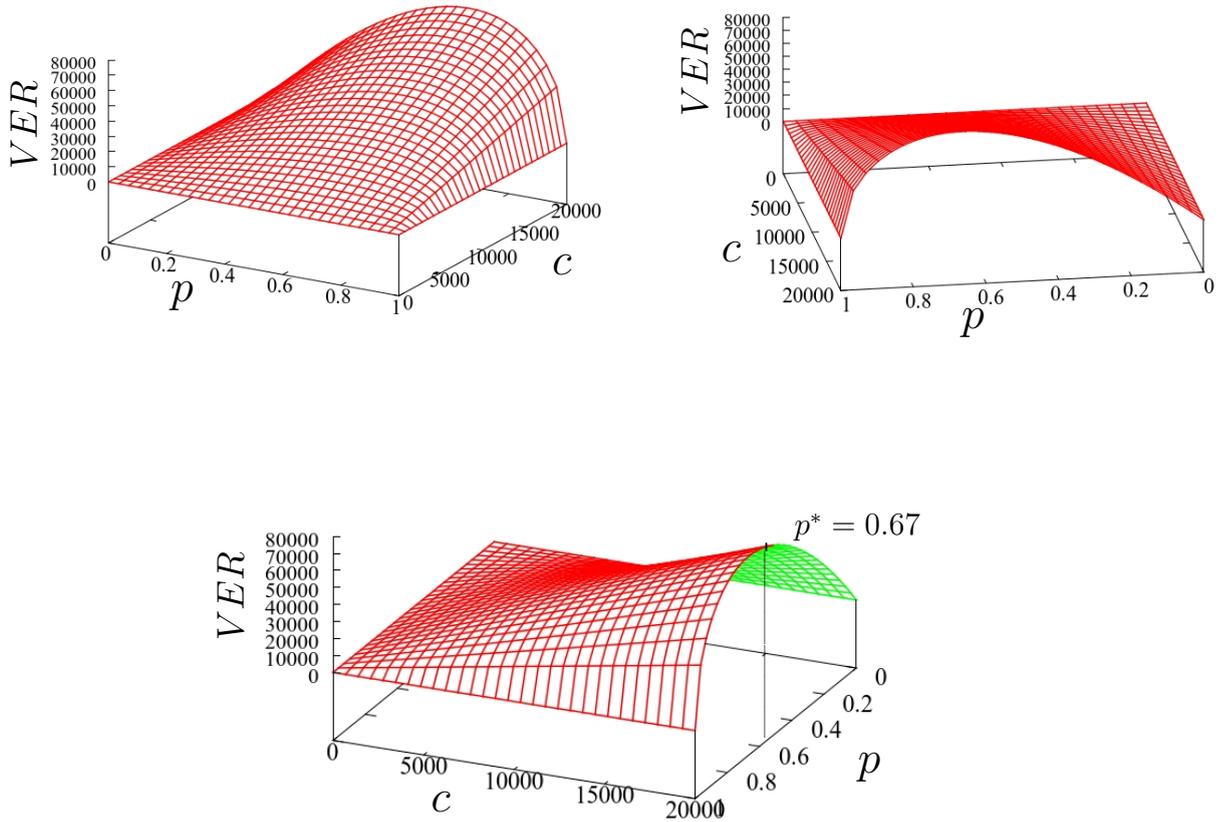


FIGURE IV.12 – Variation du VER thermique dans le plan (p, c) d’une microstructure poreuse. Exemple pour $\epsilon_{abs} = 0.005$.

IV.2.3 Concept de la morphologie équivalente

Dans ce travail, nous avons utilisé la notion de la portée intégrale A pour étudier la variation de la taille du VER thermique en fonction de la fraction volumique et du contraste. On peut aussi utiliser cette notion pour définir une approche d’homogénéisation thermique des microstructures poreuses, nommée, la morphologie équivalente. L’objectif est de trouver une équivalence entre les différents paramètres morphologiques des deux microstructures 1 et 2. On rappelle que la microstructure 1 contient des pores non-interconnectés à l’inverse de la microstructure 2 qui contient des pores interconnectés.

Dans la section précédente, nous avons développé une relation entre les fractions volumiques des pores interconnectés et non-interconnectés. Dans ce qui suit, on

s'intéresse au développement d'autres relations entre le nombre et le rayon des pores. A partir des résultats présentés sur le tableau IV.4, on remarque que la relation entre les portées intégrales des deux microstructures est :

$$A^o = 8 A^h \quad (\text{IV.11})$$

Avec A^o représente le cas des microstructures contenant des pores interconnectés et A^h le cas des pores non-interconnectés. Cette équation peut s'écrire, en tenant compte des résultats du tableau IV.4, sous la forme suivante :

$$\frac{f}{N_{VER}^o} = 8 \frac{f^a}{N_{VER}^h} \quad (\text{IV.12})$$

La combinaison des deux équations IV.3 et IV.12 se réduit à :

$$\frac{0.28}{N_{VER}^o} = \frac{8}{N_{VER}^h} \quad (\text{IV.13})$$

En simplifiant cette équation, on arrive finalement à déterminer une relation entre le nombre des pores des deux microstructures. On a :

$$\frac{N_{VER}^h}{N_{VER}^o} \simeq 28 \quad (\text{IV.14})$$

Selon l'équation IV.14, il apparaît que le VER thermique d'une microstructure contenant des pores non-interconnectés est 28 fois plus large que le VER d'une microstructure contenant des pores interconnectés. Cela est dû au distance de répulsion considérée dans la microstructure 1.

On a défini la portée intégrale A comme le volume d'un pore dans les deux microstructures et en développant l'équation IV.11, on obtient la relation entre le rayon des pores de chaque microstructure par :

$$A = \frac{4}{3}\pi R_o^3 = 8 \frac{4}{3}\pi R_h^3 \Rightarrow R_o = 2 R_h \quad (\text{IV.15})$$

Avec R_o est le rayon des pores interconnectés et R_h son équivalent dans le cas des pores non-interconnectés.

Il apparaît que le nombre et le rayon des pores interconnectés ont aussi un équivalent dans le cas des pores non-interconnectés. A partir de ces résultats, on peut déduire le concept de la morphologie équivalente pour un milieu poreux. La figure IV.13 schématise la description de ce concept. Cette notion peut décrire comme suit : *"Il est possible de substituer une microstructure contenant des pores interconnectés de rayon R et de fraction volumique p par une autre contenant des pores*

non-interconnectés de rayon $2R$ et de fraction volumique $0.28p^n$. Il est important de noter que ces deux microstructures donnent la même conductivité thermique mais avec deux VER différents.

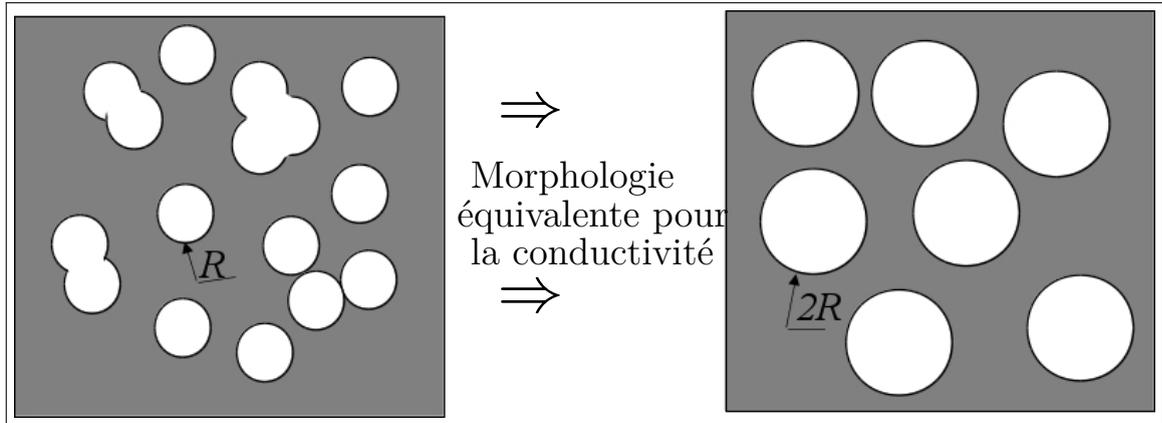


FIGURE IV.13 – Notion de la morphologie équivalente pour un milieu poreux.

IV.3 Synthèse

Nous avons déterminé les propriétés thermiques d'un matériau poreux représenté par deux microstructures virtuelles de distribution différente. On a étudié l'effet de la fraction volumique, de l'interconnexion et du contraste des pores sur le comportement thermique global et local. L'ensemble des résultats numériques a été comparé avec ceux de l'homogénéisation analytique. La comparaison montre que les bornes d'ordre trois ainsi que le modèle de Maxwell donne des très bonnes estimations de la conductivité thermique. L'étude de l'anisotropie des microstructures poreuses a été réalisée à l'aide du calcul statistique. La variance et la portée intégrale ont été utilisées pour l'approche statistique. La notion de la morphologie équivalente a été validée pour le cas de la conductivité thermique des milieux poreux. La définition du VER statistique a été utilisée pour déterminer la variation du VER thermique en fonction de la fraction volumique et du contraste. On remarque qu'une distribution aléatoire de 67% des pores dans une matrice beaucoup plus conductible est la microstructure poreuse qui nécessite un large VER thermique.

Chapitre V

Effet de la forme des particules sur les propriétés mécaniques et sur la taille du VER d'un matériau hétérogène

Résumé

Dans ce chapitre, on aborde l'influence de la forme des particules en utilisant les différentes approches statistiques et numériques. Les inclusions ont une forme sphérique ou ellipsoïdale. Les techniques de génération des microstructures sont similaires à celles présentées dans les chapitres précédents. La distribution des particules est purement aléatoire pour toutes les fractions volumiques générées. Cette distribution est à base d'un schéma de sphères dures, dont aucune interconnexion entre les particules a été envisagée. La méthode des éléments finis avec les conditions périodiques sont utilisées pour la modélisation numérique. Les résultats obtenus seront comparés avec ceux obtenus par les modèles et les bornes analytiques. Les paramètres statistiques seront aussi exploités comme avant pour l'étude de l'effet de la forme et de la représentativité. Ces paramètres statistiques seront quantifiés pour chaque forme.

Sommaire

V.1 Description morphologique et mécanique des phases	120
V.1.1 Description des phases	120
V.1.2 Propriétés des phases	121
V.2 Homogénéisation numérique	122
V.3 Effet de la forme des particules sur le tenseur élastique macroscopique	130

V.4 Description statistique	133
V.4.1 Effet de la forme sur le diagramme de covariance	133
V.4.2 Analyse de l'effet de la forme par la variance et par la portée intégrale	138
V.4.3 Taille du VER et la fraction volumique	142
V.4.4 Taille du VER et contraste des propriétés des phases . . .	142
V.4.5 Variation du VER dans le plan (p, c)	143
V.5 Synthèse	145

V.1 Description morphologique et mécanique des phases

V.1.1 Description des phases

Les particules de différentes formes sont simulées puis distribuées aléatoirement dans l'espace par le processus aléatoire de Poisson. Les méthodes de génération ont été présentées dans le deuxième chapitre. Durant l'étape de génération, les particules sphériques sont contrôlées par leurs centres, et les particules ellipsoïdales sont contrôlées par leurs centres et leurs angles d'orientation α , β et γ . La figure V.1 montre un exemple de modèle aléatoire généré pour les trois formes : un modèle sphérique, un modèle de particules aplaties et un modèle de particules allongées. L'exemple présenté contient 200 particules de fraction volumique $p = 23\%$. Pour éviter la percolation et le contact des particules, on considère des fractions volumiques inférieures au seuil de percolation qui est défini par [Rintoul and Torquato \(1997\)](#) autour de 28%.

Plusieurs réalisations ont été générées pour les particules sphériques et ellipsoïdales. Chaque taille contient un nombre spécifique de particules N , qui est variable de 1 jusqu'à la convergence totale du comportement. Cela veut dire que toute augmentation de la taille du volume revient à augmenter le volume des particules. Le tableau V.1 regroupe le nombre des réalisations pour chaque volume V contenant N particules.

	v_1	v_2	v_3	v_4	v_5	v_6	V
N	1	5	20	50	100	200	240
n	216	40	20	20	9	2	2

TABLE V.1 – Nombre des réalisations n associées à chaque volume V .

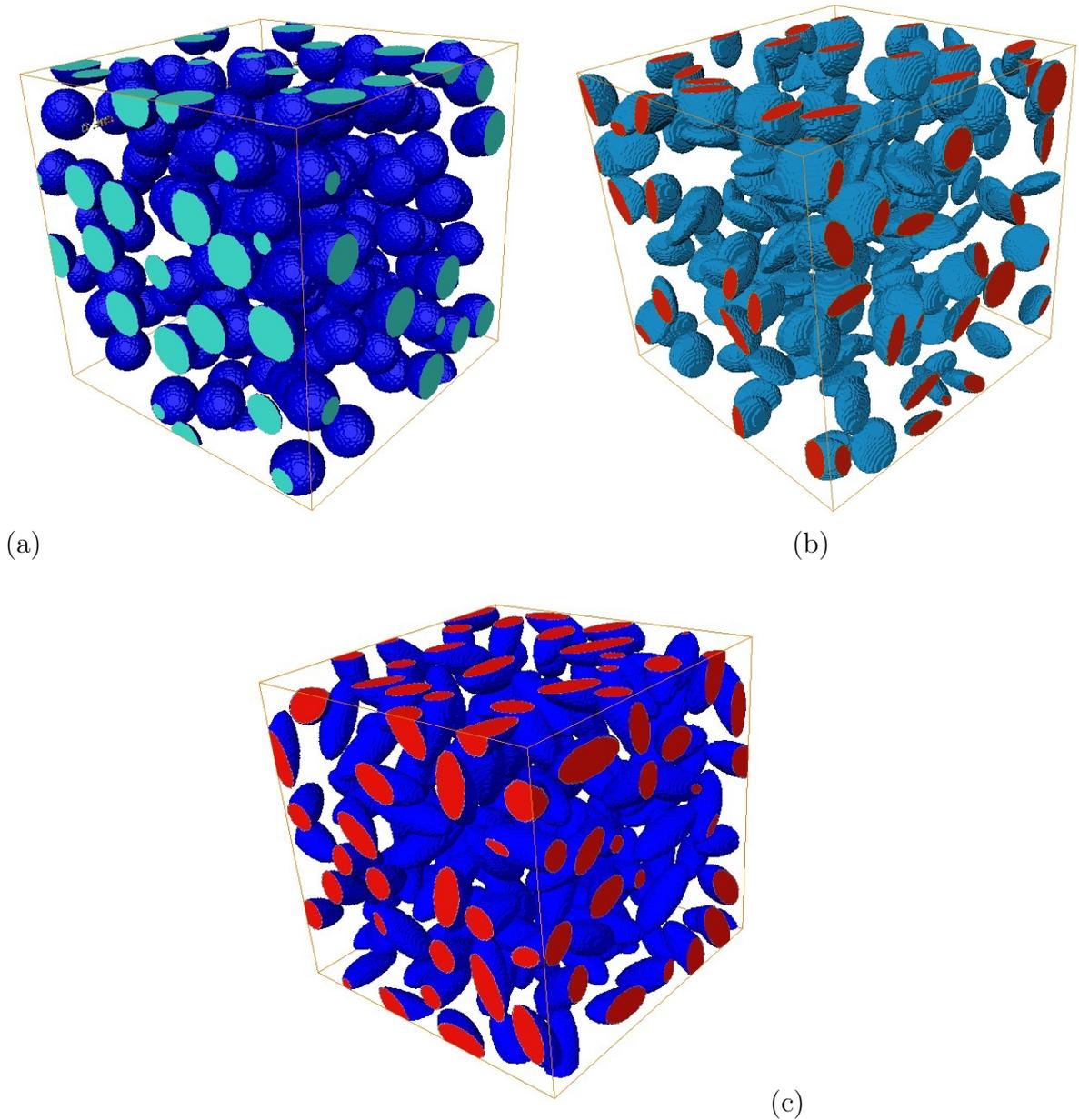


FIGURE V.1 – Simulation d'une microstructure avec différentes formes : (a) forme sphérique, (b) forme ellipsoïdale aplatie et (c) forme ellipsoïdale allongée.

V.1.2 Propriétés des phases

La microstructure des composites utilisée dans cette section est de type matrice-inclusion sans interconnexion. Plusieurs cas sont considérés, dans le but de déterminer l'effet de la fraction volumique p , l'effet du contraste c et l'effet de la forme des particules. Deux fractions volumiques $p = 0.13$ et $p = 0.23$ de la phase des inclusions avec deux contrastes ont été considérés. On rappelle que le contraste $c_{k,\mu}$ est le rapport entre les propriétés de la phase des inclusions et celles de la phase matrice.

Le tableau V.2 présente les caractéristiques mécaniques de chaque phase. Au total, cinq cas sont comparés :

- cas 1 et cas 2 pour quantifier l'effet du contraste.
- cas 1 et cas 4 pour étudier l'effet de la fraction volumique.
- cas 3, cas 4 et cas 5 pour quantifié l'effet de la forme.

Matériaux		E (GPa)	ν	Forme des particules	p
Cas 1	Matrice	3.52	0.3	Sphérique	0.23
	Particules	13.52	0.3		
Cas 2	Matrice	3.52	0.3	Sphérique	0.23
	Particules	200	0.3		
Cas 3	Matrice	3.52	0.3	Sphéroïde allongé	0.13
	Particules	13.5	0.3		
Cas 4	Matrice	3.52	0.3	Sphérique	0.13
	Particules	13.5	0.3		
Cas 5	Matrice	3.52	0.3	Sphéroïde aplati	0.13
	Particules	13.5	0.3		

TABLE V.2 – Description morphologique et comportement mécanique des phases.

V.2 Homogénéisation numérique

Dans cette section, deux propriétés mécaniques (k et μ) sont étudiées pour les trois formes de particules en considérant n différentes réalisations. Les résultats obtenus par un volume inférieur au VER sont appelés propriétés apparentes. Les conditions aux limites de périodicité sont utilisées pour la modélisation.

Dans ce qui suit, on présente la variation des modules élastiques apparents en fonction de la taille du volume V . La dispersion du coefficient de compression et celle du coefficient de cisaillement de l'ensemble des réalisations et de leurs moyennes est présentée. Les figures V.2, V.3 et V.5 montrent la variation des résultats numériques pour les particules sphériques. Dans le cas des microstructures contenant les particules ellipsoïdales, on présente les résultats de la simulation sur la figure V.4.

Ces figures montrent la variation des propriétés homogénéisées en fonction de la taille du volume. Les valeurs moyennes et les intervalles de confiance sur les propriétés apparentes et effectives k et μ sont présentés. Il apparaît que la dispersion des résultats diminue avec l'augmentation de la taille du volume. L'intervalle de confiance sur chaque taille est présenté par une barre verticale. Cette erreur diminue lors de l'augmentation du V , puis elle tend vers zéro pour le VER déterministe. Les propriétés effectives obtenues sur le VER de chaque cas étudié sont données

dans le tableau V.3. Ces résultats sont comparés à ceux obtenus par les modèles et les bornes analytiques (voir l'annexe pour les expressions mathématiques). Il faut noter que la différence maximale entre les estimations numériques et les approches analytiques est observée dans le cas des grandes fractions volumiques des particules. Cette différence maximale est notée en gras sur le tableau V.3. Le même phénomène est remarqué aussi dans le cas d'un contraste élevé. Cette différence a été justifiée par [Segurado and Llorca \(2002\)](#) pour les particules rigides et d'autres sous forme de pores. On constate aussi que la taille du *VER* déterministe dépend essentiellement de la forme de la particule. Inversement, les propriétés effectives ne sont pas sensibles à la forme des particules.

On peut conclure d'après les résultats numériques que :

- La fraction volumique et la taille du volume sont les paramètres morphologiques qui influent sur les propriétés effectives.
- La forme des particules n'a pas d'influence significative sur les propriétés effectives dans le *VER*.
- Par contre, la forme de la particule a un effet direct sur la la taille du *VER* déterministe. En effet, la forme de la particule la plus anisotrope géométriquement nécessite un *VER* déterministe plus grand.

	Propriétés (GPa)	HS^-	GSC	Simulations	HS^+	$VERD \simeq$
Cas 1	k	3.81	3.81	3.84	4.16	200
	μ	1.78	1.78	1.8	1.97	
Cas 2	k	4.38	4.38	5.5	20.18	250
	μ	2.16	2.08	3.1	11.72	
Cas 3	k	3.42	—	3.43	3.62	240
	μ	1.57	—	1.58	1.69	
Cas 4	k	3.42	3.42	3.43	3.62	200
	μ	1.57	1.57	1.58	1.69	
Case 5	k	3.42	—	3.43	3.62	200
	μ	1.57	—	1.60	1.69	

TABLE V.3 – Résultats de la simulation numérique et les approches analytiques ainsi que le *VER* déterministe (*VERD*).

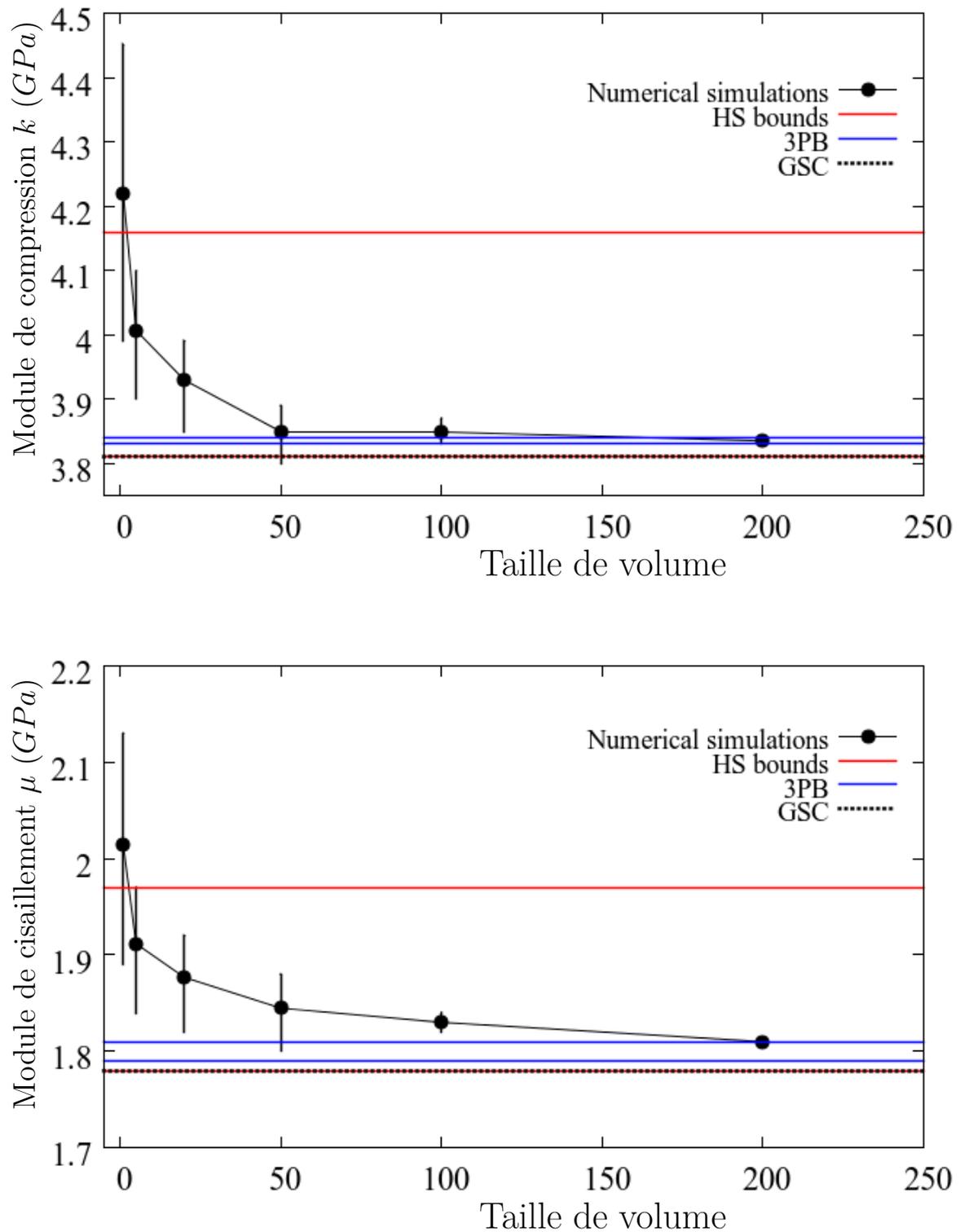


FIGURE V.2 – Variation des propriétés macroscopiques (numériques et analytiques) en fonction de la taille du volume, cas 1.

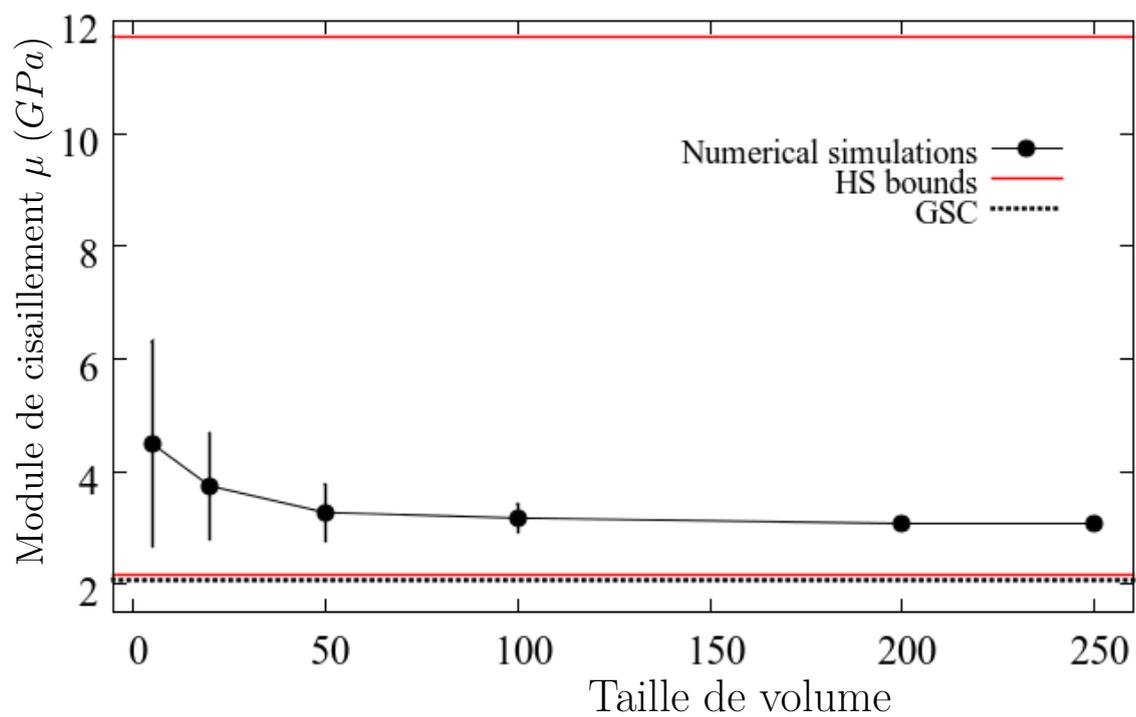
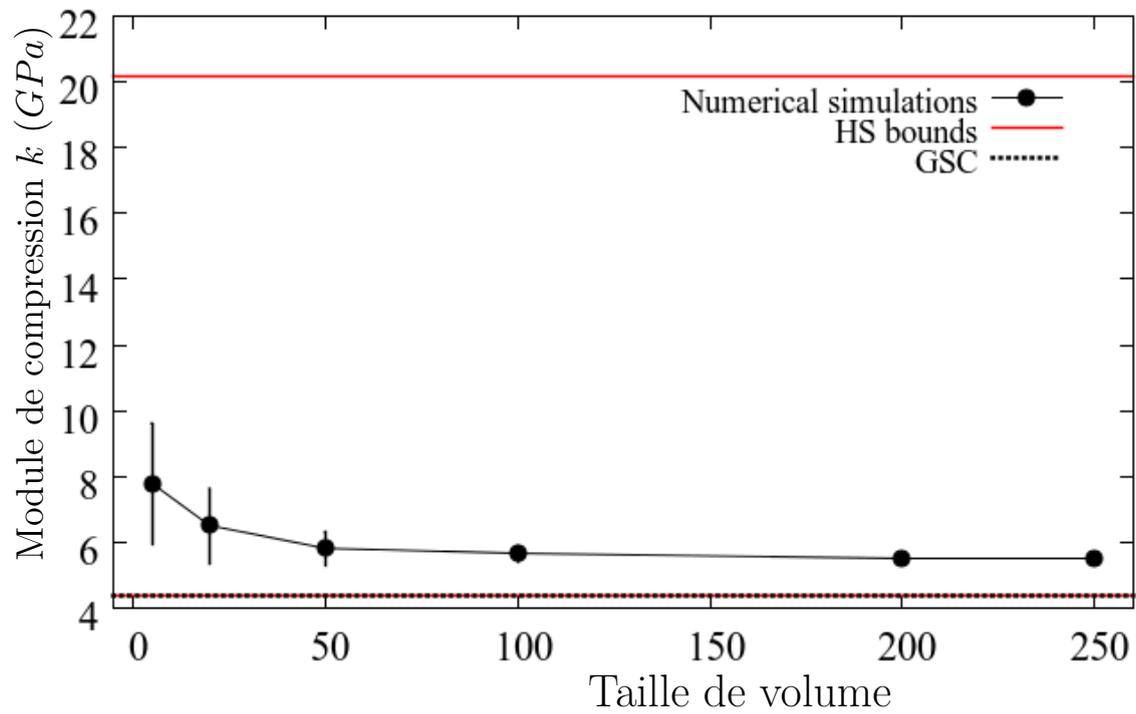


FIGURE V.3 – Variation des propriétés macroscopiques (numériques et analytiques) en fonction de la taille du volume, cas 2.

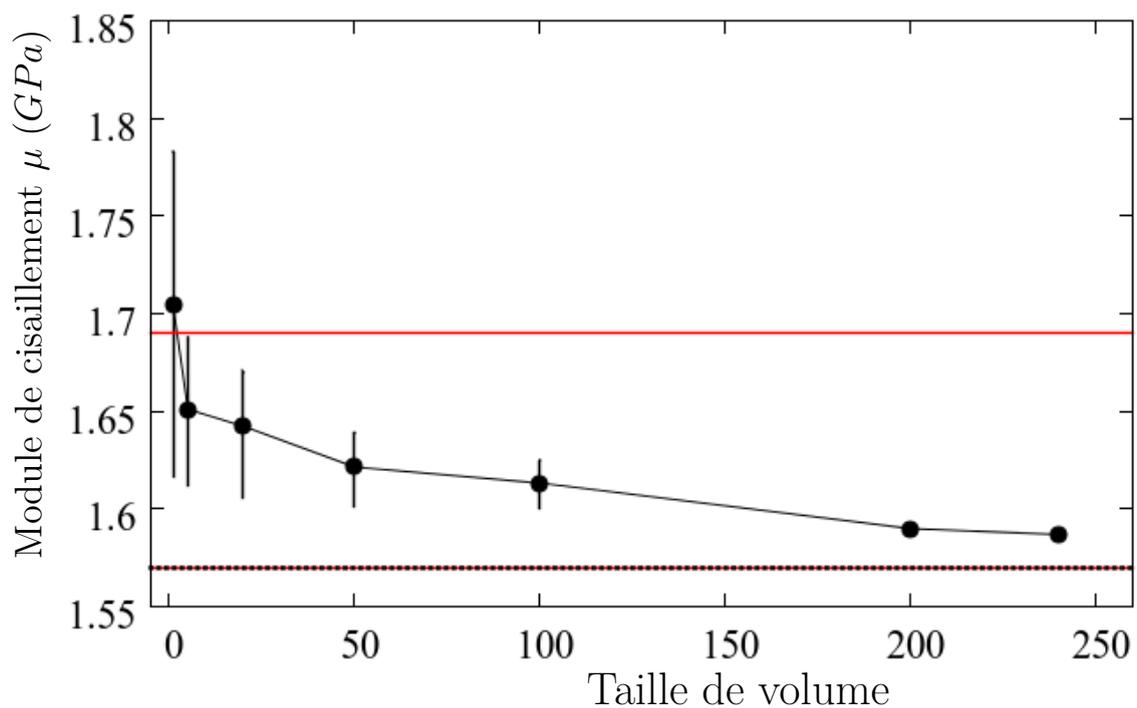
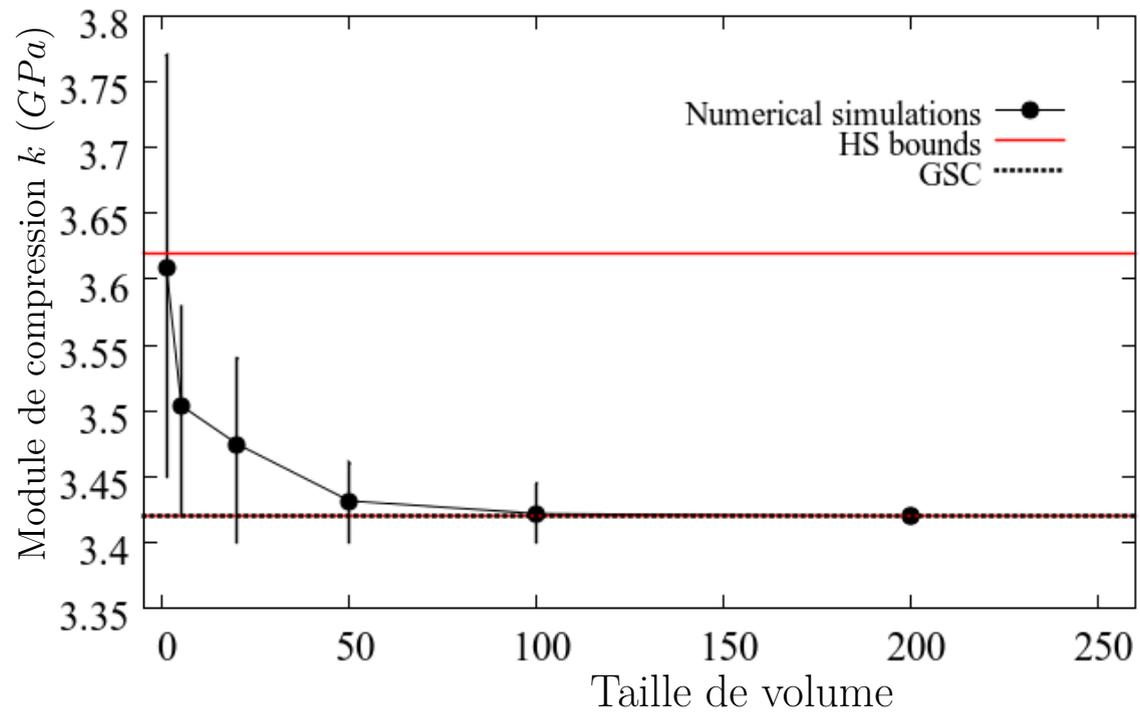


FIGURE V.4 – Variation des propriétés macroscopiques (numériques et analytiques) en fonction de la taille du volume, cas 3.

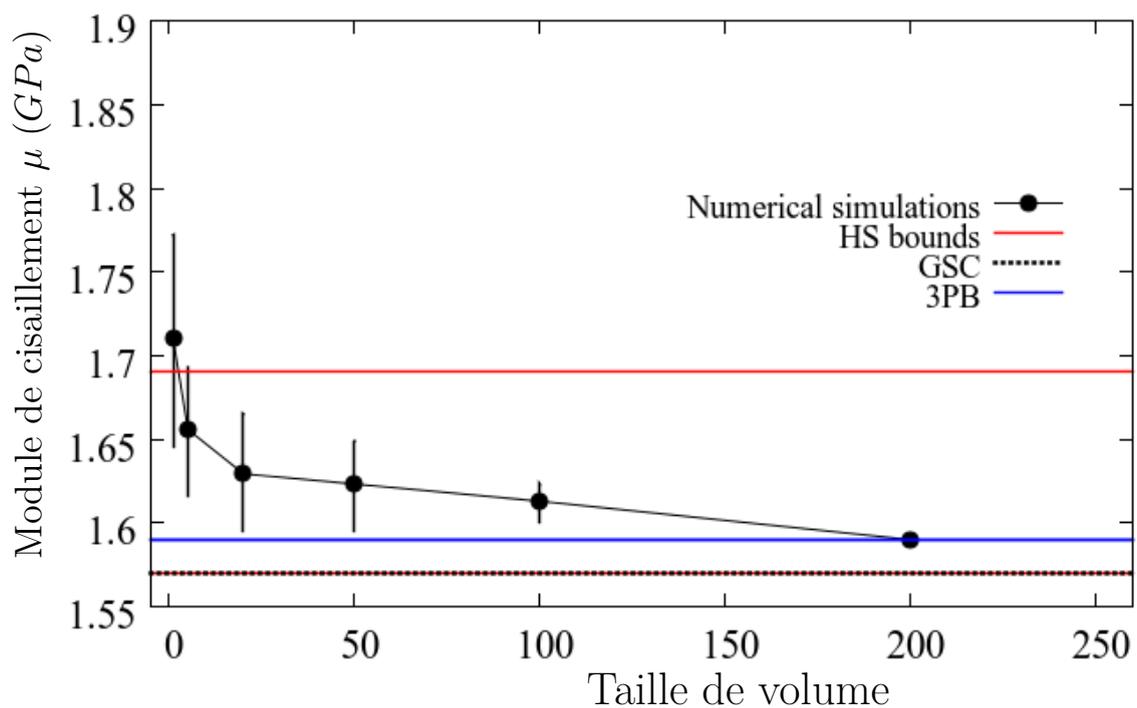
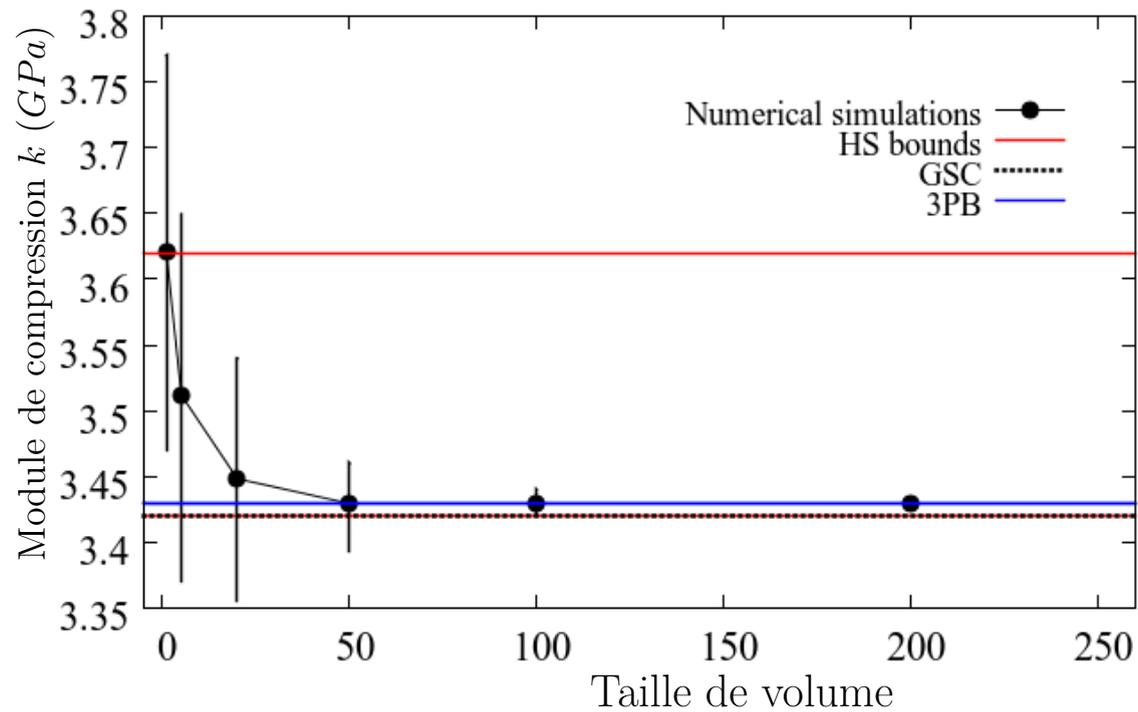


FIGURE V.5 – Variation des propriétés macroscopiques (numériques et analytiques) en fonction de la taille du volume, cas 4.

Durant l'application des conditions aux limites mécaniques, la différence entre l'état initial et l'état de déformation pour le calcul du coefficient de compression k et de cisaillement μ est présentée sur les figures V.6 et V.7 pour les particules sphériques. Cette différence est présentée dans le cas des microstructures contenant des sphéroïdes sur les figures V.8 et V.9.

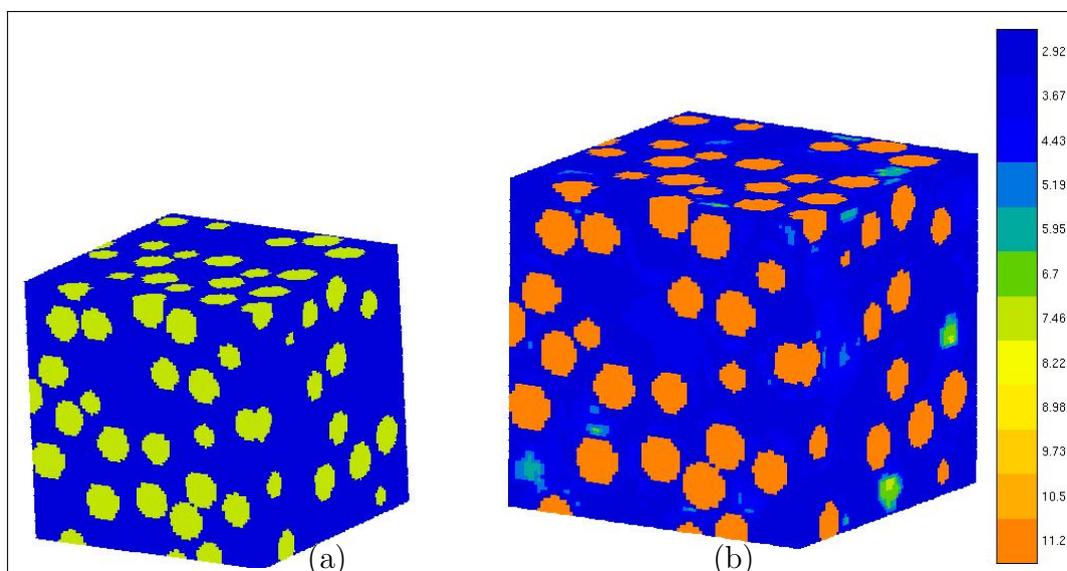


FIGURE V.6 – Calcul du coefficient de compression k : (a) microstructure originale et (b) carte de distribution de $k = (\sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33})/3$ dans un volume déformé.

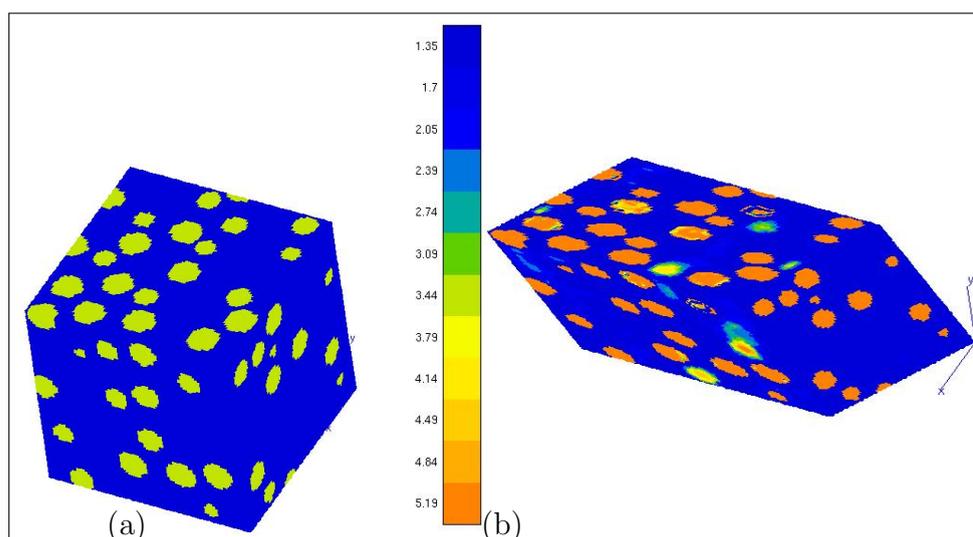


FIGURE V.7 – Calcul du coefficient de cisaillement μ : (a) microstructure originale et (b) carte de distribution de $\mu = \sigma_{12}$ dans un volume déformé.

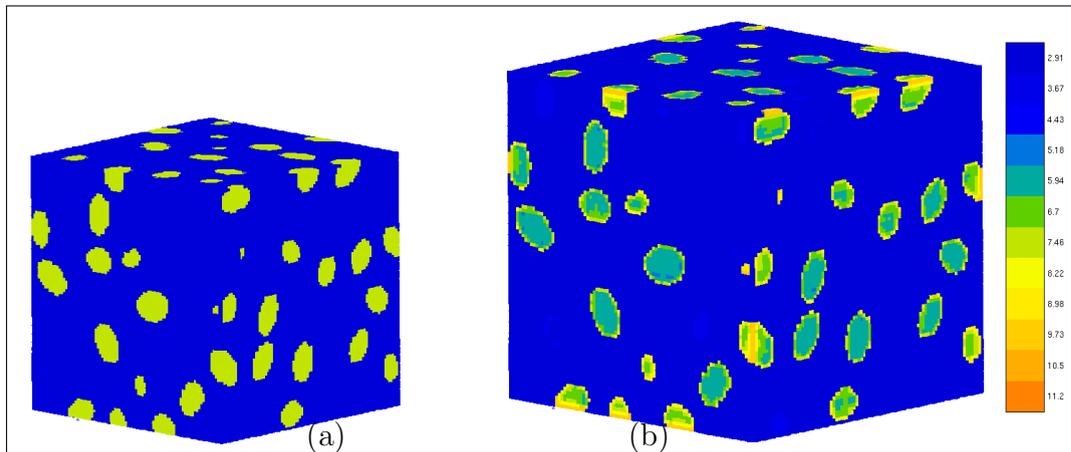


FIGURE V.8 – Calcul du coefficient de compression k : (a) microstructure originale et (b) carte de distribution de $k = (\sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33})/3$ dans un volume déformé.

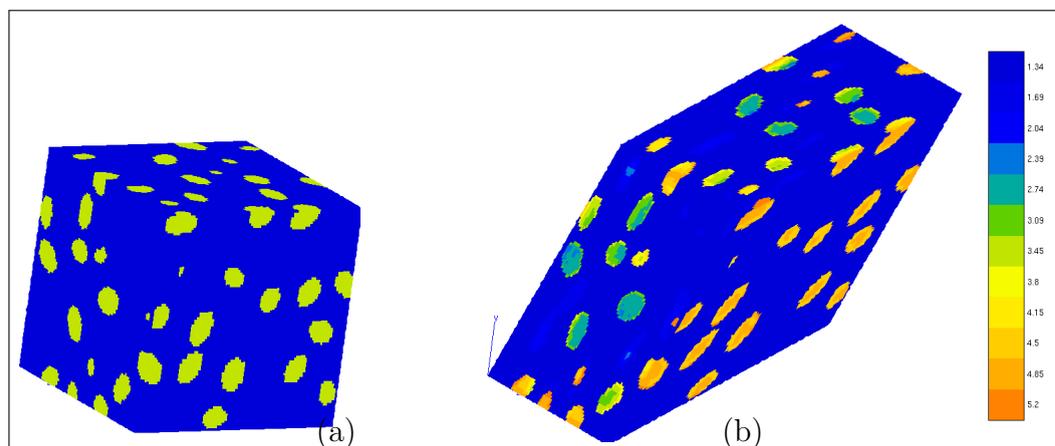


FIGURE V.9 – Calcul du coefficient de cisaillement μ : (a) microstructure originale et (b) carte de distribution de $\mu = \sigma_{12}$ dans un volume déformé.

V.3 Effet de la forme des particules sur le tenseur élastique macroscopique

Dans la suite de notre travail, on s'intéresse à l'étude de la variation du tenseur élastique macroscopique en fonction de la taille du *VER*, en tenant compte des trois formes de particules. L'objectif est de valider les résultats numériques, obtenus dans la précédente section, par la détermination du tenseur élastique pour chaque forme de particules, en gardant la même fraction volumique p .

Dans cette partie, le tenseur des propriétés mécaniques qui relie la contrainte moyenne et la déformation moyenne sera calculé pour chaque v_i . En utilisant la loi de Hooke, six calculs sont nécessaires dans chaque v_i pour déduire les 21 coefficients du tenseur C_{ij} présenté par le système V.1. La notation $\Sigma = C^{app}.E$, est utilisée pour présenter macroscopiquement la loi de Hooke. Généralement on peut écrire le système comme suit :

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \Sigma_{11} \\ \Sigma_{22} \\ \Sigma_{33} \\ \Sigma_{12} \\ \Sigma_{23} \\ \Sigma_{31} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ & & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ & & & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ & & & & C_{55} & C_{56} \\ & & & & & C_{66} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{11} \\ E_{22} \\ E_{33} \\ 2E_{12} \\ 2E_{23} \\ 2E_{31} \end{pmatrix} \quad (\text{V.1})$$

La matrice C^{app} des modules élastiques apparents est symétrique. Les conditions aux limites homogènes au contour, KUBC, sont utilisées pour les calculs. Dans chaque calcul, une composante du tenseur de déformation : E_{11} , E_{22} et E_{33} (respectivement E_{12} , E_{23} et E_{31}) a été initialisée par 1 (respectivement par 0.5) et les autres composantes sont initialisées par 0. Les six composantes du tenseur de contrainte macroscopique Σ résultant des moyennes des contraintes fournissent ensuite les six coefficients de la matrice C^{app} . Les résultats obtenus pour les différentes tailles v_i et pour chaque forme sont présentés ci dessous sous forme matricielle.

<i>Particules sphériques</i>	<i>Ellipsoïdales allongées</i>	<i>Ellipsoïdales aplaties</i>
$\begin{pmatrix} 6.18 & 2.6 & 2.59 & 0 & 0 & 0 \\ & 6.17 & 2.59 & 0 & 0 & 0 \\ & & 6.16 & 0 & 0 & 0 \\ & & & 1.78 & 0 & 0 \\ & & & & 1.78 & 0 \\ & & & & & 1.78 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 6.28 & 2.64 & 2.65 & 0 & 0 & 0 \\ & 6.29 & 2.65 & 0 & 0 & 0 \\ & & 6.30 & 0 & 0 & 0 \\ & & & 1.81 & 0 & 0 \\ & & & & 1.81 & 0 \\ & & & & & 1.81 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 6.23 & 2.63 & 2.62 & 0 & 0 & 0 \\ & 6.24 & 2.62 & 0 & 0 & 0 \\ & & 6.22 & 0 & 0 & 0 \\ & & & 1.79 & 0 & 0 \\ & & & & 1.8 & 0 \\ & & & & & 1.79 \end{pmatrix}$

Tenseur élastique pour $N = 1$ particule

.....

$\begin{pmatrix} 5.73 & 2.38 & 2.38 & 0 & 0 & 0 \\ & 5.72 & 2.38 & 0 & 0 & 0 \\ & & 5.72 & 0 & 0 & 0 \\ & & & 1.67 & 0 & 0 \\ & & & & 1.66 & 0 \\ & & & & & 1.66 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 5.77 & 2.41 & 2.41 & 0 & 0 & 0 \\ & 5.82 & 2.41 & 0 & 0 & 0 \\ & & 5.81 & 0 & 0 & 0 \\ & & & 1.69 & 0 & 0 \\ & & & & 1.70 & 0 \\ & & & & & 1.69 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 5.81 & 2.41 & 2.40 & 0 & 0 & 0 \\ & 5.80 & 2.40 & 0 & 0 & 0 \\ & & 5.74 & 0 & 0 & 0 \\ & & & 1.69 & 0 & 0 \\ & & & & 1.67 & 0 \\ & & & & & 1.67 \end{pmatrix}$
---	---	---

Tenseur élastique pour $N = 20$ particules

.....

$\begin{pmatrix} 5.66 & 2.36 & 2.35 & 0 & 0 & 0 \\ & 5.65 & 2.35 & 0 & 0 & 0 \\ & & 5.64 & 0 & 0 & 0 \\ & & & 1.65 & 0 & 0 \\ & & & & 1.64 & 0 \\ & & & & & 1.65 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 5.68 & 2.37 & 3.01 & 0 & 0 & 0 \\ & 5.73 & 2.38 & 0 & 0 & 0 \\ & & 5.72 & 0 & 0 & 0 \\ & & & 1.66 & 0 & 0 \\ & & & & 1.67 & 0 \\ & & & & & 1.66 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 5.70 & 2.37 & 2.37 & 0 & 0 & 0 \\ & 5.70 & 2.37 & 0 & 0 & 0 \\ & & 5.64 & 0 & 0 & 0 \\ & & & 1.66 & 0 & 0 \\ & & & & 1.64 & 0 \\ & & & & & 1.65 \end{pmatrix}$
---	---	---

Tenseur élastique pour $N = 100$ particules

.....

$$\begin{pmatrix} 5.63 & 2.34 & 2.34 & 0 & 0 & 0 \\ & 5.62 & 2.34 & 0 & 0 & 0 \\ & & 5.61 & 0 & 0 & 0 \\ & & & 1.64 & 0 & 0 \\ & & & & 1.64 & 0 \\ & & & & & 1.64 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 5.64 & 2.35 & 2.35 & 0 & 0 & 0 \\ & 5.65 & 2.36 & 0 & 0 & 0 \\ & & 5.65 & 0 & 0 & 0 \\ & & & 1.64 & 0 & 0 \\ & & & & 1.65 & 0 \\ & & & & & 1.65 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 5.65 & 2.35 & 2.35 & 0 & 0 & 0 \\ & 5.66 & 2.35 & 0 & 0 & 0 \\ & & 5.61 & 0 & 0 & 0 \\ & & & 1.64 & 0 & 0 \\ & & & & 1.64 & 0 \\ & & & & & 1.64 \end{pmatrix}$$

Tenseur élastique pour $N = N_{RVE}$

.....

A partir des tenseurs des propriétés élastiques, il semble que la forme des particules n'a pas d'influence significative sur les modules élastiques *effectifs* dans un volume supérieur ou égal au *VER* déterministe. Inversement, pour un volume plus petit que le *VER* déterministe, les propriétés *apparentes* dépendent de la forme ainsi que de l'orientation des particules. On peut donc déduire pour les grands volumes supérieur ou égale au *VER* :

$$C_{VER}^{sphère} \simeq C_{VER}^{prolate} \simeq C_{VER}^{oblate} \quad (V.2)$$

Pour quantifier plus précisément l'effet de la forme des particules, les coefficients de l'anisotropie suivants sont introduits puis calculés sur chaque *VER* déterministe :

$$\eta = \frac{2C_{44}}{C_{11}^{xy} - C_{12}}, \quad C_{11}^{xy} = \frac{C_{11} + C_{22}}{2} \quad (V.3)$$

Nous arrivons finalement pour le *VER* de chaque forme à :

$$\eta_{VER}^{sphère} = \eta_{VER}^{prolate} = \eta_{VER}^{oblate} = 1 \quad (V.4)$$

Comme dans le cas de l'étude de l'effet de l'interconnexion des particules, présentée au troisième chapitre, on s'intéresse par la suite à la quantification de l'effet de la forme des particules en utilisant les méthodes statistiques. La notion de la covariance et de la portée intégrale sont utilisées pour caractériser quelques réalisations générées pour la simulation numérique.

V.4 Description statistique

V.4.1 Effet de la forme sur le diagramme de covariance

Les définitions et la méthode de calcul de la covariance et de la portée intégrale ont été présentées dans le troisième chapitre pour étudier l'effet de l'interconnexion des particules. On procède par les mêmes techniques pour chaque forme de particules étudiées. L'ensemble des réalisations générées pour la modélisation seront analysées par la covariance. L'anisotropie géométrique de chaque réalisation sera déterminée.

La covariance est obtenue à partir des images générées par le processus aléatoire de Poisson. L'ensemble des covariogrammes obtenus pour les particules sphériques et ellipsoïdales seront comparés. L'étude est considérée pour les microstructures de même fractions volumiques (23%) tout en augmentant le nombre des particules N . Le nombre N varie de 1 jusqu'à la convergence totale du covariogramme dans les trois directions x, y et z . La portée géométrique ou la longueur caractéristique L est déterminée dans les trois directions et notée L_x, L_y et L_z . Cette longueur est atteinte pour le carré de la fraction volumique p^2 . Les graphes de covariance sont présentés respectivement pour $N = 1, N = 10$ et $N = 50$ particules sur les figures V.10, V.11 et V.12 respectivement. Ces covariogrammes sont présentés dans le cas de $N = VER$ déterministe de chaque forme sur la figure V.13.

La covariance met en valeur l'anisotropie géométrique globale et les orientations des sphéroïdes dans la matrice. En effet, les courbes de covariance dans les directions des plans sont confondues pour le VER déterministe et différentes de celles obtenues pour un volume inférieur au VER déterministe.

D'autres travaux de recherche ont prouvé que l'orientation principale des sphéroïdes est obtenue par le premier contact entre le palier de la droite p^2 et le graphe de covariance, voir Ceballos (2011). Si par exemple l'asymptote est atteinte plus rapidement selon la direction x que selon la direction y , cela veut dire que la plupart des sphéroïdes ont pour direction x .

A partir des diagrammes de covariance, on remarque que, dans le cas des composites contenant une seule particule sphérique, la longueur caractéristique est la même dans les trois directions. Cela peut être expliqué par l'absence d'une orientation préférée de la particule sphérique. Par exemple, dans le cas de $N = 10$ on peut déduire que la majorité des 10 sphéroïdes ont une direction suivant les axes x, z . Aussi dans le cas de $N = 50$, la plupart des particules ellipsoïdales a une direction suivant x .

Concernant les variations de la covariance dans le VER déterministe, on remarque que les sphéroïdes n'ont pas d'orientation préférable suivant une seule direc-

tion. Cela revient à dire que, si un volume est statistiquement représentatif, l'orientation des particules n'a pas d'influence sur le comportement macroscopique. On remarque aussi que la variation de la covariance dans les volumes inférieurs au *VER* déterministe n'accepte pas d'asymptote théorique et que la variation n'atteint pas le palier de la convergence.

Le changement de la covariance en fonction de la direction permet de déduire l'anisotropie géométrique. Pour les microstructures isotropes, la covariance ne dépend pas de la direction de L : $L_x = L_y = L_z$. C'est le cas des résultats obtenus dans le *VER* déterministe de chaque forme, à l'opposé des petits volumes où $L_x \neq L_y \neq L_z$.

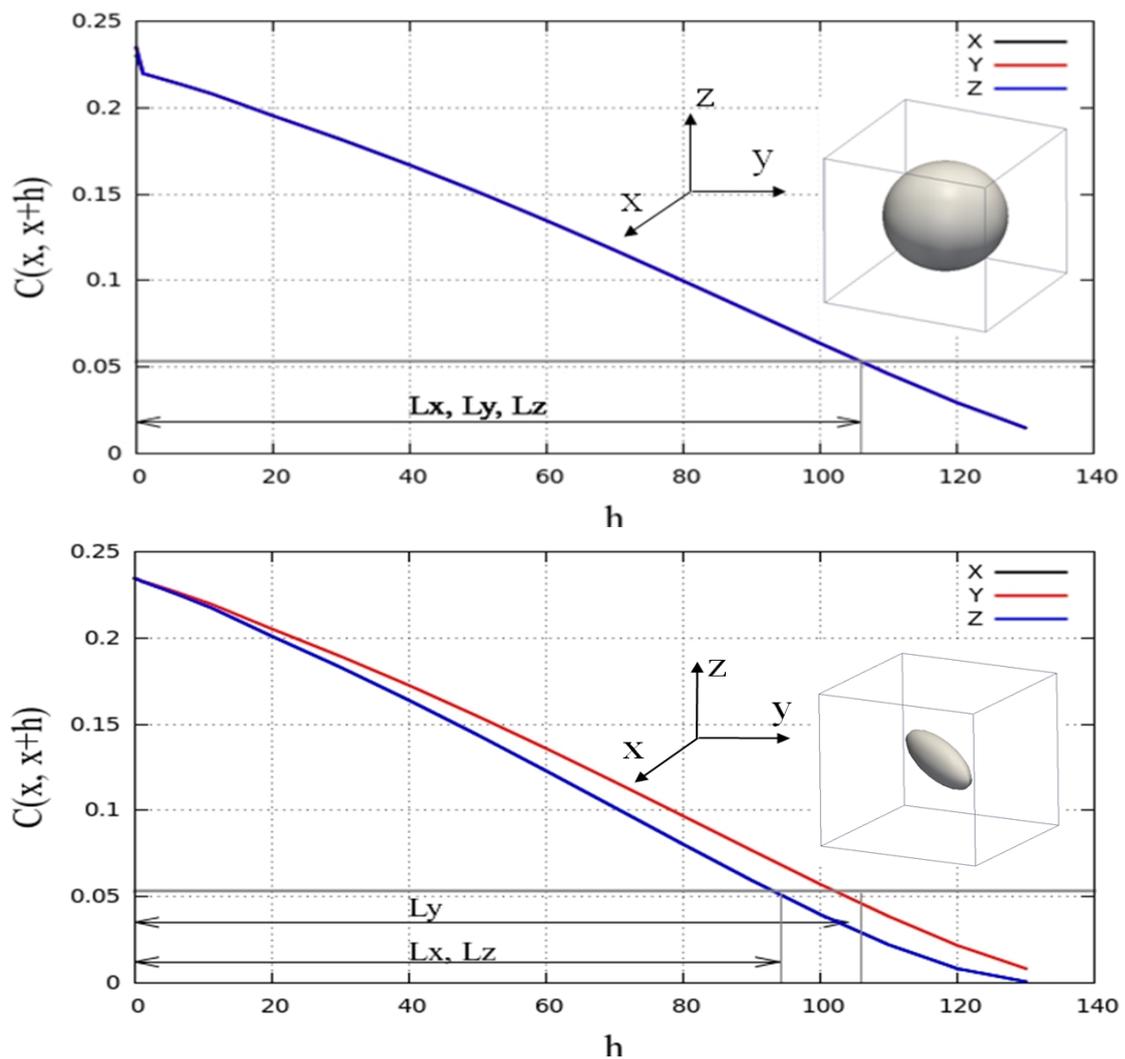


FIGURE V.10 – Les covariogrammes d'un volume contenant une seule particule de fraction volumique $p = 0.23$.

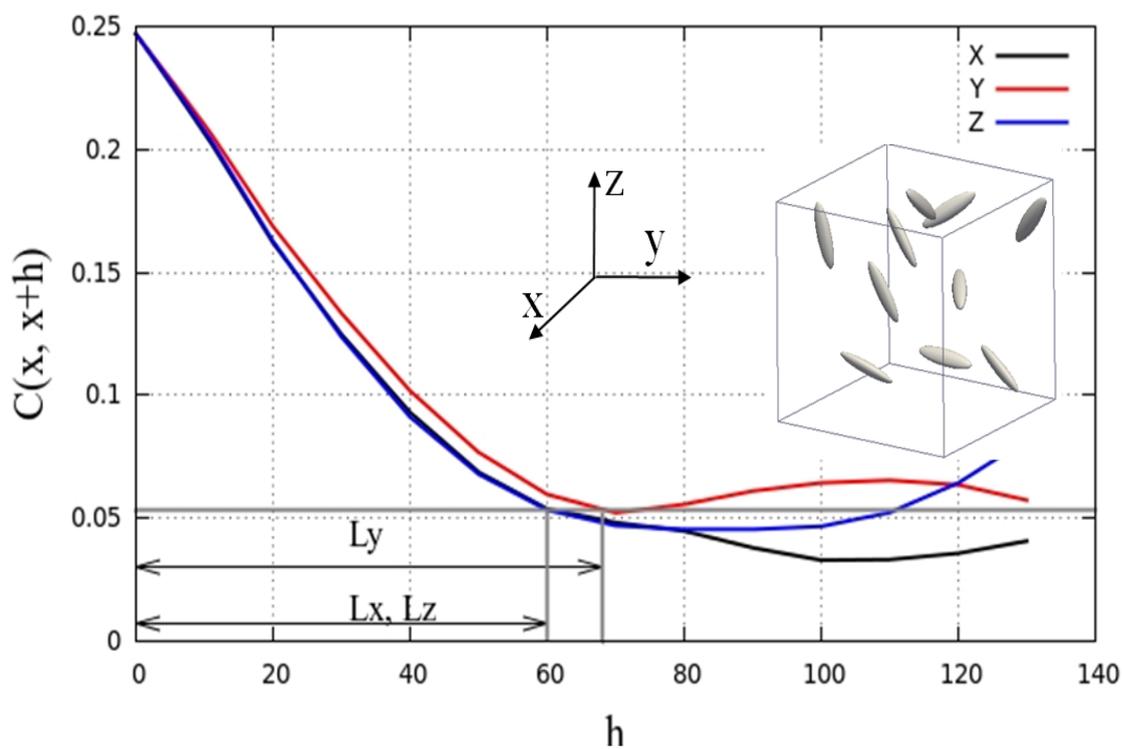
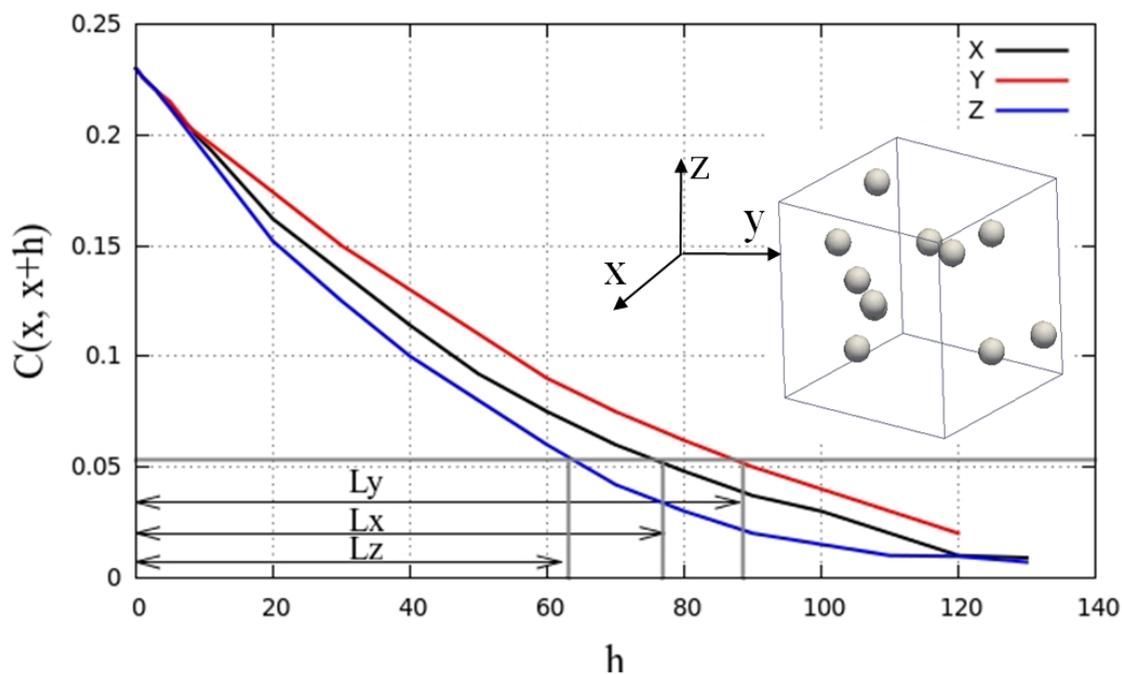


FIGURE V.11 – Les covariogrammes d'un volume contenant 10 particules de fraction volumique $p = 0.23$.

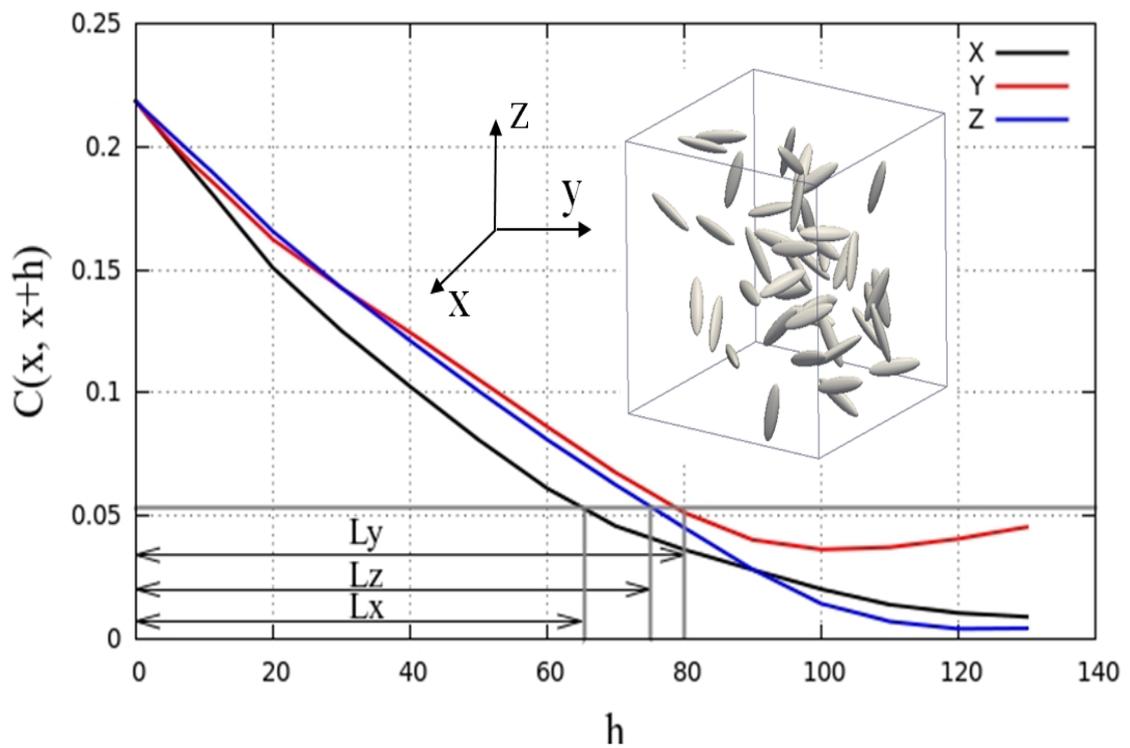
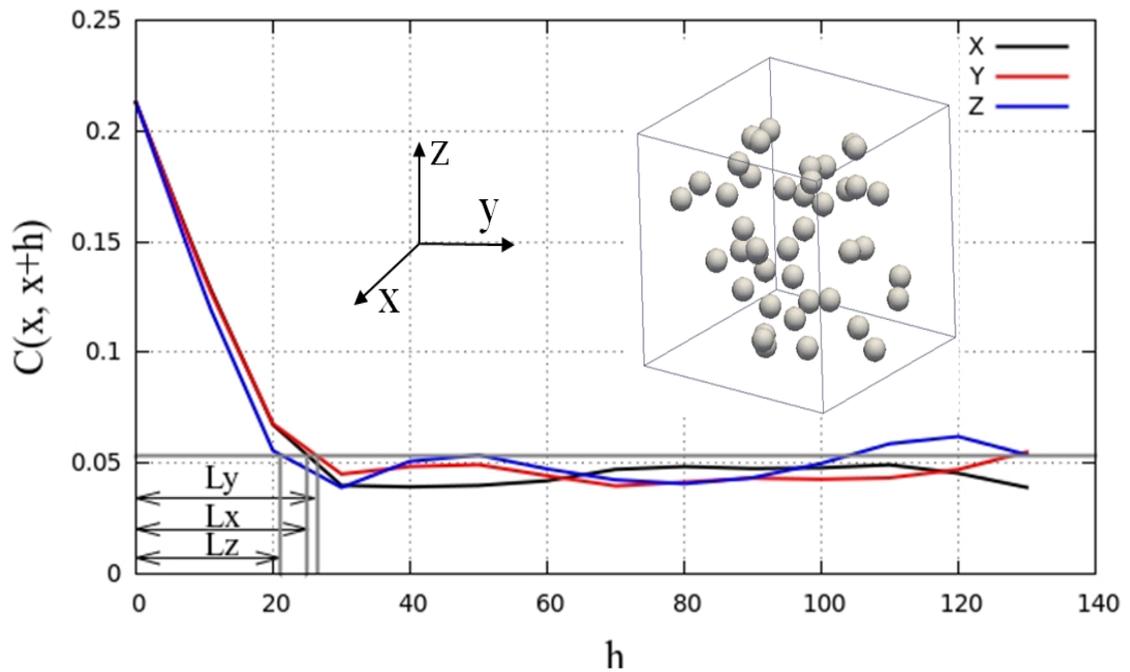


FIGURE V.12 – Les covariogrammes d'un volume contenant 50 particule de fraction volumique $p = 0.23$.

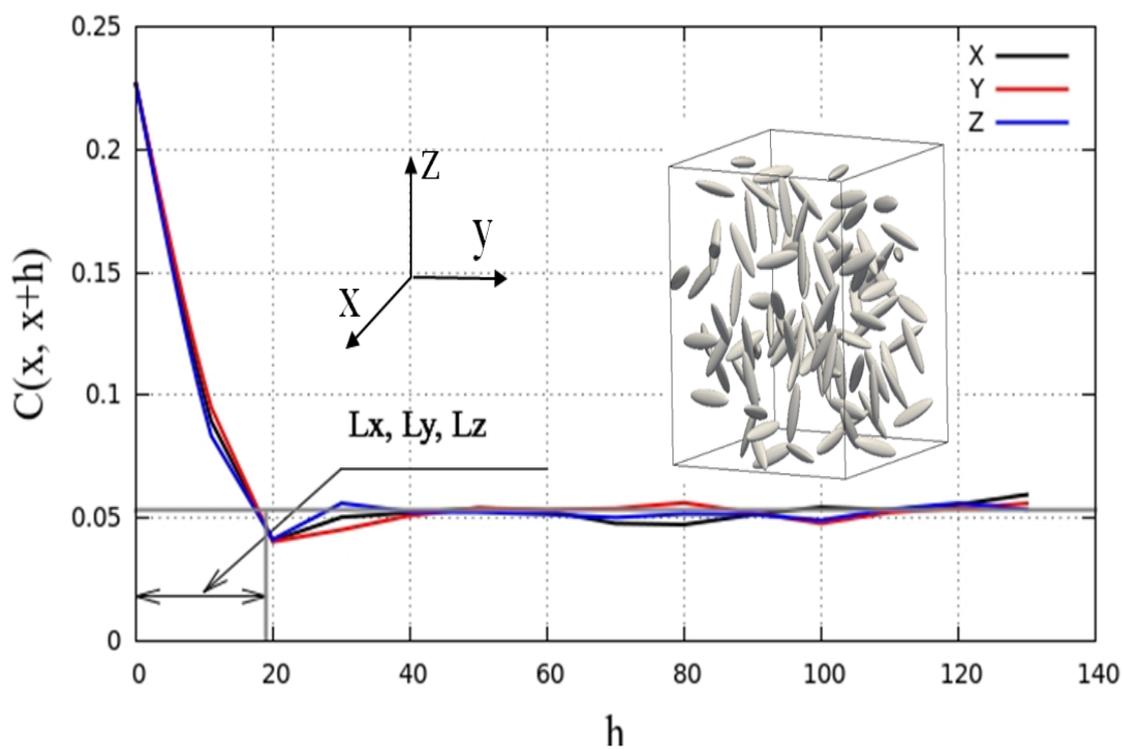
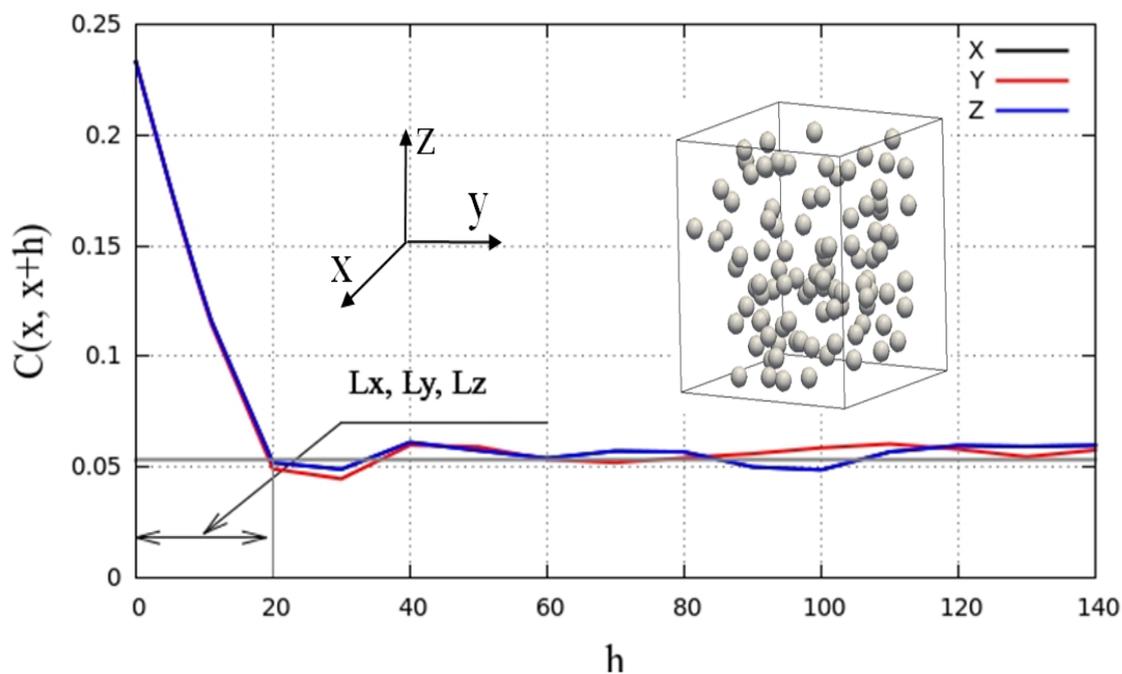


FIGURE V.13 – Les covariogrammes des *VER* déterministes de chaque forme des particules de fraction volumique $p = 0.23$.

V.4.2 Analyse de l'effet de la forme par la variance et par la portée intégrale

Dans cette partie, la notation et les définitions des paramètres statistiques présentées dans les chapitres précédents sont utilisées. On rappelle que les lois statistiques qui assurent la liaison entre la variance $D_Z^2(N)$, les propriétés mécaniques $k_{m,i}$, $\mu_{m,i}$, les propriétés morphologiques et les paramètres statistiques sont données par l'équation (III.33) du troisième chapitre.

Dans ce qui suit, on quantifie la portée intégrale A et la variation des paramètres statistiques dans le cas des particules ellipsoïdales, par la comparaison de deux résultats. Un résultat déduit directement à partir des calculs de l'homogénéisation numérique, notée A_F , et l'autre A^* proposé dans cette étude comme le volume d'une particule dans le *VER* déterministe comme suit :

$$A^* = \frac{p}{N_{VER}} \quad (\text{V.5})$$

Avec N_{VER} est le nombre des particules dans le *VER* déterministe, déterminé par la convergence d'au moins deux des trois conditions aux limites PBC, KUBC et SUBC.

La variance de chaque taille N est déterminée par les résultats de la simulation de l'ensemble de n réalisations. La méthode de fittage via l'équation III.33 entre N et son variance équivalente $D_Z^2(N)$, permet de déduire la valeur de la portée intégrale A_F . L'ensemble des résultats obtenus sont comparés à ceux donnés par l'équation V.5. Finalement, le tableau V.4 regroupe l'ensemble des résultats pour les différents cas étudiés. La comparaison des deux valeurs de la portée intégrale montre un bon accord entre A_F et celle proposée A^* quelque soit la forme. Idem, le sens de A est valable aussi pour les particules ellipsoïdales. Il faut noter que pour une homogénéisation fiable, il est nécessaire de satisfaire la condition suivante $A \lll V$.

	N_{RVE}	$A^* 10^{-3}$	$A_F 10^{-3}$
Cas 1	200	1	0.95
Cas 2	250	0.92	1
Cas 3	240	0.5	0.46
Cas 4	200	0.6	0.55
Cas 5	200	0.6	0.62

TABLE V.4 – Comparaison entre la portée intégrale proposée A^* et celle obtenue par l'homogénéisation numérique A_F .

La représentativité des résultats obtenus par les calculs d'homogénéisation est

analysée. Pour cela, les différents paramètres statistiques obtenus par les approches numériques sont comparés aux ceux obtenus analytiquement. Les figures [V.14](#) et [V.15](#) montrent un exemple de comparaison entre la variation de la variance numérique et analytique en fonction de V . On note que la variance analytique est obtenue en considérant les valeurs de la portée intégrale A^* quantifiées dans cette étude. Concernant la variance numérique, on obtient la variation par l'ensemble des résultats de la simulation de n différentes réalisations dans chaque volume V . A partir de ces figures, on remarque qu'il y a une accordance entre la variation des deux quantités. Ce constat valide les résultats de l'homogénéisation numérique et la valeur de la portée intégrale proposée.

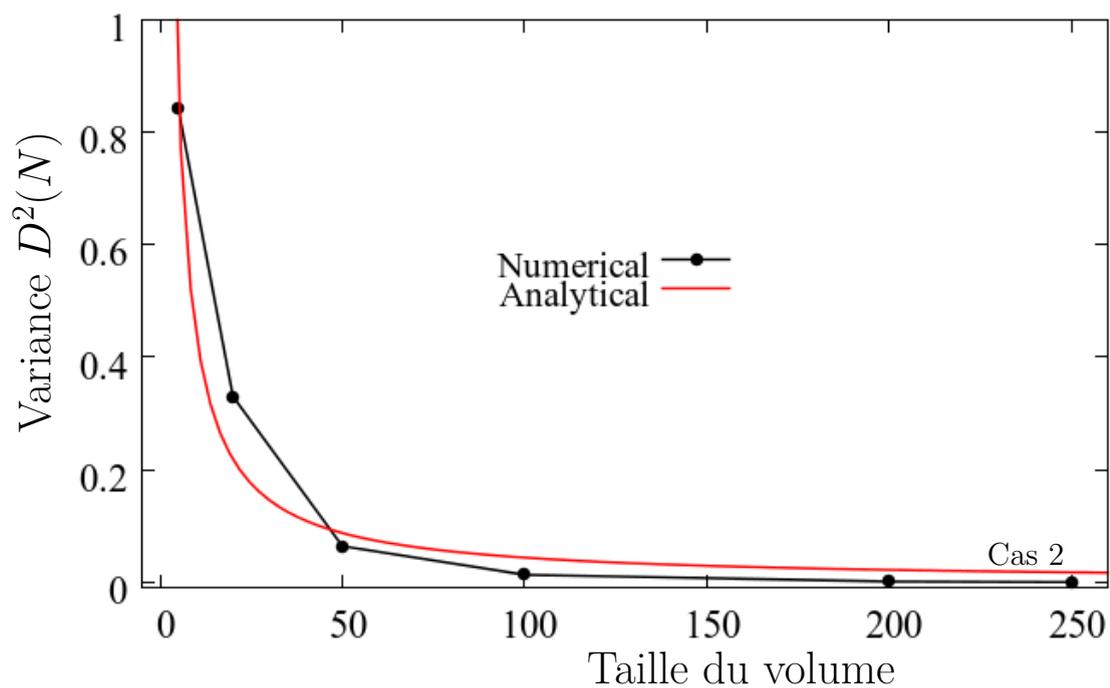
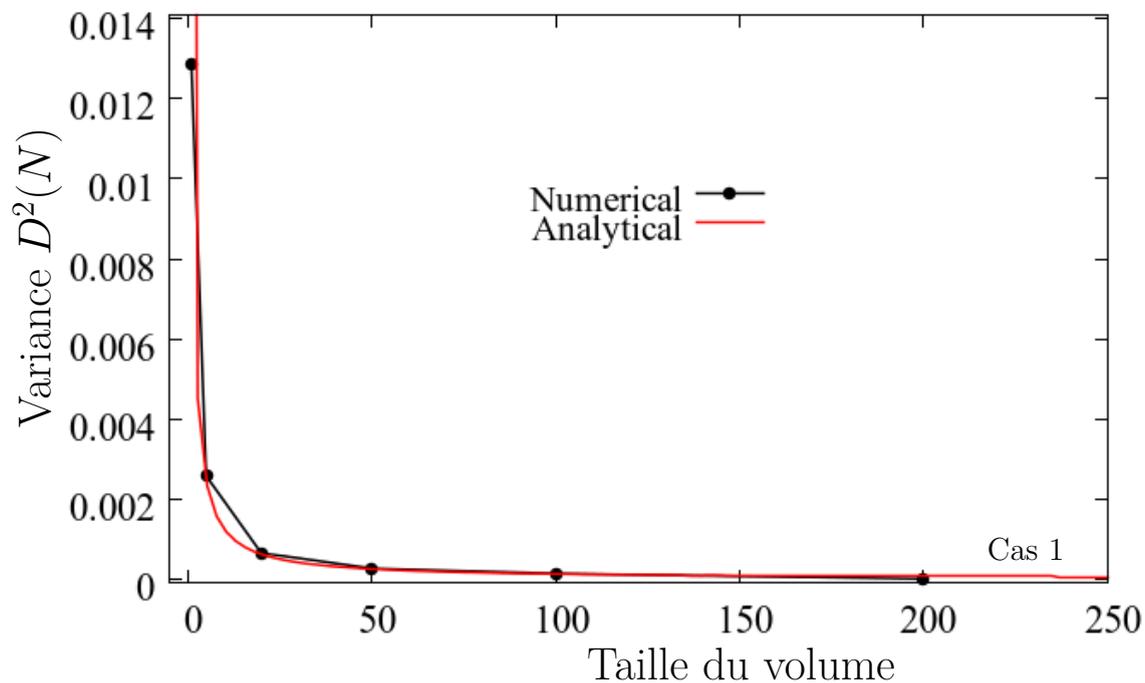


FIGURE V.14 – Comparaison entre la variance numérique et analytique pour les différentes tailles du volume.

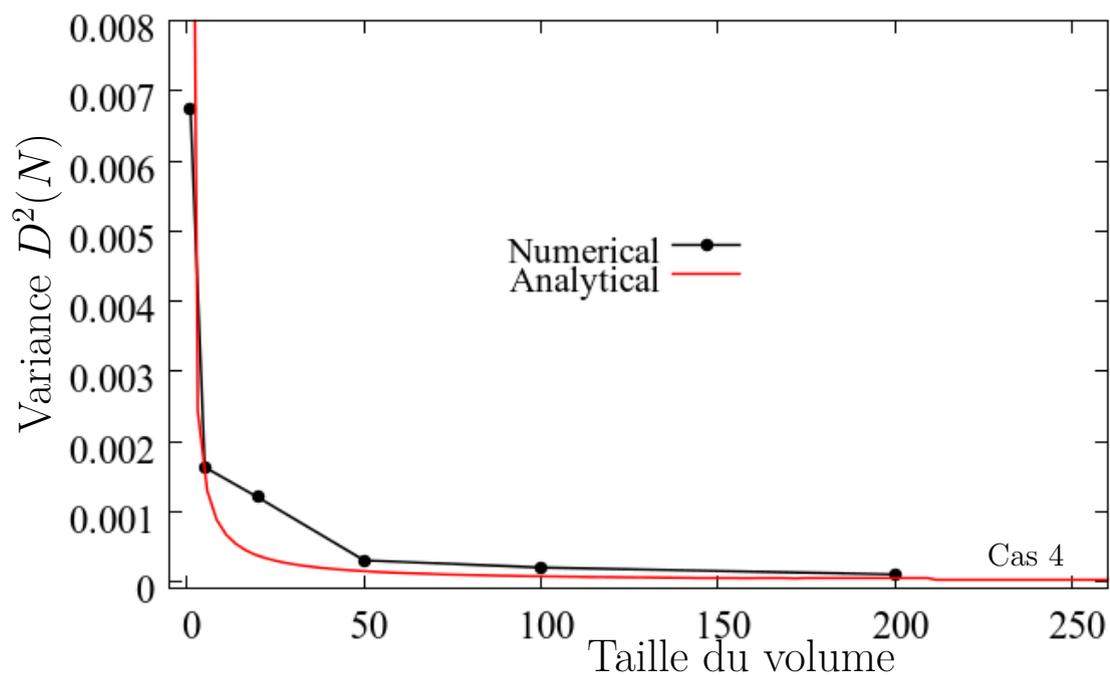
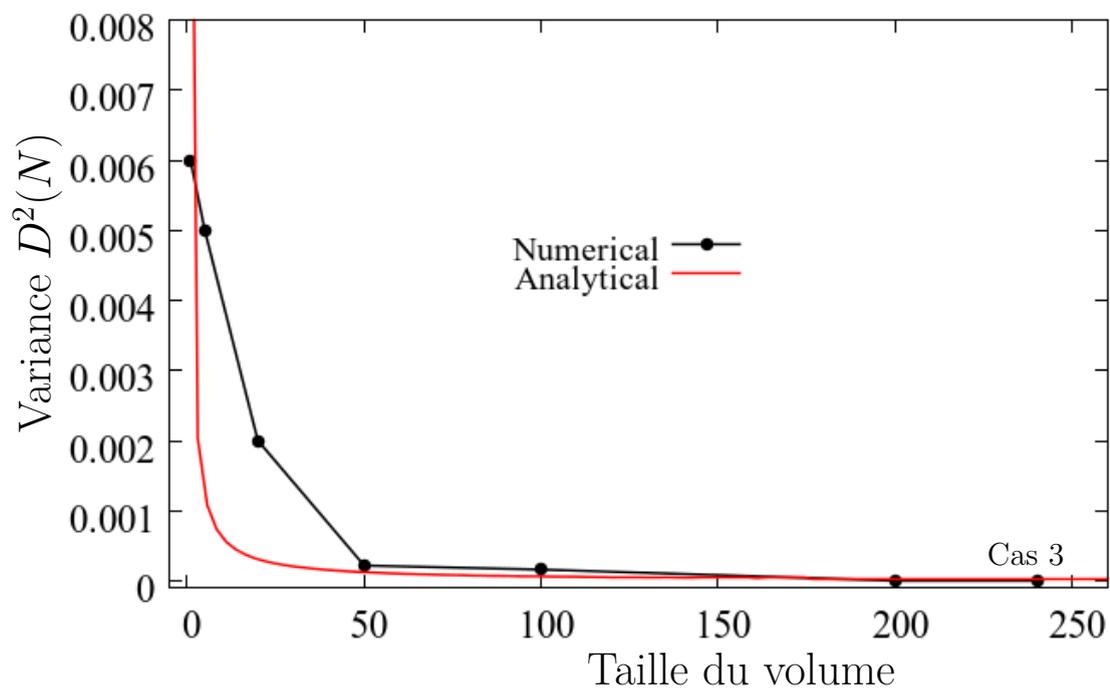


FIGURE V.15 – Comparaison entre la variance numérique et analytique pour les différentes tailles du volume.

V.4.3 Taille du VER et la fraction volumique

Dans cette partie, nous présentons la variation du VER en fonction de la fraction volumique des particules ellipsoïdales. Nous avons démontré dans le troisième chapitre que la variation de la taille du VER en fonction des propriétés mécaniques, morphologiques et statistiques est donnée par l'équation III.40. De même, pour les particules ellipsoïdales, on a la portée intégrale est le volume d'une inclusion, et par conséquent la variation de la taille du VER est donnée comme suit :

$$V_{VER} = \frac{4}{\epsilon_{abs}^2} p(1-p)(Z_i - Z_m)^2 \frac{p}{V_{VER}} \quad (V.6)$$

Finalement :

$$V_{VER} \simeq \begin{cases} \sqrt{\frac{4p(1-p)(k_i - k_m)^2}{\epsilon_{abs}^2}} p & : \text{ pour le coefficient de compression } k \\ \sqrt{\frac{4p(1-p)(\mu_i - \mu_m)^2}{\epsilon_{abs}^2}} p & : \text{ pour le coefficient de cisaillement } \mu \end{cases} \quad (V.7)$$

Ce volume est la taille minimale pour homogénéiser une propriété Z (k ou μ) avec une erreur ϵ_{abs} et pour une fraction volumique p . Mathématiquement, la variation du VER déterministe en fonction de la fraction volumique est équivalente à la variation d'une fonction définie sur un intervalle $[0 : 1]$ comme suit :

$$V_{VER}(p) \simeq \alpha p \sqrt{1-p}, \quad \text{avec : } \alpha = \frac{2}{\epsilon_{abs}} |Z_i - Z_m| \quad (V.8)$$

Pour illustration, la figure V.16 montre des exemples de variation de la taille du VER déterministe d'un matériau hétérogène en fonction de la fraction volumique p , selon l'équation V.8. L'augmentation de la fraction volumique augmente la taille du VER déterministe. Cette variation atteint un maximum pour une valeur de la fraction volumique donnée par $d(p\sqrt{1-p})/dp = 0$ qui correspond à $p = 0.67$. Après cette valeur maximale, la taille du VER diminue en augmentant p .

Il faut noter, d'après ces résultats, que la microstructure hétérogène qui nécessite un VER le plus large est celle ayant une distribution aléatoire de 67% de particules.

V.4.4 Taille du VER et contraste des propriétés des phases

Par la même méthodologie suivie dans le cas de la variation du VER en fonction de la fraction volumique p , on peut déterminer aussi ces variations en fonction du contraste des propriétés des phases. On définit le contraste c selon la propriété Z

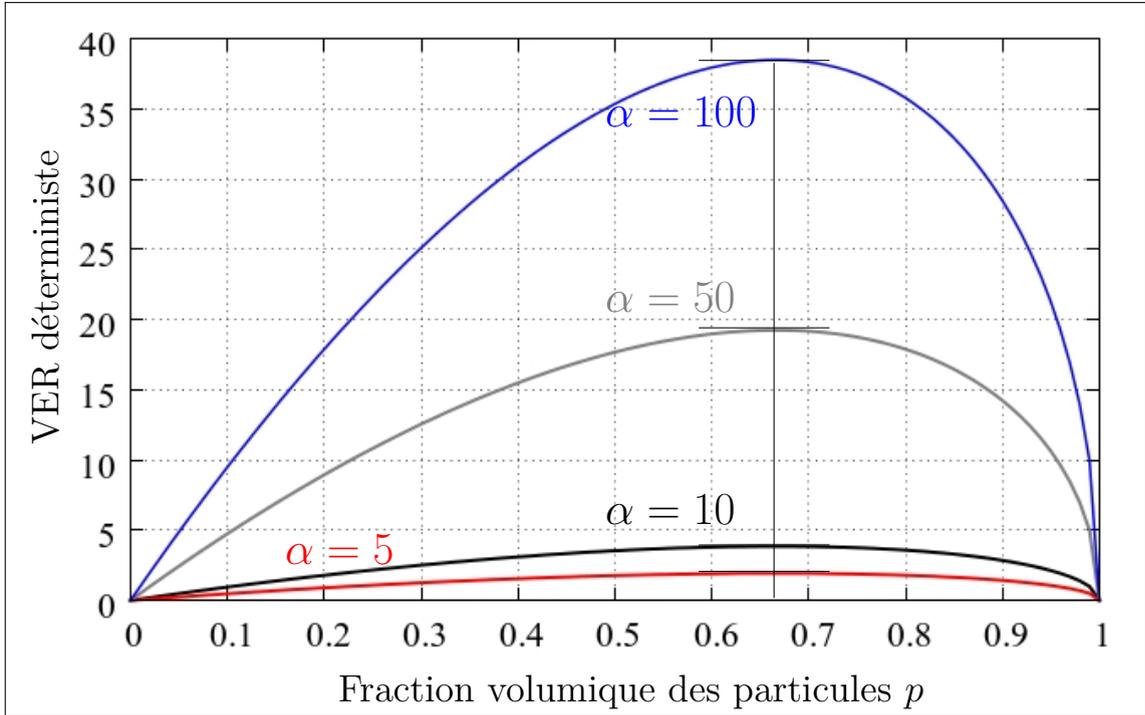


FIGURE V.16 – Variation de la taille du VER déterministe en fonction de p .

d'un composite comme le rapport des propriétés Z de l'inclusion i et celle de la matrice m . On a donc : $c = Z_i/Z_m$. La variation du VER, donnée par l'équation V.7, peut s'écrire sous la forme suivante :

$$V_{VER}(c) \simeq \beta|c - 1| \quad \text{et} \quad \beta = \frac{2Z_m}{\epsilon_{abs}} p \sqrt{1 - p}, \quad p \in [0 : 1] \quad (\text{V.9})$$

En fonction du contraste, ces variations sont équivalentes à celles d'une fonction définie sur un intervalle $]0 : \infty[$ comme suivant :

$$V_{VER} = \begin{cases} \beta(x - 1) & \text{si } x \succeq 1 \\ \beta(1 - x) & \text{si } x \preceq 1 \end{cases} \quad (\text{V.10})$$

La figure V.17 montre des exemples de variation du VER en fonction du contraste d'un composite. Il apparaît qu'une augmentation de c fait augmenter la taille du VER.

V.4.5 Variation du VER dans le plan (p, c)

Nous avons déterminé dans les deux précédentes sections, la variation du VER en fonction de la fraction volumique p d'une part, puis en fonction du contraste

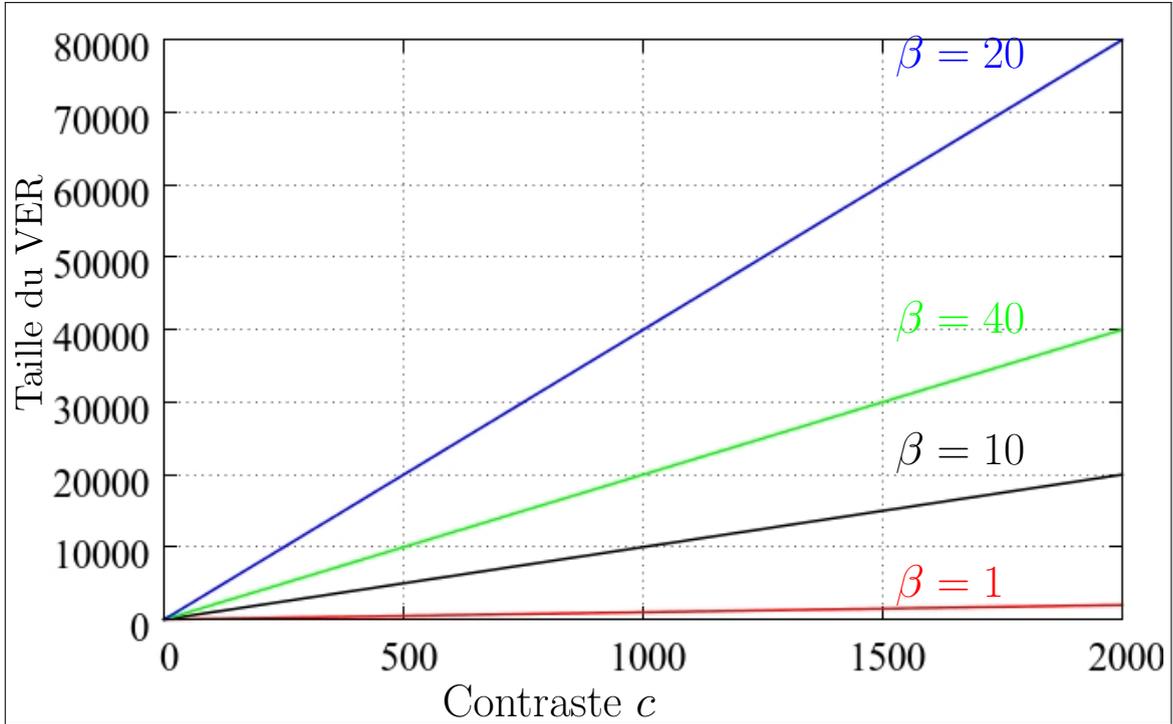


FIGURE V.17 – Variation de la taille du VER d'une microstructure aléatoire en fonction du contraste c .

de la microstructure d'une autre part. On note que ces variations sont équivalentes mathématiquement aux variations d'une fonction à une seule variable.

On présente dans cette partie, la variation du VER comme une fonction à deux variable. Le plan de définition de la fonction à deux variables est défini par la fraction volumique $p \in [0 : 1]$ et le contraste $c \in]0 : \infty[$.

A partir de l'équation V.7, on déduit que le VER des propriétés élastiques peut s'écrire en fonction de p et c sous la forme :

$$V_{VER}(p, c) = \frac{2Z_m}{\epsilon_{abs}} |c - 1| p \sqrt{(1 - p)} \quad (\text{V.11})$$

Pour déduire les variations dans l'espace, il suffit de tracer la courbe bi-dimensionnelle de cette équation. Un exemple est présenté sur la figure V.18 pour un composite de propriétés $Z_m = k_m = 4GPa$ et $\mu_m = 2GPa$ et une erreur absolue $\epsilon_{abs} = 0.05 GPa$:

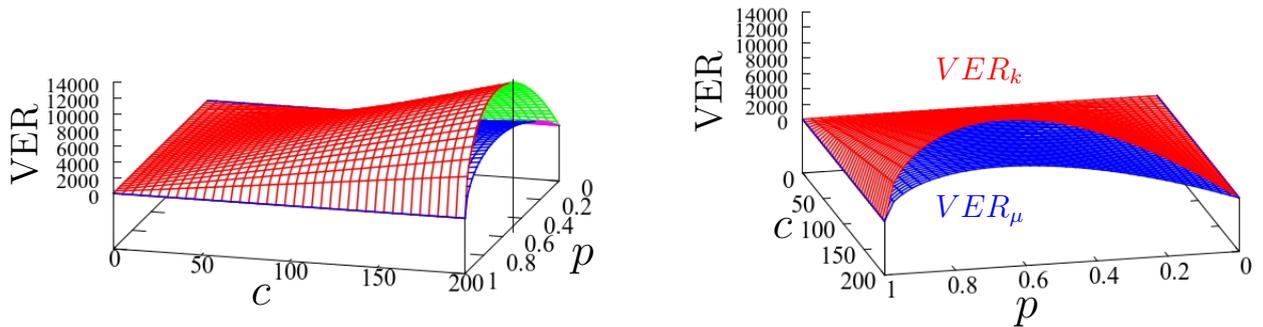


FIGURE V.18 – Variation de la taille du VER élastique d'une microstructure aléatoire dans l'espace (fraction volumique, contraste).

V.5 Synthèse

Dans ce chapitre, on s'est focalisé sur les microstructures bi-phasiques sans interconnexion des particules. L'objectif était la détermination de l'effet de la forme des particules sur le comportement élastique effectif et sur la taille du VER. Nous avons déterminé les propriétés apparentes et effectives sur des microstructures aléatoires chargées de particules de forme et de fraction volumique différentes. Trois formes de particules différentes ont été considérées. Une forme sphérique, une forme aplatie et une forme allongée. Les paramètres statistiques ont été utilisés pour l'étude de la représentativité des résultats de l'homogénéisation.

Nous avons aussi étudié la variation de la taille du VER d'une microstructure hétérogène en fonction de la fraction volumique d'une part, puis en fonction du contraste d'une autre part. Le VER de chaque forme a été étudié. A partir de ces variations, on a déterminé la fraction volumique des particules (sphérique et ellipsoïdales) ainsi que le contraste du matériaux nécessitant un large VER. En observant que la microstructure contenant 67% des particules très rigides nécessite un large VER pour homogénéiser ses propriétés élastiques.

Chapitre VI

Analyse multi-échelle en approche numérique et statistique de la morphologie d'un biocomposite d'arganier

Résumé :

La caractérisation morphologique et les méthodes de calcul ont favorisé la simulation numérique et le design des microstructures hétérogènes réelles. En effet, les approches multi-échelles nous permettent d'améliorer les propriétés élastiques des matériaux composites. Dans ce chapitre, l'objectif est l'étude de la microstructure tridimensionnelle (3D) d'un biocomposite chargé de granulats naturels. Le biocomposite est constitué d'une matrice poly-propylène (PP), renforcée par des granulats naturels de la coque de noix d'arganier (GCNA). Les granulats de la coque sont utilisés comme une charge pour améliorer le comportement des polymères. La microstructure 3D du biocomposite est obtenue par l'assemblage de plusieurs images obtenues par les observations microscopiques. Nous décrivons la procédure de découpage, de construction 3D, de visualisation et de modélisation numérique de ce biocomposite. La caractérisation morphologique par des approches statistiques sera utilisée pour l'étude de la représentativité et de l'anisotropie des microstructures. La notion de volume élémentaire représentatif statistique est utilisée pour quantifier la taille minimale des éprouvettes expérimentales. L'ensemble des résultats obtenus par la simulation sont confrontés aux ceux obtenus par les approches analytiques et les données expérimentales.

Sommaire

VI.1 Introduction	148
VI.2 Matériau et méthode	150
VI.2.1 Données expérimentales	150
VI.2.2 Préparation des microstructures	151
VI.2.3 Traitement d'images	151
VI.2.3.1 Numérisation	151
VI.2.3.2 Filtrage et seuillage	153
VI.2.3.3 Préparation de la microstructure 3D	158
VI.3 Homogénéisation numérique	159
VI.3.1 Maillage éléments finis	159
VI.3.2 Estimation des propriétés effectives	160
VI.3.3 Calcul du tenseur des propriétés élastiques	162
VI.4 Caractérisation par mesure morphologique et statistique	163
VI.4.1 Covariance et l'anisotropie	163
VI.4.2 Représentativité de la taille des échantillons	165
VI.4.3 Variation de la taille du <i>VER</i> en fonction de GCNA	167
VI.5 Synthèse	169

VI.1 Introduction

Au cours de ces dernières années, plusieurs matériaux d'origine naturelle ont été étudiés en tant que renforts de polymères pour obtenir des biocomposites. Globalement, ces matériaux peuvent être classés en deux familles selon le type du renfort naturel. Tout d'abord, les biocomposites chargés de fibres naturelles comme le sisal, le jute et le lin, présentés par [Rokbi et al. \(2011\)](#). D'autre part, les biocomposites chargés de granulats naturels tels que le cas de la coque d'amande étudiée par [Crespo et al. \(2007\)](#) et la coque d'olive citée par [Siracusa et al. \(2001\)](#).

Quelques travaux comme [Bledzki and Gassan \(1999\)](#) ont présenté un compte rendu sur les composites polymères renforcés par des fibres naturelles et ses applications. Cette étude a été élargie par [Faruk et al. \(2012\)](#) pour les années entre 2000 et 2010. Généralement, ces biocomposites sont rigides, résistants, moins denses et ont la possibilité d'être recyclé contrairement aux autres charges inorganiques couramment utilisées. Ces avantages placent les biocomposites de charge naturelle parmi les matériaux disposant de la meilleure performance offrant des avantages économiques et environnementaux, [Mir et al. \(2013\)](#). Cependant, il faut noter qu'il y a un certain nombre de difficultés associées à l'intégration de ces charges dans les matrices polymères, en particulier, l'incompatibilité charge-matrice. Ce problème peut être un inconvénient lorsqu'on ne dispose pas de moyens chimiques pour améliorer la compatibilité.

Plusieurs travaux de recherche ont été menés dans le domaine des biocomposites pour évaluer les résultats expérimentaux par l'analyse de la contribution des différents renforts naturels. Par exemple, [Crespo et al. \(2007\)](#) ont étudié le comportement élastique d'un nouveau biocomposite thermoplastique à base de la coque d'amande. Durant cette étude, les auteurs ont évalué l'effet de la proportion des granulats sur les propriétés élastiques et morphologiques du biocomposite. On note ici que le module de Young du biocomposite augmente avec l'augmentation de la teneur en coque d'amande. Il apparaît aussi que les proportions de la charge influencent la morphologie du biocomposite, ainsi que la dispersion de la charge dans la matrice. La même démarche a été utilisée par [Kaci et al. \(2007\)](#) concernant la caractérisation d'un mélange d'une matrice polythélyne et la coque d'olive. Les résultats obtenus montrent aussi qu'une augmentation de la proportion de la charge influence le module de Young du biocomposite.

En revanche, d'autres travaux s'intéressent à l'étude du comportement élastique des biocomposites en utilisant les méthodes numériques et l'analyse multi-échelle. En effet, la méthode des éléments finis est la plus répandue et joue un rôle important pour l'homogénéisation de ce genre de matériaux. Cette approche a été utilisée par

[Silva et al. \(2012\)](#) qui ont comparé les résultats de la simulation numérique avec ceux obtenus par la caractérisation expérimentale de résine époxy renforcée par les fibres de sisal et de bananier. Dans leurs travaux, [Behzad and Sain \(2007\)](#) présentent le point sur l'utilisation de la méthode des éléments finis pour l'estimation des propriétés effectives des biocomposites renforcés par des fibres de chanvre. Après la comparaison des résultats de la simulation avec les données expérimentales, il apparaît que cette méthode est robuste et peut être utilisée pour décrire le comportement macroscopique des matériaux à renfort naturel. Globalement, un bon accord entre les résultats de la simulation numérique et ceux de l'expérience a été observé.

Jusqu'à présent, les méthodes expérimentales ne sont pas suffisantes pour estimer les propriétés macroscopiques des matériaux hétérogènes. Pour cette raison, les chercheurs devraient discuter autour de l'utilisation des techniques d'imagerie et de design. De nombreuses contributions offrant des liens directs entre les images réelles 3D et les calculs par EF sont apparues, voir [Maire et al. \(2003\)](#). Cela se justifie par le fait que les propriétés physiques dépendent généralement de la morphologie des phases. Les images 3D du matériau peuvent être obtenues par l'assemblage des images réelles 2D de microscope optique, de microscope électronique à balayage, de microscope électronique à transmission ou par l'image directe de la micro-tomographie.

Dans cette partie, nous nous intéressons à l'étude de la microstructure d'un biocomposite à base de la coque de noix d'arganier. Ce biocomposite, nommé PP/GCNA, est constitué d'une matrice polypropylène (PP) chargée par des granulats de la coque de noix d'arganier (GCNA). Les microstructures de ce matériau font l'objectif principal de notre étude pour la représentation, la visualisation 3D, la simulation numérique et finalement pour l'étude de la représentativité de la taille des éprouvettes.

En effet, la microstructure 3D est obtenue à partir d'une série d'images réelles 2D générées par les observations microscopiques. Le maillage des microstructures associé à chaque image réelle est réalisé en utilisant la méthode des éléments multi-phases. Dans le but de quantifier la précision des résultats numériques, la question de la représentativité des éprouvettes doit être abordée puis étudiée en détail. L'ensemble des résultats de la simulation numérique sont comparés avec les approches analytiques et les données expérimentales.

VI.2 Matériau et méthode

VI.2.1 Données expérimentales

Le matériau utilisé dans cette étude est fabriqué à partir de la résine PP mélangée avec les granulats de GCNA. La coque de noix d'arganier, produite par l'arbre d'arganier, est collectée sur le territoire du sud-ouest du Maroc. La coque est une espèce de bois, de couleur marron, de forme ovale, de longueur 15 à 20 mm et de densité variable entre 0.7 à 0.9 t/m³. La coque d'arganier, voir la figure VI.1.c, est un matériau lignocellulosique obtenu lors du processus de fraisage d'huile d'argan. Le broyage de la coque permet d'obtenir des granulats de forme sphérique et de tailles différentes. Le diamètre des granulats de la figure VI.1.d est compris entre 1 à 250 μm. Ces granulats sont mélangés avec le PP pour fabriquer la microstructure du composite PP/GCNA. Les détails sur les éprouvettes, les essais de traction et les propriétés mécaniques sont obtenus en parallèle dans les travaux de [Essabir et al. \(2013\)](#). Les résultats expérimentaux de l'essai de traction sont présentés sur la figure VI.2. Cette figure montre l'évolution du module de Young normalisé E_c/E_m en fonction de la fraction volumique de la charge p . Il est à noter que cette évolution est linéaire et peut s'écrire sous la forme suivante :

$$\frac{E_c}{E_m} = 1 + 0.024p \quad (\text{VI.1})$$

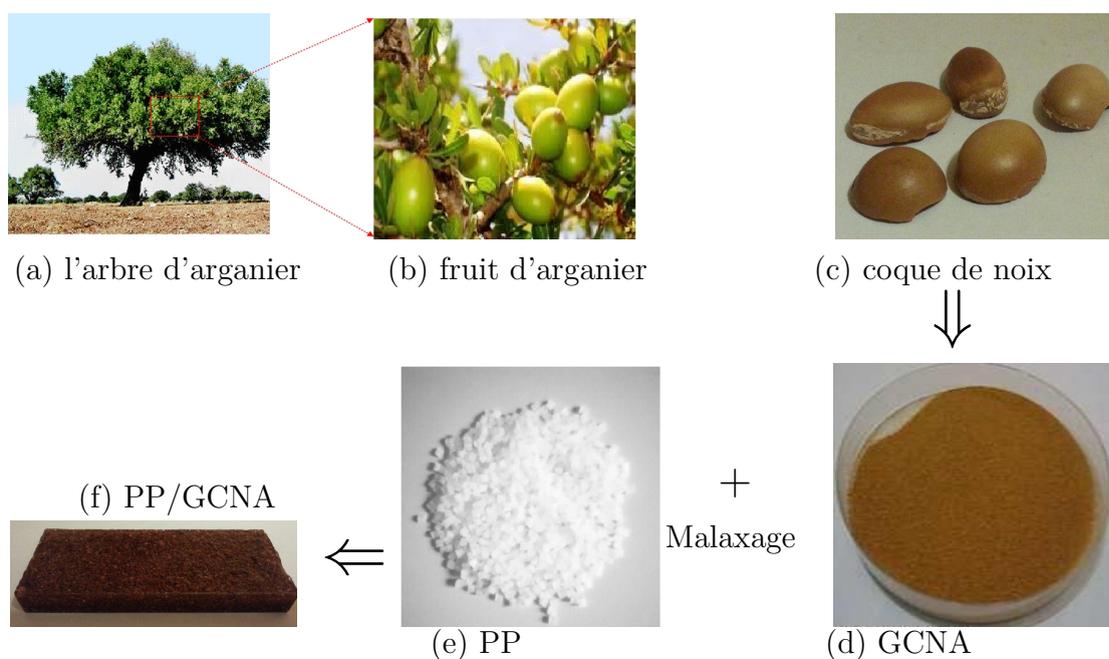


FIGURE VI.1 – Les matériaux et le processus global de fabrication du biocomposite.

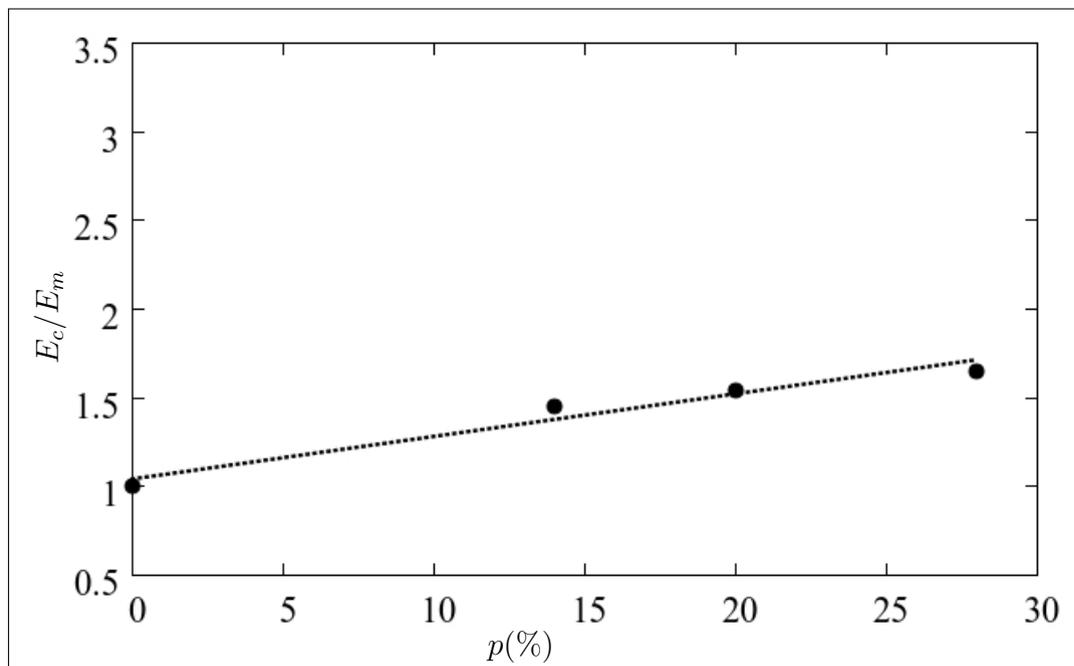


FIGURE VI.2 – Module de Young normalisé en fonction de la fraction volumique des charges.

VI.2.2 Préparation des microstructures

La caractérisation morphologique du biocomposite PP/GCNA est réalisée en utilisant les images obtenues à l'aide d'observations microscopiques (figure VI.3). Ces images sont assemblées en utilisant la méthode de coupe en série, dans le but de générer une microstructure 3D. Pour illustration, une visualisation 3D de la microstructure réelle est donnée par la figure VI.4. Sur cette figure, on présente la face avant et la face arrière du biocomposite. Pour identifier chacune des deux phases (PP et GCNA), une ségmentation est nécessaire, qui est réalisée en utilisant un logiciel de traitement d'image.

VI.2.3 Traitement d'images

VI.2.3.1 Numérisation

Dans cette section, nous présentons une méthode permettant de transformer une image numérique bruitée par les signaux et les fréquences du microscope, en image binaire, claire, adaptée aux simulations et aux maillages. La transformation est réalisée avec un minimum de perte sur la fraction volumique, la forme et la disposition de la charge dans la matrice.

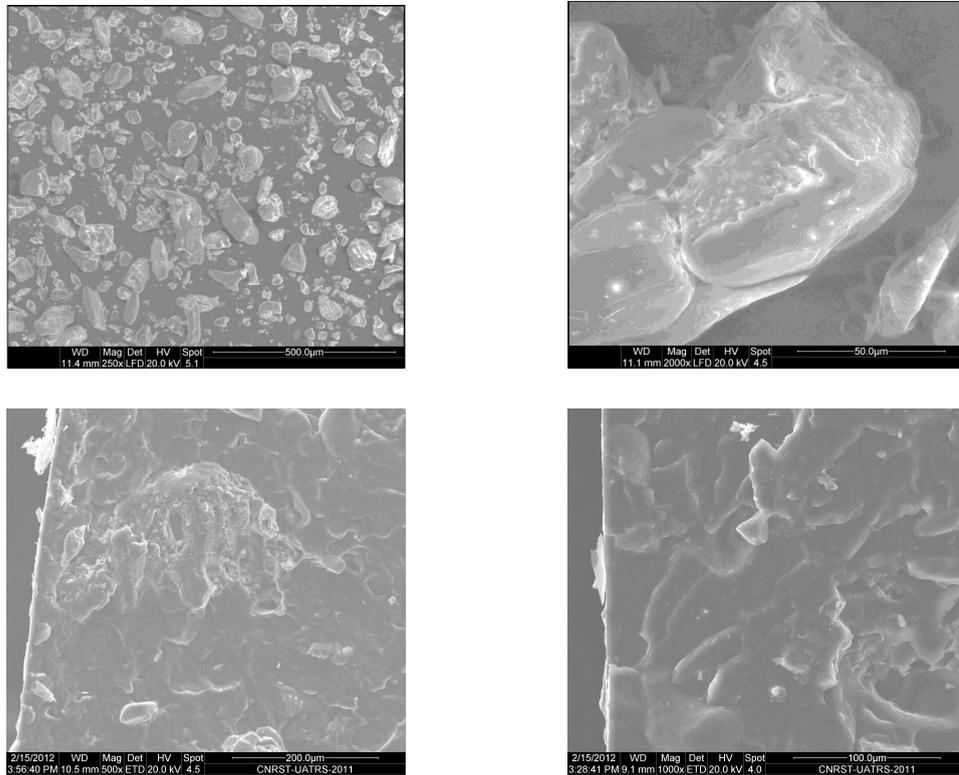


FIGURE VI.3 – Clichés du biocomposite PP/GCNA obtenus par observation microscopique.

L'objectif ici est de décrire l'ensemble des étapes pour préparer les images réelles de microscope pour la visualisation 3D, le maillage et pour les calculs EF. Les images réelles sont transformées en images binaires biphasées. La figure VI.5 montre un exemple d'une image et son histogramme au niveau de gris. Ces clichés sont des images en nuances de gris, 16 bits, de 600 pixels \times 518 pixels. Il est à noter que la qualité d'images diffère d'un mélange à un autre selon la distribution et le taux de GCNA. Sur chaque image, on identifie les trois principaux constituants de la microstructure. La matrice polymère qui est linéaire enrobant le GCNA, les particules qui sont les plus petits constituants du biocomposite et finalement la phase d'agglomération produite par l'association de plusieurs particules. On note également que quelques images présentent des tâches blanches caractérisant des pores.

Une image microscopique contient nécessairement plusieurs couleurs. Dans tous les cas, chaque couleur est associée à un pique défini par un nombre entier. L'histogramme représenté sur la figure VI.5 donne le nombre de pixels par label ou le contraste des différentes couleurs comprises entre 0 (le noir) et 255 (le blanc). L'histogramme logarithmique de la figure VI.5 montre que notre image est formée de 150 couleurs de différentes intensités, alors qu'elle est censée être en deux couleurs.

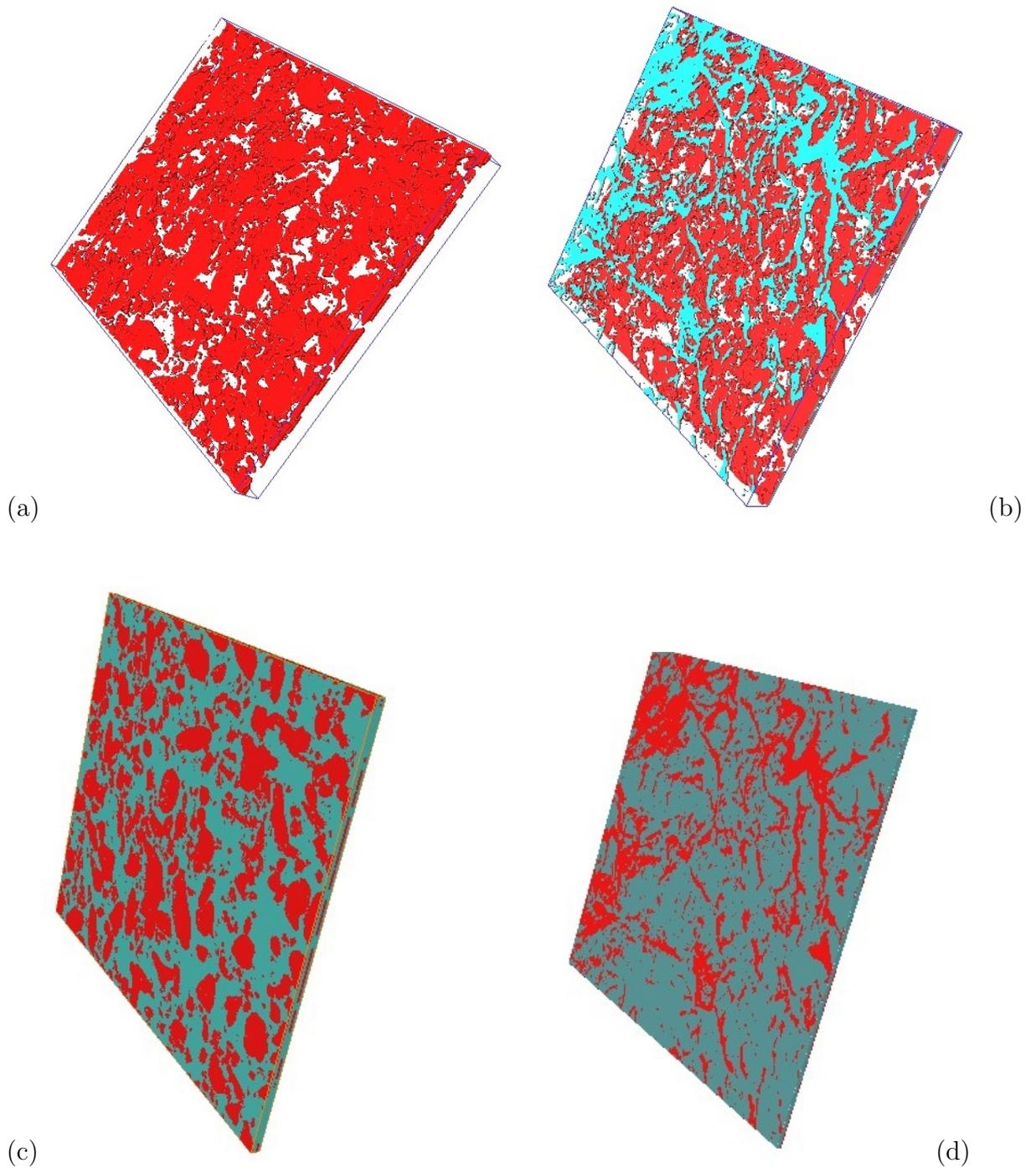


FIGURE VI.4 – Visualisation 3D : (a) face avant de GCNA, (b) face arrière de GCNA, (c) face avant de PP/GCNA et (d) face arrière de PP/GCNA.

VI.2.3.2 Filtrage et seuillage

La segmentation regroupe l'ensemble des opérations pour le traitement d'images numériques. Parmi ces opérations, on trouve le filtrage et le seuillage. Le filtrage consiste à éliminer le bruit d'une image afin d'améliorer le contraste et la qualité.

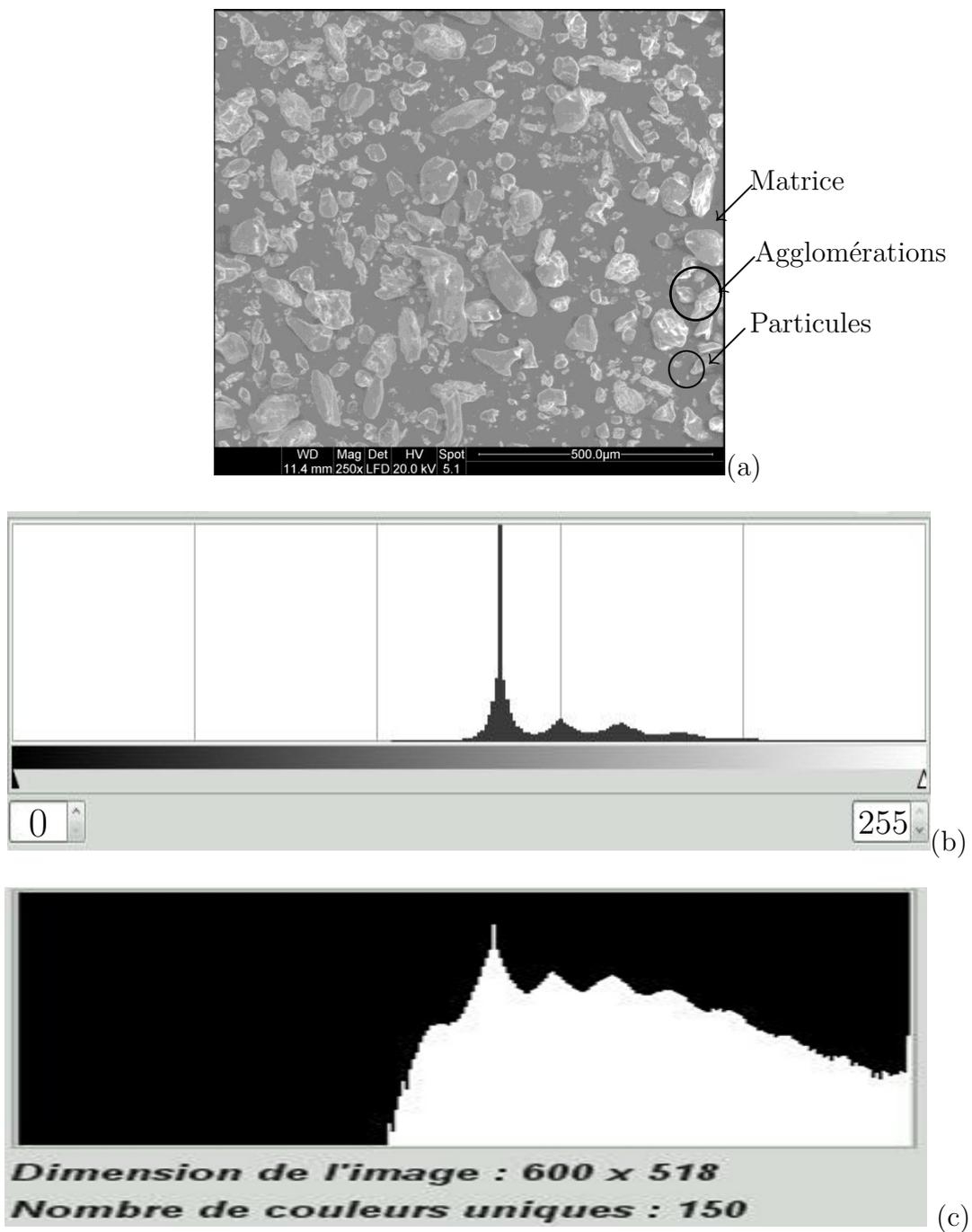


FIGURE VI.5 – (a) Image du biocomposite, (b) histogramme linéaire et (c) histogramme logarithmique au niveau de gris.

Ces bruits existent généralement sous forme de basses et de hautes fréquences.

La première étape consiste à déterminer l'ensemble des points de contact entre le GCNA et la résine PP. Cette étape a pour but de garder le maximum d'informations morphologiques de la microstructure, comme la fraction volumique, la distribution et la forme des granulats. La figure VI.6 montre la microstructure du biocomposite

PP/GCNA avec l'ensemble des points de contacts entre la matrice et la charge.

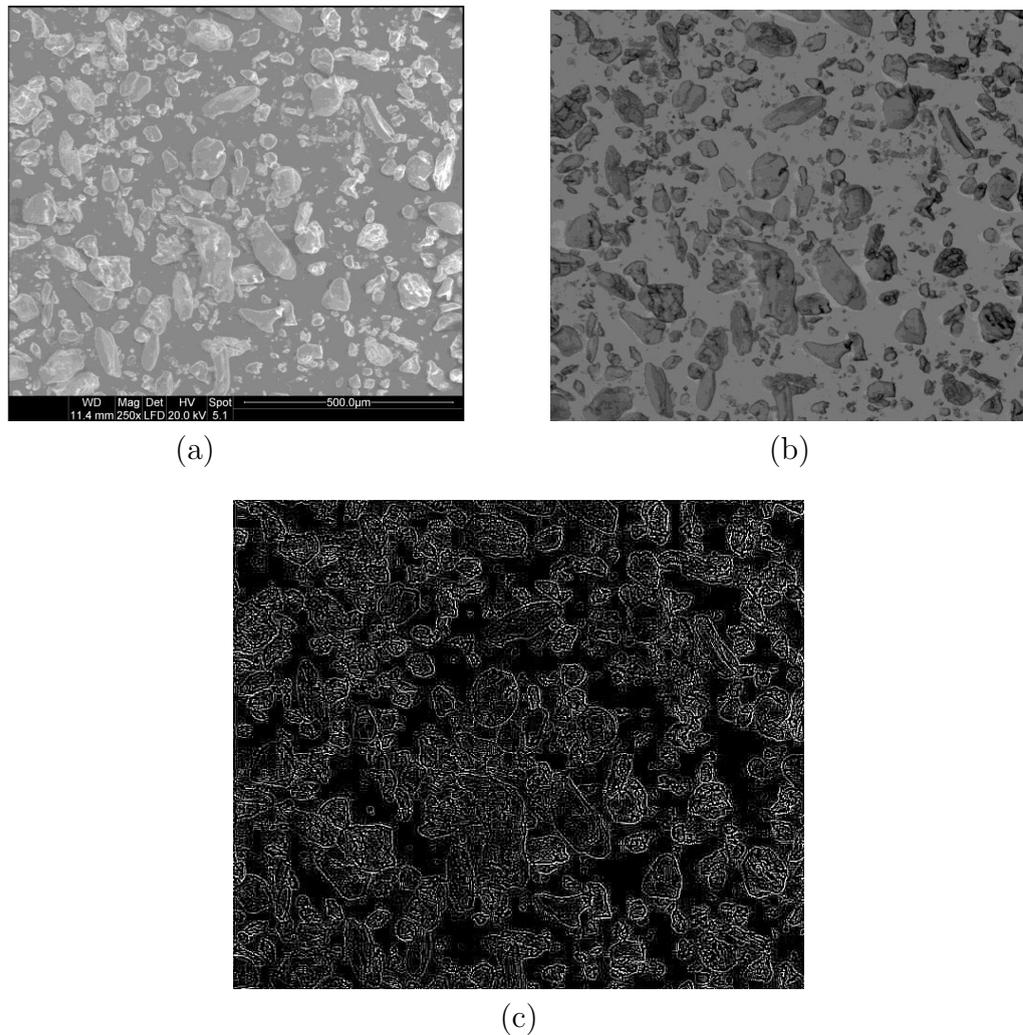


FIGURE VI.6 – Microstructure du biocomposite : (a) image microscopique, (b) amélioration du contraste et (c) inter-phase PP/GCNA.

La seconde étape consiste à appliquer des filtres anti-parasites pour éliminer le bruit de basses et hautes fréquences. Dans un premier temps, l'image 2D a été débruité par l'utilisation d'un filtre médian. Le choix de ce filtre vient du fait que, selon [Jean \(2009\)](#), c'est le plus répandu pour ce genre d'images. Il sert à supprimer les mouchetures, les traces et les petites imperfections. Concernant la faible présence de quelques pores sur l'image, même après l'application des filtres, la solution est d'assimiler le comportement de ces pores à celui de GCNA. La figure [VI.7](#) montre l'image microscopique 2D après l'application d'un filtre médian anti-parasite sur la microstructure.

Après le filtrage, les images sont seuillées manuellement. L'outil seuil transforme la sélection en une image en noir et blanc, où les pixels blancs représentent les pixels

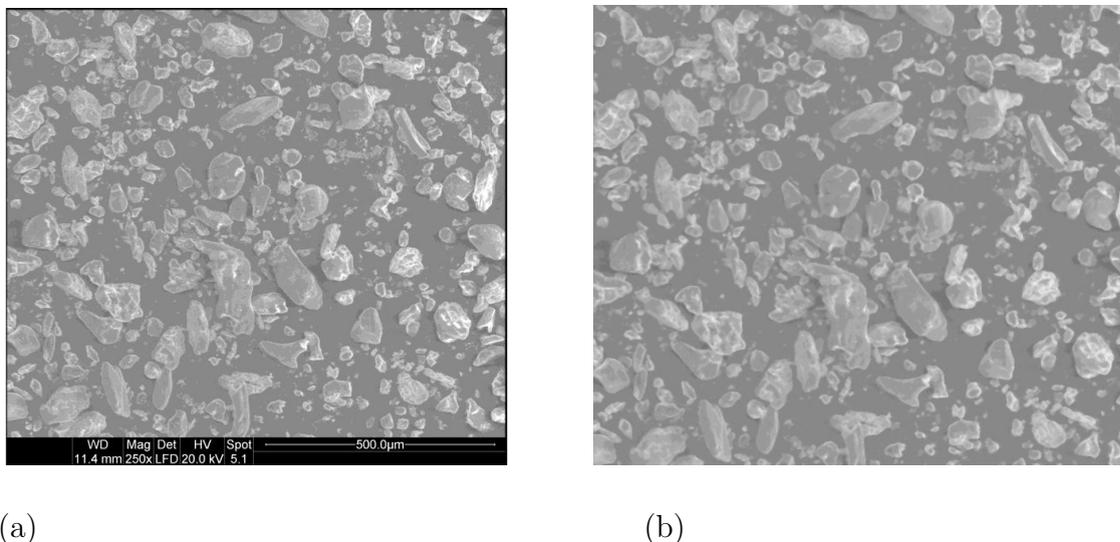


FIGURE VI.7 – (a) Image microscopique originale et (b) image après l'application du filtre médian.

dont la valeur est supérieure à l'intervalle du seuil fixé et les pixels noirs représentent les pixels en dehors de cet intervalle. Ainsi, après le filtrage et le seuillage, l'image numérique est transformée en une image binaire de type 8 bits adaptée pour les codes de calculs EF. Un exemple d'une microstructure de biocomposite obtenue après le traitement est présentée sur la figure VI.8. Notons que nous avons associé la couleur blanche au GCNA et la couleur noire pour la matrice PP. Il reste fréquemment des petits artefacts sur l'image seuillée, mais ils sont éliminés par l'utilisation de filtres génériques comme l'érosion.

L'ensembles des images obtenues par observations microscopiques ont été segmentées selon la même procédure en changeant parfois la valeur du seuil pour garder la bonne forme des hétérogénéités. La figure VI.8.d présente un exemple d'une image segmentée et son histogramme au niveau de gris. Sur cet histogramme, on remarque que le nombre de couleurs dans l'image se réduit à deux. Ce qui est équivalent au nombre de phases dans le biocomposite.

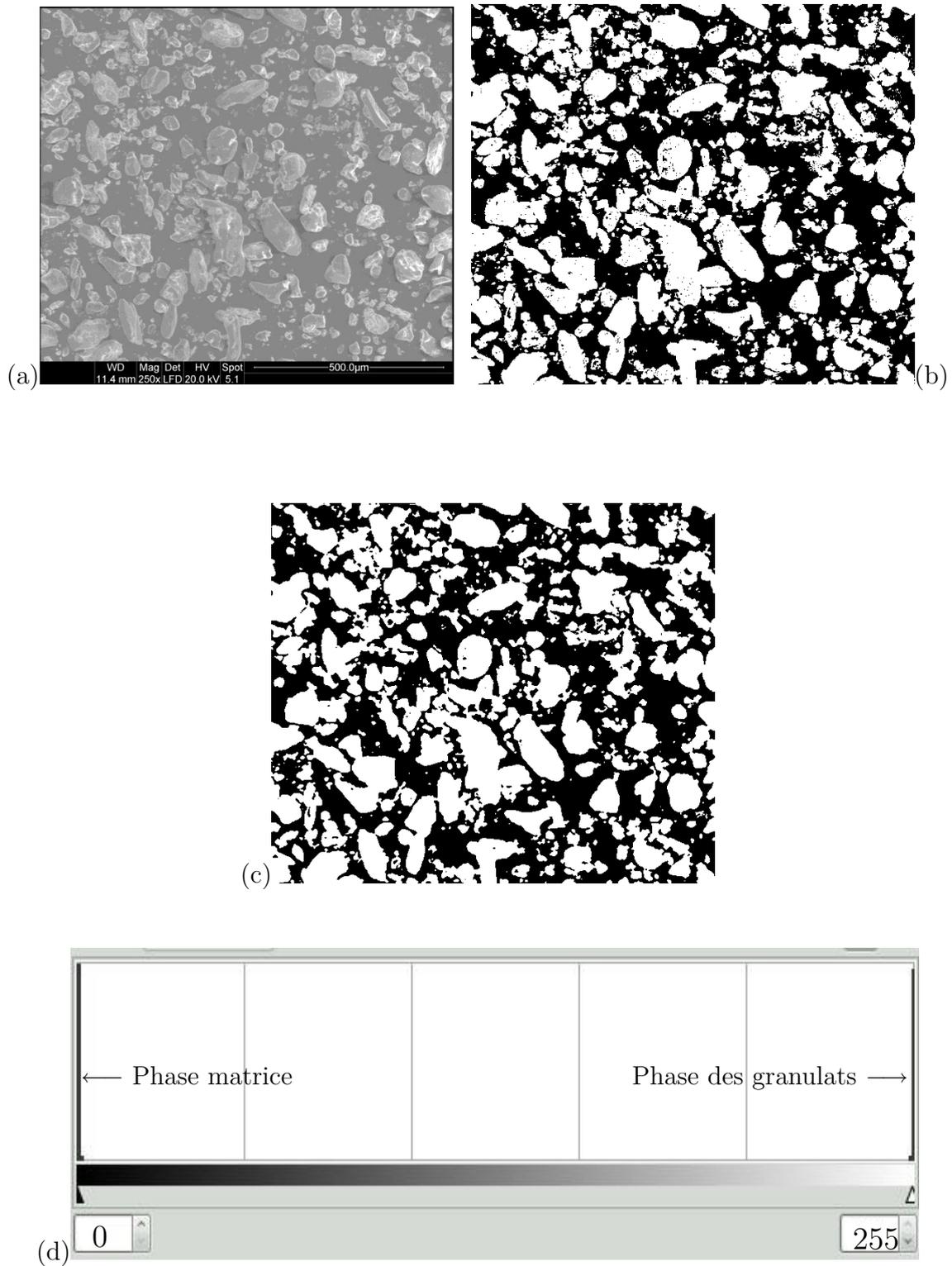


FIGURE VI.8 – (a) Image originale, (b) image seuillée, (c) image binaire après l'application d'une érosion et (d) histogramme au niveau de gris d'une image seuillée.

VI.2.3.3 Préparation de la microstructure 3D

La préparation d'une succession d'images 2D est réalisée par observations microscopiques à différentes épaisseurs. Afin d'obtenir une microstructure 3D adaptées au mailleur et au code de calcul, nous avons besoin de suivre l'ensemble des étapes suivantes :

- Préparation expérimentale des échantillons pour observations microscopiques ;
- Numérisation d'une succession d'images ;
- Application des filtres anti-parasites ;
- Seuillage et segmentation des images ;
- Application des filtres génériques, érosions ;
- Reconstruction 3D de la microstructure.

La figure VI.9 regroupe l'ensemble des étapes pour la caractérisation, la numérisation, le seuillage, l'assemblage et finalement la visualisation d'une image 16 bits. Il faut noter ici que l'étape la plus sensible est celle de seuillage. Le choix d'un mauvais seuil génère une image binaire très différente en observation par rapport aux images réelles.

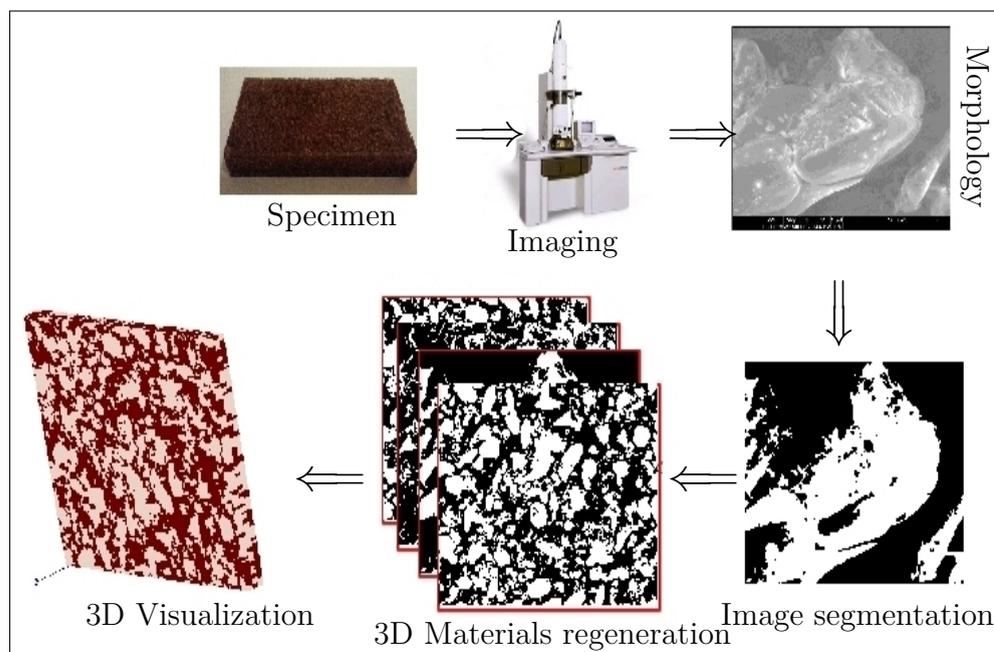


FIGURE VI.9 – Processus global de construction 3D d'un biocomposite : de l'échantillon à la visualisation 3D.

Après avoir élaboré, observé et caractérisé la microstructure du biocomposite en utilisant les outils de traitement d'images, l'objectif est de pouvoir simuler numériquement cette microstructure.

On s'intéresse plus particulièrement à l'analyse multi-échelle du comportement élastique macroscopique, par la connaissance des comportements mécaniques des deux phases. Cette analyse multi-échelle est basée sur une modélisation analytique, numérique et statistique. L'ensemble des résultats sont comparés avec ceux obtenus par l'approche expérimentale.

VI.3 Homogénéisation numérique

Après avoir généré une microstructure réelle 3D à partir des images 2D, les propriétés élastiques effectives sont déterminées en utilisant l'homogénéisation numérique.

VI.3.1 Maillage éléments finis

Le maillage EF associé aux images 3D du biocomposite est obtenu en utilisant la méthode des éléments multiphasés. Une grille d'éléments finis, présentée sur la figure VI.10.a, est superposée sur une image 3D du biocomposite, afin d'avoir une microstructure maillée par des éléments quadratiques (figure VI.10.c). L'ensemble des éléments sont de type quadratiques avec 20 noeuds et 27 points de Gauss.

Dans cette méthode, une image de la microstructure est utilisée pour attribuer les propriétés élastiques de chaque phase (PP ou GCNA) aux couleurs. Dans cette étude, on considère une grille EF contenant 40 000 EF. Le maillage final sera utilisé afin d'estimer les propriétés élastiques effectives.

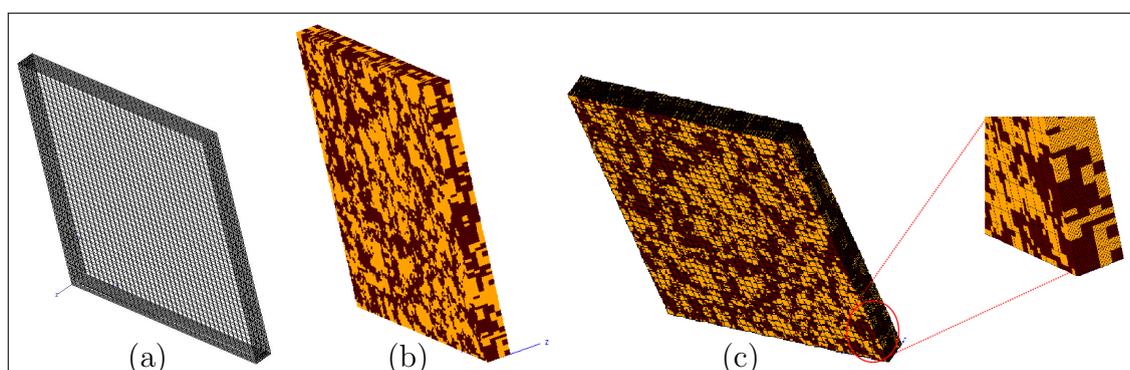


FIGURE VI.10 – Maillage de biocomposite : (a) Grille 3D, (b) image 3D et (c) maillage final.

VI.3.2 Estimation des propriétés effectives

L'objectif de l'homogénéisation numérique est d'estimer les propriétés effectives sur des volumes représentatifs. Dans notre cas, les propriétés effectives sont calculées sur des volumes assez larges, avec un grand nombre d'éléments finis, pour assurer la représentativité de la microstructure.

Dans un premier temps, nous commençons par la comparaison des résultats des approches analytiques aux données expérimentales, et aux résultats de la simulation numérique. Les bornes de HS, proposées par Hashin and Shtrikman (1963), et les bornes absolues de Voigt-Reuss, sont utilisées pour l'encadrement des propriétés effectives. Il faut noter que les bornes de HS pour le module de Young $E^{HS\pm}$ sont calculées à partir de la relation suivante (Kanit et al. (2006)) :

$$E^{HS\pm} = \frac{9k^{HS\pm}\mu^{HS\pm}}{3k^{HS\pm} + \mu^{HS\pm}} \quad (\text{VI.2})$$

Avec $k^{HS\pm}$ et $\mu^{HS\pm}$ sont respectivement les bornes de HS du coefficient de compression k et de cisaillement μ , données dans l'annexe.

Pour la simulation numérique, le chargement mécanique est appliqué sur une facette de la microstructure et son opposée est fixée. Par exemple, les conditions aux limites utilisées pour avoir un chargement simple suivant une seule direction, sont décrites comme suit :

$$\begin{cases} \bar{u}\{face(x = 0, y, z) = 0\} & \bar{u}\{face(x = L, y, z) = d\} \\ \bar{v}\{face(x = 0, y, z) = 0\} & \bar{w}\{face(x = 0, y, z) = 0\} \end{cases} \quad (\text{VI.3})$$

Avec \bar{u}, \bar{v} et \bar{w} sont les déplacements appliqués dans les directions x, y et z . L est la longueur de la microstructure et d représente le déplacement imposé suivant x .

Un essai de traction, en utilisant ces conditions aux limites, est appliqué sur les images réelles du biocomposite. Finalement, le module de Young macroscopique homogénéisé est déterminé sur les microstructures déformées. L'ensemble des résultats numériques pour les différentes fractions volumiques p de GCNA sont présentés sur la figure VI.11. Ces résultats sont comparés avec ceux des approches analytiques et les données expérimentales. Comme prévu, les résultats numériques sont entre les bornes de HS et se rapprochent aux données expérimentales pour les faibles fractions volumiques. On remarque que le module de Young homogénéisé augmente avec l'augmentation de la proportion de GCNA. La figure VI.12 illustre un exemple d'une microstructure de PP/GCNA, déformée sous l'effet d'une traction. Sur cette figure, on remarque que la distribution locale du module de Young n'est pas uniforme dans la microstructure après le chargement.

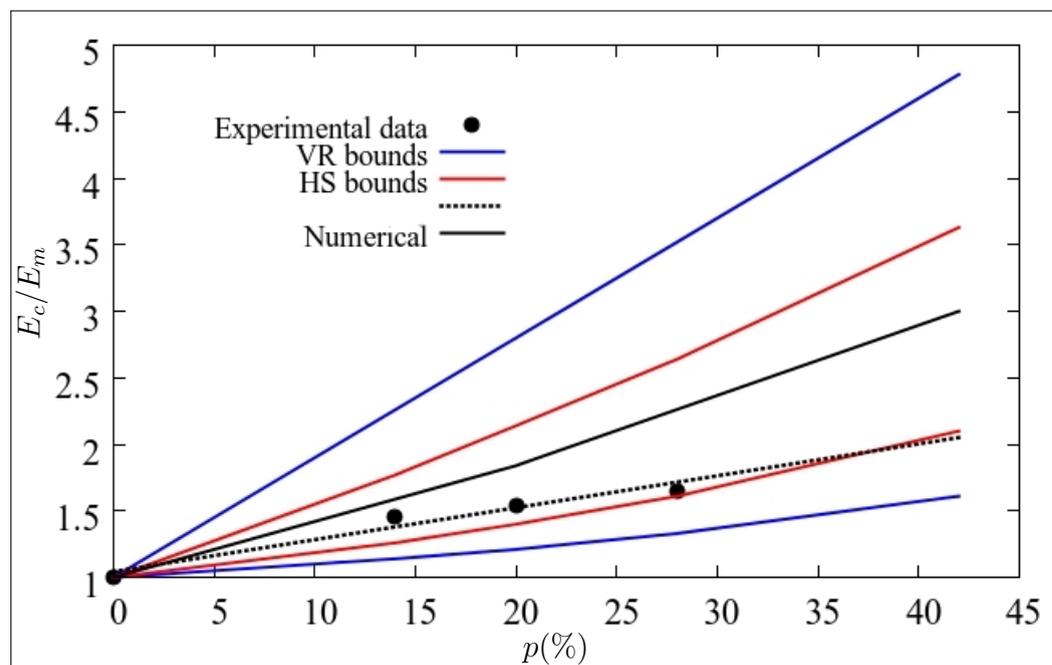


FIGURE VI.11 – Variation du module de Young en fonction de la fraction volumique.

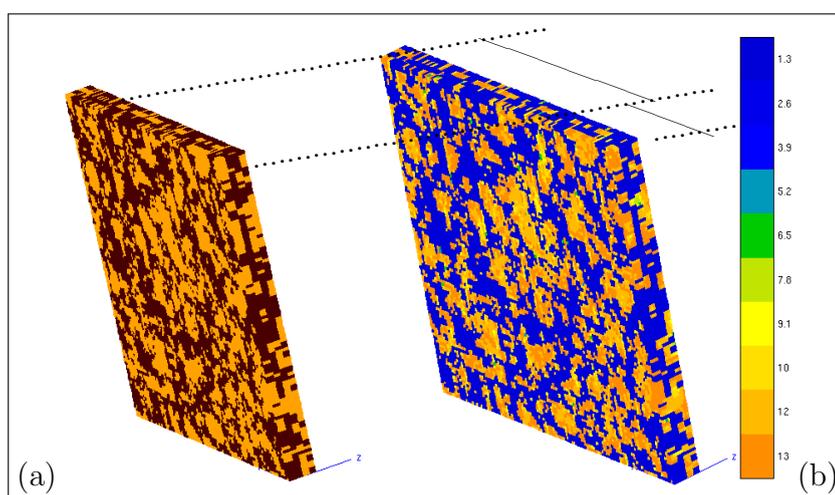


FIGURE VI.12 – (a) Microstructure initiale et (b) microstructure déformée et distribution du module de Young après la traction en GPa.

Dans le cas des grandes fractions volumiques, on remarque une divergence entre les résultats expérimentaux et les bornes de HS. Cette divergence vient probablement de la taille des éprouvettes qui n'est pas représentative aux grandes fractions volumiques.

Dans la suite de notre investigation, nous nous intéressons à l'étude de l'anisotropie et de la représentativité des échantillons expérimentaux. La divergence est observée dans le cas des proportions supérieures à 30%. C'est donc au voisinage

du point de divergence qu'on détermine le tenseur élastique macroscopique et les paramètres de l'anisotropie pour quantifier la représentativité de la taille des microstructures.

VI.3.3 Calcul du tenseur des propriétés élastiques

La représentativité des microstructures utilisée pour la caractérisation du biocomposite est discutée dans cette partie, en introduisant le tenseur macroscopique des propriétés élastiques.

Le système matriciel C_{ij} , qui relie les déformations macroscopiques et les contraintes macroscopiques dans le biocomposite est présenté dans le quatrième chapitre par l'équation V.1.

Pour quantifier, plus précisément, l'anisotropie des microstructures de biocomposite, les paramètres suivants sont introduits :

$$a = \frac{2Y_{44}}{Y_{11} - Y_{12}}, \quad Y_{44} = \frac{C_{44} + C_{55} + C_{66}}{3}, \quad Y_{11} = \frac{C_{11} + C_{22} + C_{33}}{3} \quad (\text{VI.4})$$

$$Y_{12} = \frac{C_{12} + C_{23} + C_{31}}{3}, \quad a_{xy} = \frac{2C_{44}}{C_{11}^{xy} - C_{12}}, \quad C_{11}^{xy} = \frac{C_{11} + C_{22}}{2} \quad (\text{VI.5})$$

Le coefficient a est égal à 1 si le comportement élastique est isotrope. Le coefficient a_{xy} est un indicateur de l'anisotropie dans le plan xy . Les valeurs des coefficients C_{ij} du tenseur élastique du biocomposite sont présentées. On obtient finalement le tenseur de PP/GCNA comme suit :

$$C^{app} = \begin{pmatrix} 5 & 1,6 & 0,18 & 0 & 0 & 0 \\ & 5,08 & 0,12 & 0 & 0 & 0 \\ & & 0,28 & 0 & 0 & 0 \\ & & & 1,65 & 0 & 0 \\ & & & & 1,49.10^{-1} & 0 \\ & & & & & 1,35.10^{-1} \end{pmatrix} (GPa) \quad (\text{VI.6})$$

En utilisant les valeurs du tenseur élastique, les indices de l'anisotropie de la microstructure 3D de PP/GCNA, sont ensuite calculés. On obtient : $a = 0.45$ et $a_{xy} = 0.97$. Ces résultats montrent que le paramètre de l'anisotropie dans le plan xy (a_{xy}) est plus proche de 1. Pour cette raison, les éprouvettes du biocomposite

PP/GCNA sont isotropes et représentatives dans le plan xy . Il s'avère que la différence est générée par la troisième direction z . En effet, la taille du biocomposite selon cette direction n'est pas suffisante pour avoir la représentativité des propriétés effectives, surtout pour les grandes fractions volumiques.

Dans ce qui suit, nous nous intéressons à l'évaluation de la taille minimale des éprouvettes et à la représentativité des résultats numériques et expérimentaux. Celle-ci est possible par l'utilisation du VER statistique et la notion de la covariance. Cette méthode nous a permis de calculer la taille minimale du VER d'une microstructure hétérogène, en tenant compte de toutes les propriétés morphologiques et mécaniques.

VI.4 Caractérisation par mesure morphologique et statistique

Dans le cas des grandes fractions volumiques, une divergence significative a été observée entre les différentes approches d'analyse multi-échelle (figure VI.11). L'étude du tenseur macroscopique des propriétés élastiques montre que cette différence est liée généralement à la taille des éprouvettes expérimentales dans la direction de z . Nous allons présenter, par la suite, une méthodologie basée sur l'étude statistique de la microstructure de PP/GCNA en utilisant la covariance, la variance et la portée intégrale (notions déjà définies dans le chapitre III).

VI.4.1 Covariance et l'anisotropie

Les définitions et les méthodes de calcul de la covariance d'une microstructure ont été présentées dans le chapitre III. La même méthodologie est utilisée pour la microstructure de PP/GCNA. Le graphe de covariance obtenu pour le biocomposite sera comparé avec d'autres covariogrammes calculés sur des images réelles. L'objectif est de déterminer quelques paramètres morphologiques caractérisant notre biocomposite.

La figure VI.13.a montre la covariance d'une microstructure de PP/GCNA de grande fraction volumique. Comparant notre covariogramme avec ceux présentés dans la littérature, figure VI.14, on peut déduire la fraction volumique réelle, le diamètre des particules et l'anisotropie de la microstructure. Concernant l'anisotropie, on remarque que la microstructure est isotrope dans le plan xy comme démontré dans la précédente section, en calculant le tenseur élastique. Sur le diagramme, on déduit aussi le diamètre de granulat qui est égal à $12 px \simeq 3mm$.

L'asymptote théorique correspond au carré de la fraction volumique, p^2 . La valeur

de la distance $L = 50 \text{ px}$ est la longueur caractéristique, ou la portée géométrique. Dans le cas du biocomposite PP/GCNA, on a : $L_x = L_y$, qui affirme aussi que la microstructure est isotrope dans le plan xy .

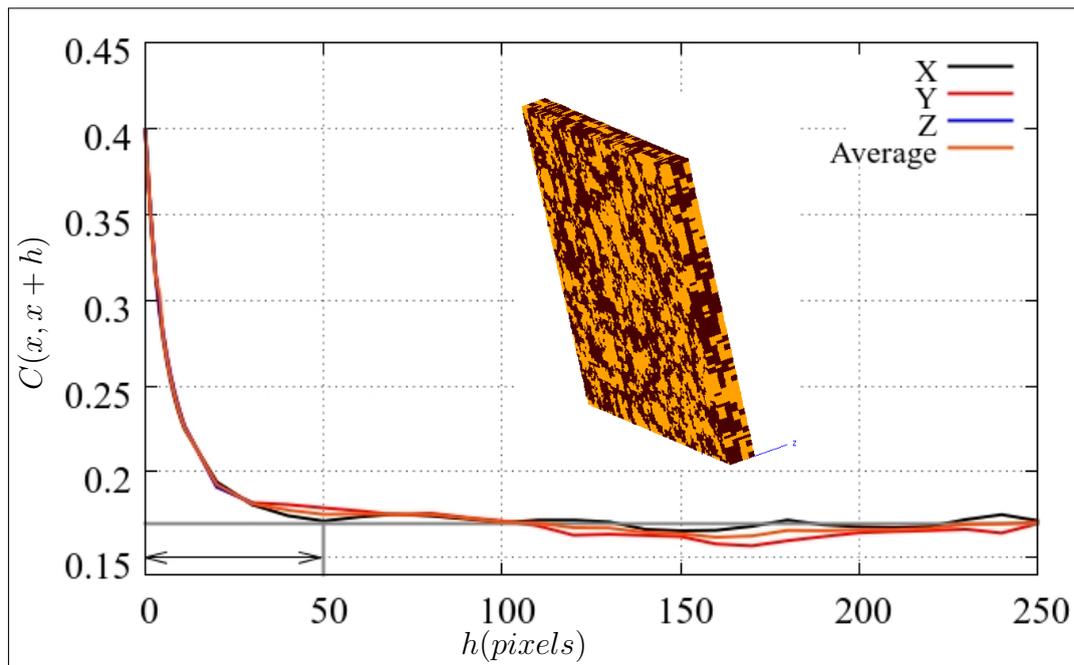


FIGURE VI.13 – Covariogramme du biocomposite PP/GCNA pour $p = 0.42$.

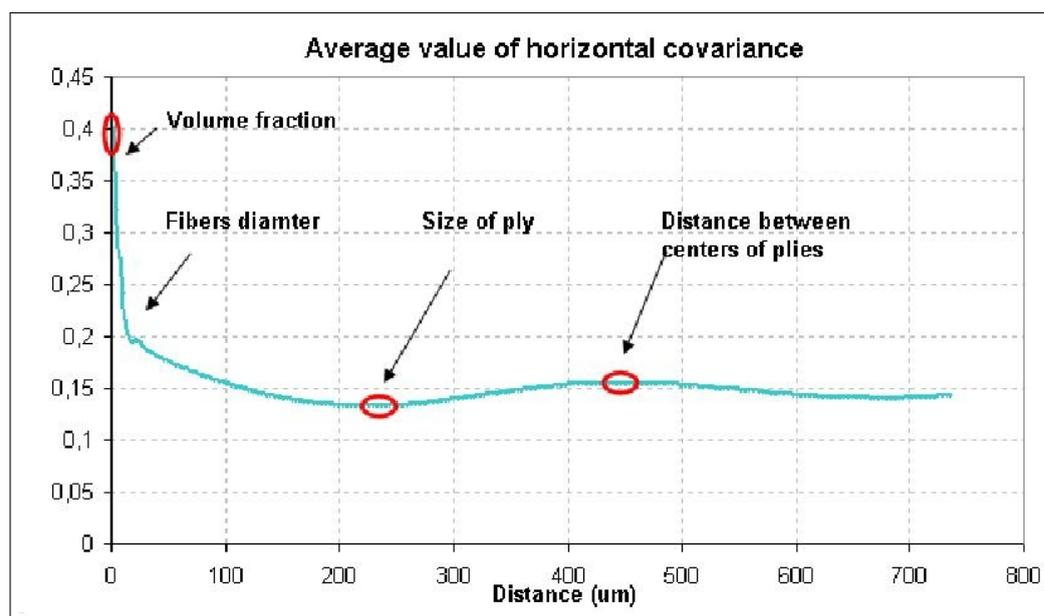


FIGURE VI.14 – Covariogramme de polyamide/fibre courte, Oumarou et al. (2012).

VI.4.2 Représentativité de la taille des échantillons

L'ensemble des différents résultats obtenus par l'expérience, ou avec les calculs numériques, suggèrent que la taille de volume de biocomposite peut ne pas être représentative, surtout pour les grandes fractions volumiques, où les résultats sortent des bornes de HS. Les expérimentateurs justifient ce problème par l'incompatibilité charge-matrice. Puisque aucune image microscopique est large pour représenter la totalité du biocomposite. La seule façon pour quantifier la taille du VER est de travailler par la technique de sous-volumes, en découpant les échantillons. Cette stratégie, utilisée par [Kanit et al. \(2006\)](#) pour les images réelles de la crème glacée, sera appliquée ici pour l'étude des images réelles de PP/GCNA.

Si une propriété élastique Z est obtenue en faisant la moyenne d'un additif scalaire de n réalisations sur un volume V , la variance $D_Z^2(V)$ est donnée en fonction de la taille du volume V et d'autres propriétés de la microstructure comme suit :

$$D_Z^2(V) = p(1 - p)(Z_i - Z_m)^2 \frac{A}{V} \quad (\text{VI.7})$$

Avec Z_m et Z_i sont respectivement les propriétés de la matrice et de la charge et A la portée intégrale. La propriété effective Z est calculée en utilisant les conditions aux limites périodiques. La portée intégrale A est déterminée par le fittage (comme dans le cas des deux précédentes sections) en utilisant la méthode de sous-volumes.

Pour une homogénéisation fiable de biocomposite, n différentes réalisations de volume v_i sont considérées comme présentées sur la figure [VI.15.a](#). Dans toutes les réalisations les propriétés élastiques sont calculées. Finalement, en raison de la petite différence entre les résultats des réalisations, on peut calculer la variance $D_Z^2(V)$ sur chaque sous-volume v_i . Le tableau [VI.1](#) donne la variance obtenue par l'ensemble des réalisations de chaque v_i . Il apparaît que cette variance diminue rapidement puis tend vers zéro dans le cas du VER. Voir aussi un bon exemple dans [Jean \(2009\)](#).

	v_1	v_2	v_3	v_4	V
Sous-volume $v_i(px^3)$	75	300	675	1875	3675
nombre de réalisations n	80	20	8	8	4
Variance numérique $D_k^2(v)$	0.0345	0.024	0.02	0.01	0.009
Variance numérique $D_\mu^2(v)$	0.012	0.009	0.007	0.002	0.001

TABLE VI.1 – Variance des modules élastiques pour les différents sous-volumes.

La méthode de fittage, selon l'équation [VI.7](#), entre la taille du volume V et la variance numérique $D_Z^2(V)$, est utilisée pour identifier la portée intégrale A de PP/GCNA. On obtient finalement $A_k = 0.2$ pour le coefficient de compression k et

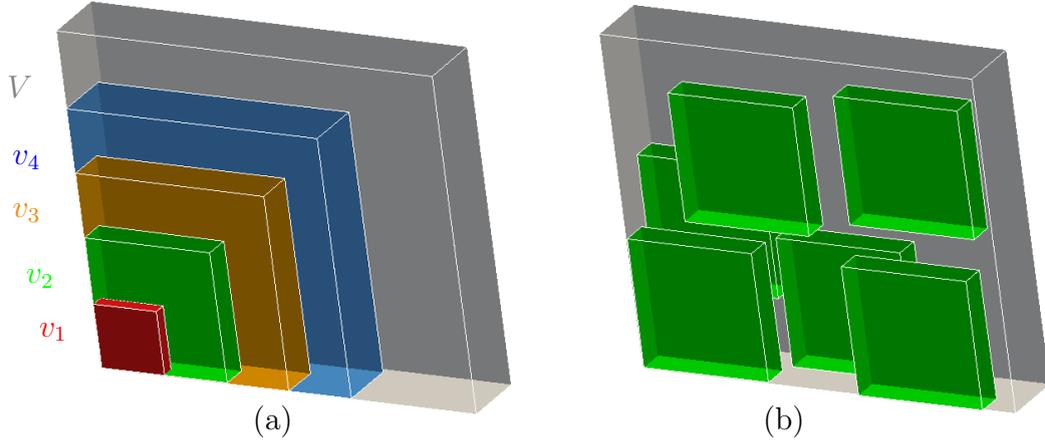


FIGURE VI.15 – Génération des réalisations : (a) les blocs de biocomposite et (b) découpage de l'image de PP/GCNA en n sous-volumes aléatoires.

$A_\mu = 0.22$ pour le coefficient de cisaillement μ . La portée intégrale A devrait être inférieure par rapport au volume de biocomposite V , $A \ll V$.

En effet, la précision des propriétés effectives est donnée en fonction de l'erreur absolue ϵ_{abs} ou relative ϵ_{rel} comme suit :

$$4D_Z^2(V) = \epsilon_{abs}^2 n \quad \text{avec} \quad \epsilon_{rel} = \frac{\epsilon_{abs}}{Z^{eff}} \quad (\text{VI.8})$$

La combinaison des équations VI.7 et VI.8 permet de déduire le nombre minimum de réalisations n pour estimer une propriété effective de PP/GCNA, avec une erreur ϵ_{abs} et de fraction volumique p comme suit :

$$\begin{cases} n(V) = \frac{4}{\epsilon_{abs}^2} p(1-p)(k_i - k_m)^2 \frac{A}{V} \\ n(V) = \frac{4}{\epsilon_{abs}^2} p(1-p)(\mu_i - \mu_m)^2 \frac{A}{V} \end{cases} \quad (\text{VI.9})$$

Nous avons choisi, par exemple, une précision sur les propriétés élastiques autour de $\epsilon_{rel} = 0.1\% = 0.001$, qui est équivalente à une erreur absolue $\epsilon_{abs} = 0.005 \text{ GPa}$. On arrive, finalement, à :

$$\begin{cases} n_k(V) = \frac{498063}{V} & \text{Pour le coefficient de compression } k \\ n_\mu(V) = \frac{176739}{V} & \text{Pour le coefficient de cisaillement } \mu \end{cases} \quad (\text{VI.10})$$

Le *VER* statistique est défini par Jean (2009) puis Willot and Jeulin (2009) et El Moumen et al. (2013) comme le volume pour lequel une seule réalisation est suffisante pour déduire un comportement macroscopique. Cela veut dire qu'en

prenant $n = 1$ dans l'équation VI.10, on a $V_k = VER_k = 498063 \text{ px}^3$ et $V_\mu = VER_\mu = 176739 \text{ px}^3$.

Pour des raisons de simplification, nous considérons le VER statistique, $VER \simeq 500000 \text{ px}^3 \simeq 9.5 \text{ cm}^3$, approximativement un cube de longueur de 2.2 cm . Ce VER statistique est le volume minimum pour avoir la représentativité des résultats, est supérieur à celui utilisé par Essabir et al. (2013) pour l'étude expérimentale.

Les échantillons expérimentaux ont un volume $V_1 \simeq 1.6 \text{ cm}^3$, approximativement un cube de longueur de 1.2 cm . Ce qui explique la différence entre les résultats obtenus numériquement et ceux de l'expérimental dans le cas de grandes fractions volumiques.

En utilisant le nouveau VER statistique, $V_2 = 9.5 \text{ cm}^3$, on peut calculer le coefficient de compression k et de cisaillement μ . Finalement, on déduit la valeur du module de Young macroscopique par la relation suivante :

$$E^{estimé} = \frac{9k^{estimé} \mu^{estimé}}{3k^{estimé} + \mu^{estimé}} \quad (\text{VI.11})$$

La figure VI.16 schématise l'ensemble des résultats obtenus pour les différentes approches utilisées. Sur cette figure, on présente les modèles analytiques, les données expérimentales, les calculs numériques et les résultats de l'approche statistique. On voit bien une bonne cohérence entre les calculs numériques et le résultat du VER statistique. Il faut noter que ces deux approches respectent les modèles analytiques quelque soit la fraction volumique de GCNA. À l'opposé des approches expérimentales qui sortent des bornes de HS au delà de 40% de GCNA.

VI.4.3 Variation de la taille du VER en fonction de GCNA

Dans cette partie, nous nous intéressons à l'étude de la variation de la taille du VER de biocomposite en fonction de la fraction volumique de GCNA dans le cas des propriétés élastiques k et μ . En se basant sur le fait que le VER est statistiquement représentatif si le nombre de réalisations $n = 1$ et en considérant l'équation VI.9, on a :

$$\begin{cases} VER_k = \frac{4}{\epsilon_{abs}^2} p(1-p)(k_i - k_m)^2 A_k \\ VER_\mu = \frac{4}{\epsilon_{abs}^2} p(1-p)(\mu_i - \mu_m)^2 A_\mu \end{cases} \quad (\text{VI.12})$$

Faisons une application numérique, nous arrivons à déterminer les variations du VER en fonction de la fraction volumique p pour le biocomposite PP/GCNA. Cette variation est équivalente à la variation de la fonction suivante :

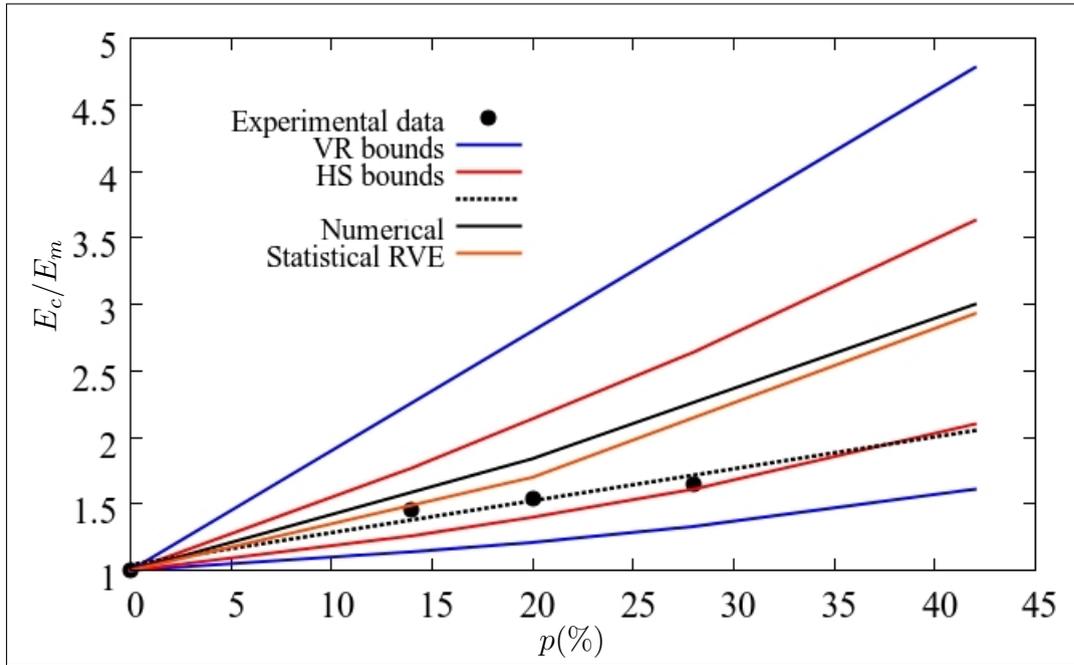


FIGURE VI.16 – Module de Young estimé par les différentes approches en fonction de la fraction volumique de GCNA.

$$VER(p) = \alpha p(1 - p) \quad \text{Avec} \quad \alpha = \frac{4}{\epsilon_{abs}^2} (Z_i - Z_m)^2 A_{k,\mu} \quad (\text{VI.13})$$

La figure VI.17 montre les variations du VER de chaque propriété élastique en fonction de p . À partir des résultats, on remarque que le VER augmente avec l'augmentation de la proportion de GCNA. Cette variation admet un maximum autour d'une distribution aléatoire de 50% de la charge, puis diminue au delà de cette limite.

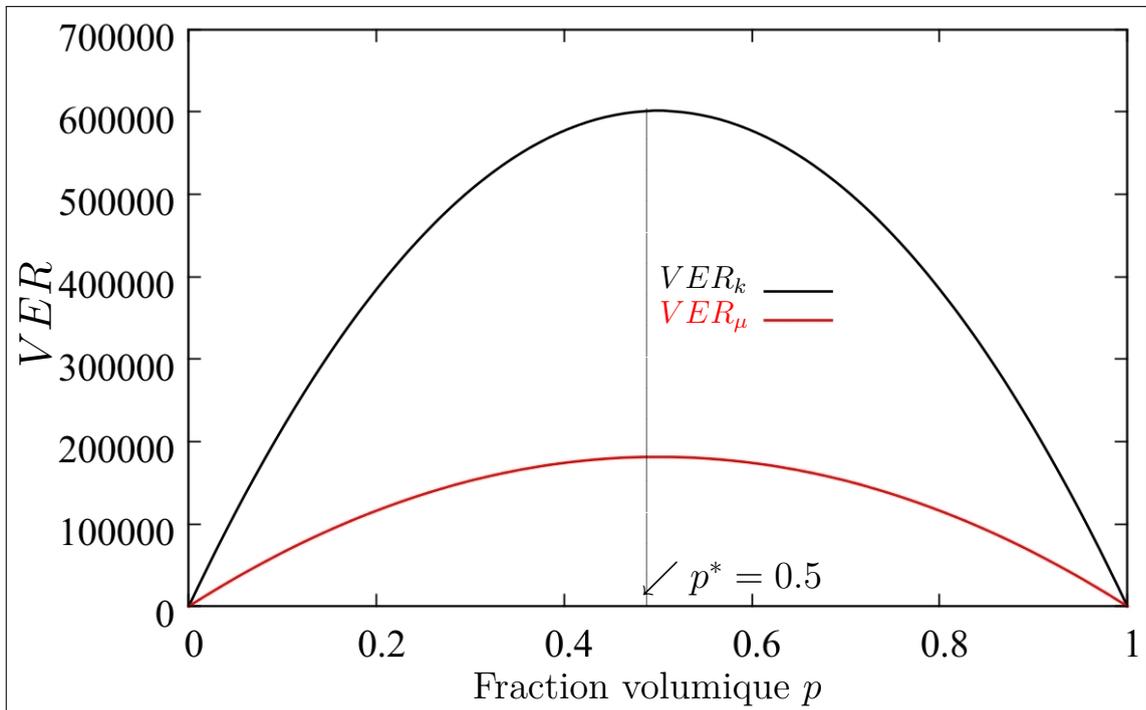


FIGURE VI.17 – Variations du VER en fonction de GCNA.

VI.5 Synthèse

Nous avons présenté dans cette partie, une procédure d'homogénéisation d'un biocomposite renforcé par des charges naturelles. Les techniques d'analyse multi-échelle appliquées sur les microstructures virtuelles ont été étendues pour le cas des microstructures réelles. Nous avons déterminé les propriétés effectives en utilisant les différentes approches analytiques, numériques, expérimentales et statistiques. Nous avons remarqué une surestimation du module de Young vis-à-vis des données expérimentales dans le cas des grandes fractions volumiques de la charge. Cette divergence a été quantifiée par l'utilisation du VER statistique, afin de déterminer la taille minimale des échantillons. On a déterminé aussi la variation de la taille du VER en fonction de la fraction volumique. Cette investigation a montré que la taille de l'échantillon expérimentale n'est pas toujours représentative de la microstructure du biocomposite selon la fraction volumique du GCNA. Il apparaît qu'une distribution aléatoire de 50% de GCNA est la microstructure réelle qui nécessite un large VER .

Conclusions générales

Cette thèse a pour objectif l'étude des comportements macroscopiques des microstructures hétérogènes virtuelles et réelles. Les microstructures réelles sont obtenues par les observations microscopiques et les microstructures virtuelles sont à base des modèles aléatoires de la morphologie mathématique, en utilisant l'algorithme de Poisson.

La détermination des propriétés élastiques et thermiques de matériaux hétérogènes (composite, biocomposite et milieu poreux) nécessite la prise en compte de la microstructure à l'échelle microscopique en utilisant la technique d'homogénéisation numérique. Trois configurations de matériaux ont été exploitées à savoir : un composite, un milieu poreux et un biocomposite.

Cette étude a mis en évidence l'intérêt d'une détermination rigoureuse de la taille optimale du volume élémentaire représentatif (VER) d'une microstructure. En effet, celle-ci doit prendre en compte plusieurs paramètres à savoir : la fraction volumique, le contraste, le type de la propriété et la morphologie de l'hétérogénéité.

De ce fait, nous avons déterminé la variation de la taille du volume élémentaire représentatif pour le module de compression, pour le module de cisaillement, pour le module de Young et pour la conductivité thermique. La quantification de cette taille est basée sur l'utilisation des approches numériques et statistiques. L'ensemble des résultats numériques obtenus ont été validés par les approches analytiques et statistiques.

Pour toutes les microstructures, réelles ou virtuelles, considérées dans cette thèse, on a également analysé la variation de la taille du *VER* en fonction de la fraction volumique et du contraste des propriétés. On remarque que pour les microstructures à base de schéma Booléen de sphères, le *VER* maximum est obtenu par une distribution aléatoire de 67% des particules et un contraste élevé. Dans le cas des images réelles (les biocomposites par exemple) le *VER* maximum est obtenu par une distribution aléatoire de 50% de granulats.

Concernant la détermination des propriétés élastiques effectives du biocomposite, nos résultats ont mis en évidence la non représentativité de la taille de l'échantillon

utilisé pour les essais de traction (résultats expérimentaux). Ce qui démontre bien l'intérêt primordial de la détermination de la taille du VER capable de mieux représenter la microstructure étudiée.

Ce travail a permis aussi de développer une nouvelle notion morphologique pour l'étude des microstructures hétérogènes. Il s'agit du "concept de la morphologie équivalente". En effet, nous pouvons affirmer que dans le cas des propriétés élastiques et thermiques, il est possible de substituer une microstructure à base de schéma Booléen des sphères interconnectées par une microstructure à base de schéma de sphères dure non interconnectées. Ces deux microstructures conduisent aux mêmes propriétés effectives mais avec deux *VER* différents. Il est à noter que ce nouveau concept présente un intérêt majeur pour l'étude des propriétés élastiques dans le cas des matériaux hétérogènes avec des morphologies complexes.

Par ailleurs, cette démarche d'homogénéisation numérique a permis la résolution de problèmes physiques intégrant la morphologie réelle de la microstructure. En effet, une application originale a été exploitée. Il s'agit d'un biocomposite PP/GCNA à différentes fractions volumiques. La présente étude a permis d'établir une démarche globale de design microstructurale intégrant les images réelles des matériaux.

Perspectives

Durant ce travail, on a étudié le comportement élastique de biocomposite de PP chargé de granulats de la coque de noix d'arganier. On a aussi étudié la morphologie 3D de biocomposite par l'assemblage des images 2D obtenues par les observations microscopiques.

On peut envisager, comme perspective, d'étudier le comportement de biocomposite à partir des images directes 3D obtenues par la tomographie. Pour cela, dans une première étape, une microstructure 3D a été générée puis considérée dans l'étude des propriétés effectives. La figure [VI.18](#) présente la démarche suivie lors de cette caractérisation.

On peut également envisager une étude du comportement non-linéaire de biocomposite. Le comportement de la matrice PP est connu. Par contre, celui de la coque seule pourra être déduit par la micro-indentation. Les calculs du comportement plastique seront faits sur des images 3D réelles. La morphologie 3D réelle est obtenue directement puis traitée pour la visualisation et pour une homogénéisation plastique.

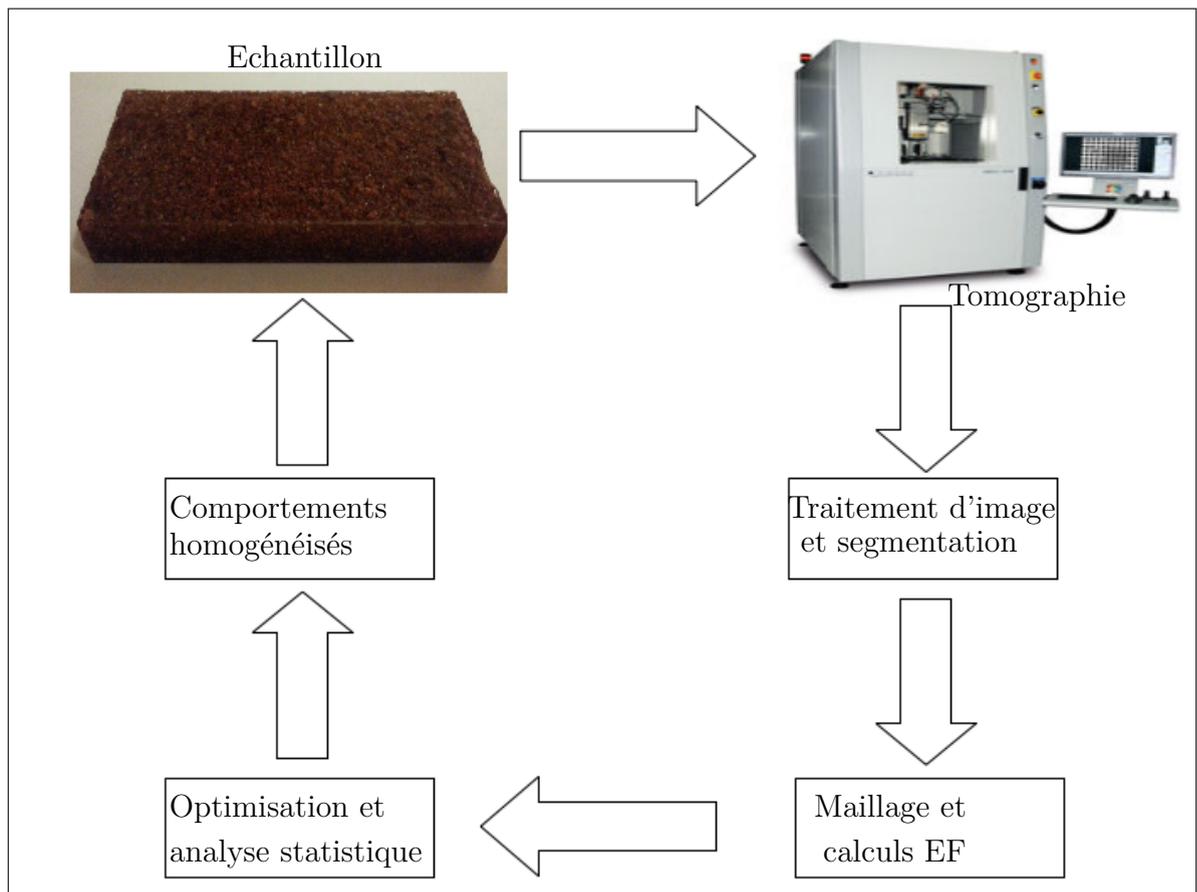


FIGURE VI.18 – Processus global de caractérisation du biocomposite par la tomographie.

Annexe A

Expressions analytiques des approches d'homogénéisation en élasticité linéaire

A.1 Bornes analytiques

A.1.1 Bornes d'ordre 0

Les bornes d'ordre 0 basées sur le fait que, si on effectue un mélange entre deux matériaux de propriétés Z_1 ($Z_1 = k_1, \mu_1, E_1, \nu_1, \lambda_1 \dots$) et Z_2 ($Z_2 = k_2, \mu_2, E_2, \nu_2, \lambda_2 \dots$), la propriété résultante Z du mélange est donnée par :

$$\min(Z_1, Z_2) \preceq Z \preceq \max(Z_1, Z_2) \quad (\text{A.1})$$

A.1.2 Bornes d'ordre 1

Ces bornes sont associées à des lois de mélanges. Elles ne supposent aucune information concernant la microstructure. Elles nécessitent juste la connaissance de la fraction volumique de chacun des constituants.

La borne de **Voigt (1889)** correspond au modèle en parallèle pour lequel les déformations sont uniformes dans le matériau. Il en résulte d'après (I.5) $A(\underline{x}) = I$ pour tout x dans V et, en reportant dans (I.11), le tenseur des modules effectifs sera approché par l'équation :

$$C^{hom} = \langle c(\underline{x}) \rangle \quad (\text{A.2})$$

La borne de **Reuss (1929)** correspond au modèle en série pour lequel les

contraintes sont uniformes dans le matériau. Cette approximation entraîne $B(\underline{x}) = I$ pour tout x dans V et, en reportant dans (I.10), le tenseur de souplesse sera approché par l'équation :

$$S^{hom} = \langle s(\underline{x}) \rangle \quad (\text{A.3})$$

Les expressions pour les coefficients de compression k et de cisaillement μ sont donc :

$$\left\{ \begin{array}{l} k^{Voigt} = pk_i + (1-p)k_m \\ \mu^{Voigt} = p\mu_i + (1-p)\mu_m \end{array} \right. \quad (\text{A.4})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} k^{Reuss} = \frac{k_i k_m}{(1-p)k_i + pk_m} \\ \mu^{Reuss} = \frac{\mu_i \mu_m}{(1-p)\mu_i + p\mu_m} \end{array} \right. \quad (\text{A.5})$$

A.1.3 Bornes d'ordre 2

Sans faire d'hypothèse sur la géométrie des matériaux, les bornes de HS donnent des résultats plus resserrés que ceux obtenus par VR. Dans le cas où la répartition des phases est supposée isotrope, les bornes de HS pour les coefficients de compression k et de cisaillement μ sont exprimées par :

$$\left\{ \begin{array}{l} k^{HS^-} = k_m + \frac{p}{1/(k_i - k_m) + 3(1-p)/(3k_m + 4\mu_m)} \\ k^{HS^+} = k_i + \frac{1-p}{1/(k_m - k_i) + 3p/(3k_i + 4\mu_i)} \end{array} \right. \quad (\text{A.6})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \mu^{HS^-} = \mu_m + \frac{p}{1/(\mu_i - \mu_m) + 6(1-p)(k_m + 2\mu_m)/5\mu_m(3k_m + 4\mu_m)} \\ \mu^{HS^+} = \mu_i + \frac{1-p}{1/(\mu_m - \mu_i) + 6p(k_i + 2\mu_i)/5\mu_i(3k_i + 4\mu_i)} \end{array} \right. \quad (\text{A.7})$$

Avec $^+$ et $^-$ qui désignent les bornes respectivement supérieures et inférieures.

A.1.4 Bornes d'ordre 3

Il existe également des bornes du troisième ordre qui nécessitent plus d'informations concernant la microstructure, telle que la forme et la distribution des inclusions. Ces bornes s'adaptent pour des microstructures aléatoires et isotropes. Les expressions analytiques de ces bornes sont décrites dans [Jeulin and Ostoja-Starzewski \(2001\)](#), [Torquato \(1991\)](#), [Torquato \(2002\)](#) et dans [Frank Xu \(2011\)](#).

A.2 Modèles analytiques

A.2.1 Modèle de Mori-Tanaka

L'estimation de [Mori and Tanaka \(1973\)](#) porte sur les modules de cisaillement μ et de compression k , dans le cas des inclusions dispersées de façon isotrope dans une matrice. Ils ont considéré que la moyenne de la déformation dans les hétérogénéités peut être approchée par celle d'une hétérogénéité de même forme et de mêmes caractéristiques. Les expressions sont données par l'équation (A.8) suivante :

$$\begin{cases} k^{MT} = k_m \left(1 + \frac{p(k_i - k_m)}{k_m + \alpha(1-p)(k_i - k_m)} \right) \\ \mu^{MT} = \mu_m \left(1 + \frac{p(\mu_i - \mu_m)}{\mu_m + \beta(1-p)(\mu_i - \mu_m)} \right) \\ \alpha = \frac{3k_m}{3k_m + 4\mu_m} \quad \beta = \frac{6(k_m + 2\mu_m)}{5(3k_m + 4\mu_m)} \end{cases} \quad (\text{A.8})$$

Dans le cas des matériaux infiniment rigides, les estimations de MT coïncident avec les bornes de HS^-

A.2.2 Modèle de schéma de distribution diluée

Le modèle de schéma de distribution diluée considère que chaque inclusion est considérée comme noyée dans un milieu infini ayant les propriétés de la matrice. La solution diluée est donc valable s'il n'y a aucune interaction entre les inclusions (elle s'applique seulement aux matériaux contenant une fraction volumique très faible, i.e pour des inclusions suffisamment éloignées les unes des autres).

$$\begin{cases} k^{SD} = k_m \left(1 + \frac{p(k_i - k_m)}{k_m + \alpha(k_i - k_m)} \right) \\ \mu^{SD} = \mu_m \left(1 + \frac{p(\mu_i - \mu_m)}{\mu_m + \beta(\mu_i - \mu_m)} \right) \\ \alpha = \frac{3k_m}{3k_m + 4\mu_m} \quad \beta = \frac{6(k_m + 2\mu_m)}{5(3k_m + 4\mu_m)} \end{cases} \quad (\text{A.9})$$

A.2.3 Modèle auto-cohérent

Le modèle auto-cohérent (SC) suppose que le milieu entourant chaque inclusion est un milieu infini possédant les caractéristiques du matériau homogénéisé. Les travaux de recherche qui donnent l'expression de ce modèle pour 2-phases ou n -phases sont [Hervé and Zaoui \(1993\)](#) et [Zaoui \(1999\)](#).

Dans la situation où les inclusions sont sphériques et isotropes, les estimations des propriétés par SC sont solutions du système non linéaire suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} (1-p) \frac{k_m - k^{SC}}{1 + \alpha_{SC}(k_m - k^{SC})/k^{SC}} + p \frac{k_i - k^{SC}}{1 + \alpha_{SC}(k_i - k^{SC})/k^{SC}} = 0 \\ (1-p) \frac{\mu_m - \mu^{SC}}{1 + \beta_{SC}(\mu_m - \mu^{SC})/\mu^{SC}} + p \frac{\mu_i - \mu^{SC}}{1 + \beta_{SC}(\mu_i - \mu^{SC})/\mu^{SC}} = 0 \\ \alpha_{SC} = \frac{3k^{SC}}{3k^{SC} + 4\mu^{SC}} \qquad \qquad \qquad \beta_{SC} = \frac{6(k^{SC} + 2\mu^{SC})}{5(3k^{SC} + 4\mu^{SC})} \end{array} \right. \quad (A.10)$$

Il existe aussi dans [Aboudi \(1991\)](#) une autre forme d'expression pour le modèle SC sous forme d'un système non linéaire, pour une solution analytique, qui permet d'exprimer les caractéristiques élastiques recherchées.

A.2.4 Modèle Auto-chérent généralisé

Une autre manière d'estimer les coefficients de compression et de cisaillement d'un matériau hétérogène est l'utilisation du modèle proposé par [Christensen and Lo \(1979\)](#), avec des corrections nécessaires dans [Christensen and Lo \(1986\)](#). Ce modèle est connu sous le nom de GSC ou modèle à trois phases.

Le module de compression peut alors être obtenu par l'équation suivante :

$$k^{GSC} = k_m + \frac{p(k_i - k_m)}{1 + (1-p) \frac{k_i - k_m}{k_m + \frac{4}{3}\mu_m}} \quad (A.11)$$

Le module de cisaillement est la solution positive de l'équation suivante :

$$A \left(\frac{\mu^{GCS}}{\mu_m} \right)^2 + B \left(\frac{\mu^{GCS}}{\mu_m} \right) + C = 0 \quad (A.12)$$

Avec

$$\left\{ \begin{array}{l} A = 8(\mu_i/\mu_m - 1)(4 - 5\nu_m)\eta_1 p^{10/3} - 2(63(\mu_i/\mu_m - 1)\eta_2 + 2\eta_1\eta_3)p^{7/3} \\ \qquad \qquad \qquad + 252(\mu_i/\mu_m - 1)\eta_2 p^{5/3} - 50(\mu_i/\mu_m - 1)(7 - 12\nu_m + 8\nu_m^2)\eta_2 p \\ \qquad + 4(7 - 10\nu_m)\eta_2\eta_3 \\ B = -4(\mu_i/\mu_m - 1)(1 - 5\nu_m)\eta_1 p^{10/3} + 4(63(\mu_i/\mu_m - 1)\eta_2 + 2\eta_1\eta_3)p^{7/3} \\ \qquad \qquad \qquad - 504(\mu_i/\mu_m - 1)\eta_2 p^{5/3} + 150(\mu_i/\mu_m - 1)(3 - \nu_m)\nu_m\eta_2 p \\ \qquad + 3(15\nu_m - 7)\eta_2\eta_3 \\ C = 4(\mu_i/\mu_m - 1)(5\nu_m - 7)\eta_1 p^{10/3} - 2(63(\mu_i/\mu_m - 1)\eta_2 + 2\eta_1\eta_3)p^{7/3} \\ \qquad \qquad \qquad + 252(\mu_i/\mu_m - 1)\eta_2 p^{5/3} + 25(\mu_i/\mu_m - 1)(\nu_m^2 - 7)\eta_2 p \\ \qquad - (7 + 5\nu_m)\eta_2\eta_3 \end{array} \right. \quad (A.13)$$

entre les particules et de prendre des fractions volumiques importantes, en ajoutant un terme quadratique :

$$E^{Guth-Gold} = E_m(1 + 2.5p + 14.1p^2) \quad (\text{A.18})$$

A.2.5.4 Estimation de Budiansky

Pour des particules infiniment rigides baignées dans une matrice incompressible, **Budiansky (1965)** a développé une estimation auto-cohérente du module d'Young sous la forme :

$$E^{Budiansky} = \frac{E_m}{(1 - 2.5p)} \quad (\text{A.19})$$

Annexe B

Expressions analytiques des approches d'homogénéisation pour la conductivité thermique

On rappelle ici que les méthode d'approche et les étapes d'homogénéisation utilisées dans le cas des propriétés mécanique sont valable pour l'homogénéisation de la conductivité thermique. On exprime la conductivité estimée par chaque modèle analytique en fonction de la conductivité et de de la fraction volumique de chacune des deux phases.

On considère une microstructure aléatoire (poreuse ou non) formée de deux phases. La phase des inclusions (1) avec une fraction volumique p et la phase de la matrice (2) avec une fraction volumique $1 - p$ ont respectivement une conductivité thermique réelle λ_1 et λ_2 . Les différents modèles et les bornes analytiques utilisés pour l'estimation de la conductivité, ainsi leurs dimenstrations sont donnée dans l'ouvrage de [Buryachenko \(2006\)](#) et représentés par les équations suivantes :

B.1 Bornes de la conductivité thermique

B.1.1 Bornes d'ordre 1

Ces bornes sont l'équivalence des bornes de Voigt-Reuss en élasticité liniéaire. Elles ont été devoloppées par [Wiener \(1912\)](#).

- **Modèle en série :**

$$\lambda = \frac{\lambda_1 \lambda_2}{(1 - p)\lambda_1 + p\lambda_2}$$

- **Modèle parallèle :**

$$\lambda = p\lambda_1 + (1 - p)\lambda_2$$

B.1.2 Bornes d'ordre 2

Comme le cas de l'élasticité des microstructures aléatoires, [Hashin and Shtrikman \(1962\)](#) ont développé deux bornes pour l'estimation de la conductivité thermique qui prennent leur nom HS-bounds. Ces bornes de la conductivité sont données sous la forme suivante :

- **Bornes de Hashin-Shtrikman :**

$$\lambda^{HS+} = \lambda_2 + \frac{p}{1/(\lambda_1 - \lambda_2) + (1 - p)/3\lambda_2}$$

$$\lambda^{HS-} = \lambda_1 + \frac{1 - p}{1/(\lambda_2 - \lambda_1) + p/3\lambda_1}$$

B.1.3 Bornes d'ordre 3

Ces bornes analytiques sont les approches les plus sophistiquées pour les estimations thermiques, électriques et élastiques. Ils dépendent des propriétés des deux phases, la fraction volumique et la forme des particules et la fonction morphologique ζ_1 calculée par [Jeulin \(2001\)](#). Nous utiliserons dans notre étude les expressions et la notation de [Milton \(1982\)](#) et [Berryman and Milton \(1988\)](#). Elles sont exprimées dans R^d ($d = 2, 3$) en fonction de λ_1 and λ_2 sous la forme :

$$\frac{\lambda^-}{\lambda_1} = \frac{1 + ((d - 1)(1 + q) + \zeta_1 - 1)\beta_{21} + (d - 1)((d - 1)q + \zeta_1 - 1)\beta_{21}^2}{1 - (q + 1 - \zeta_1 - (d - 1))\beta_{21} + ((q - (d - 1)p)(1 - \zeta_1) - (d - 1)q)\beta_{21}^2}$$

$$\frac{\lambda^+}{\lambda_2} = \frac{1 + ((d - 1)(\zeta_1 + p) - 1)\beta_{12} + (d - 1)((d - 1)p - q)\zeta_1 - p)\beta_{12}^2}{1 - (p + 1 - \zeta_1(d - 1))\beta_{12} + (p - (d - 1))\zeta_1)\beta_{12}^2}$$

$$\beta_{ij} = \frac{\lambda_i - \lambda_j}{\lambda_i + (d - 1)\lambda_j}$$

B.2 Modèles de la conductivité thermique

B.2.1 Modèle auto-chérent

Le modèle auto-cohérent de la conductivité thermique est la solution positive de l'équation proposée par [Bruggeman \(1935\)](#). Ce modèle est connu aussi sous le nom de EMT (Effective Medium Theory, [Landauer \(1952\)](#)) :

$$\frac{\lambda_1 - \lambda^{eff}}{\lambda_1 + 2\lambda^{eff}}(1 - p) + \frac{\lambda_2 - \lambda^{eff}}{\lambda_2 + 2\lambda^{eff}}p = 0$$

On a donc la solution comme suivant :

$$\lambda^{eff} = \frac{1}{4} [(3p - 1)\lambda_1 + \lambda_2(3(1 - p) - 1) + \sqrt{[(3p - 1)\lambda_1 + \lambda_2(3(1 - p) - 1)]^2 + 8\lambda_1\lambda_2}]$$

B.2.2 Les Modèles de Maxwell

Les deux formes de modèle de [Maxwell \(1873\)](#) sont conçues à l'estimation de la conductivité thermique d'un milieu biphasé isotrope. Elles sont sous l'expression suivante :

- Modèle de Maxwell 1

$$\lambda^{eff} = \lambda_2 \frac{2\lambda_2 + \lambda_1 - 2(\lambda_2 - \lambda_1)p}{2\lambda_2 + \lambda_1 + (\lambda_2 - \lambda_1)p}$$

- Modèle de Maxwell 2

$$\lambda^{eff} = \lambda_1 \frac{2\lambda_1 + \lambda_2 - 2(\lambda_1 - \lambda_2)(1 - p)}{2\lambda_1 + \lambda_2 + (\lambda_1 - \lambda_2)(1 - p)}$$

Bibliographie

- Aboudi, J., 1991. A unified micromechanical approach, mechanics of composite materials. Elsevier. [34](#), [177](#)
- Altendorf, H., 2011. 3D morphological analysis and modelling of random fiber networks. Rapport de thèse. [8](#), [42](#)
- Barbe, F., Decker, L., Dominique, J., Cailletaud, G., 2001a. Intergranular and intragranular behavior of polycrystalline aggregates. part 1 : F.E. model. International Journal of Plasticity 17, 513–536. [40](#), [60](#)
- Barbe, F., Forest, S., Cailletaud, G., 2001b. Intergranular and intragranular behavior of polycrystalline aggregates. part 2 : Results. International Journal of Plasticity 17, 513–536. [40](#)
- Behzad, T., Sain, M., 2007. Finite element modeling of polymer curing in natural fiber reinforced composites. Comp. Scien. Tech. 67, 1666–1673. [149](#)
- Berryman, G. J., Milton, G. W., 1988. Microgeometry of random composites and porous media. J. Phys. D : Appl. Phys 21, 87–94. [181](#)
- Bledzki, A. K., Gassan, J., 1999. Composites reinforced with cellulose based fibres. Prog. Polym. Sci 24, 221–274. [148](#)
- Bornert, M., Bretheau, T., Gilormini, P., 2001. Homogénéisation en mécanique des matériaux. Hermès. [28](#), [31](#), [35](#)
- Bruggeman, D. A. G., 1935. Berechnung verschiedener physikalischer konstanten von heterogenen substanzen. i. dielektrizitätskonstanten und leitfähigkeiten der mischkörper aus isotropen substanzen. Annalen der Physik 416, 636–664. [182](#)
- Budiansky, B., 1965. On the elastic moduli of some heterogeneous materials. J. Mech. Phys. Sol. 53, 322. [179](#)

- Buryachenko, V., 2006. Micromechanics of heterogeneous materials. Springer. [34](#), [180](#)
- Cailletaud, G., Jeulin, D., Rolland, P., 1994. Size effect on elastic properties of random composites. Engng. Computat. 11, 99–110. [90](#)
- Ceballos, L., 2011. Caractérisation des propriétés fluidiques des couches de diffusion des piles à combustible PEMFC par une approche numérique de type réseaux de pores et par une analyse d'images issues de la tomographie X. Thèse de doctorat. [133](#)
- Chaboche, J. L., Suquet, P., 1998. Endommagement, interfaces. Ecole d'été méthodes d'homogénéisation en mécanique des Matériaux. La Londe-les-Maures. [28](#)
- Christensen, R. M., Lo, K. H., 1979. Solutions for effective shear properties in three phase sphere and cylinder models. J. Mech. Phys. Solids 27, 315–330. [34](#), [77](#), [177](#)
- Christensen, R. M., Lo, K. H., 1986. Erratum. J. Mech. Phys. Solids 34, 639. [177](#)
- Crespo, J. E., Sanchez, L., Parres, F., Lopez, L., 2007. Mechanical and morphological characterization of PVC plastisol composites with almond husk fillers. Poly. Compos. 28, 71–77. [148](#)
- Ding, Y., 2012. Analyse morphologique de la microstructure 3D de réfractaires électrofondus à très haute teneur en zircone : relations avec les propriétés mécaniques, chimiques et le comportement pendant la transformation quadratique monoclinique. Rapport de thèse. [7](#), [8](#), [23](#), [42](#)
- Dirrenberger, J., 2012. Propriétés effectives de matériaux architecturés. Thèse de doctorat. [7](#), [36](#), [85](#)
- Drugan, W., Willis, J., 1996. A micromechanics-based nonlocal constitutive equation and estimates of the representative volume element size for elastic composites. J. Mech. Phys. Solids 44, 497–524. [33](#)
- Einstein, A., 1906. Eine neue bestimmung der molekul-dimensionen. Ann. Physik. 19, 289–306. [178](#)
- Einstein, A., 1911. Berichtigung zu meiner arbeit : Eine neue bestimmung der molekul-dimensionen. Ann. Physik. 34, 591–592. [178](#)
- EL Houdaigui, F., Forest, S., , Gourgues, A., Jeulin, D., 2007. On the size of the representative volume element for isotropic elastic polycrystalline copper. IUTAM

- Symposium on mechanical behavior and micro-mechanics of nanostructured materials 144, 171–180. [8](#), [45](#), [46](#)
- El Moumen, A., Kanit, T., Imad, A., El Minor, H., 2013. Effect of overlapping inclusions on effective elastic properties of composites. *Mechanics Research Communications*. 53, 24–30. [10](#), [88](#), [166](#)
- Escoda, J., 2012. Modélisation morphologique et micromécanique 3D de matériaux cimentaires. Thèse de doctorat. [7](#), [25](#)
- Essabir, H., Hilali, E., Elgharad, A., EL Minor, H., Imad, A., Elamraoui, A., Al Gaoudi, O., 2013. Mechanical and thermal properties of bio-composites based on polypropylene reinforced with nut-shells of argan particles. *Materials and design* 49, 442–448. [150](#), [167](#)
- Evesque, P., 2000. Fluctuations, correlation and representative elementary volume (REV) in granular materials. *Poudre and grains* 11, 6–17. [33](#)
- Faruk, O., Bledzki, A. K., Fink, H. P., Sain, M., 2012. Biocomposites reinforced with natural fibers : 2000-2010. *Prog. Polym. Sci* 37, 1552–1596. [148](#)
- Forest, S., 2006. Milieux continus généralisé et matériaux hétérogènes. Mines PARIS Les presses. [61](#)
- Frank Xu, X., 2011. On the third order bounds of the effective shear modulus of two phase composites. *Mechanics of materials* 43, 269–275. [175](#)
- Fritzen, F., Forest, S., Böhlke, T., Kondo, D., Kanit, T., 2012. Computational homogenization of elasto-plastic porous metals. *Int. J. Plasticity* 29, 102–119. [85](#)
- Gilormini, P., Bréchet, Y., 1998. Syntheses : Mechanical properties of heterogeneous media : which material for which model? which model for which material? *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* 7, 805–816. [36](#)
- Gitman, I., Askes, H., Sluys, L., 2007. Representative volume : Existence and size determination. *engineering fracture mechanics* 74, 2518–2534. [7](#), [32](#)
- González, C., Segurado, J., Llorca, J., 2004. Numerical simulation of elasto-plastic deformation of composites : evolution of stress microfields and implications for homogenization models. *J. Mech. Phys. Solids* 52, 1573–1593. [7](#), [39](#)
- Grasset-Bourdel, R., Alzina, A., Tessier-Doyen, N., Schmitt, N., Huger, M., Chotard, T., Gruber, D., Harmuth, H., 2011. Optimisation of 3d rve for anisotropy index

- reduction in modelling thermoelastic properties of two-phase composites using a periodic homogenisation method. *Comp. Mater. Science* 50, 3136–3144. [8](#), [46](#)
- Griffiths, D. V., Paiboon, J., Huang, J., Fenton, G. A., 2012. Homogenization of geomaterials containing voids by random fields and finite elements. *Int. J. Solids Str.* 49, 2006–2014. [72](#)
- Guo, Z., Shi, X., Chen, H., Peng, X., Harrison, P., 2014. Mechanical modeling of incompressible particle-reinforced neo-hookean composites based on numerical homogenization. *Mechanics of Materials* 70, 1–17. [7](#), [39](#)
- Guth, E., Gold, O., 1938. On the hydrodynamical theory of the viscosity of suspensions. *Phys. Rev.* 53, 322. [178](#)
- Han, H., Eckschlager, A., Bom, H. J., 2001. The effect of three-dimensional multi-particle arrangements on the mechanical behavior and damage initiation of particle-reinforced MMCs. *Composites science and technology* 61, 1581–1590. [38](#)
- Hashin, Z., Shtrikman, S., 1962. A variational approach to the theory of the effective magnetic permeability of multiphase materials. *J. Applied Physics* 33, 3125–3131. [181](#)
- Hashin, Z., Shtrikman, S., 1963. A variational approach to the theory of the elastic behavior of multiphase materials. *J. Mech. Phys. Solids* 11, 127–140. [34](#), [160](#)
- Hazanov, S., Huet, C., 1994. Order relationships for boundary conditions effect in heterogeneous bodies smaller than the representative volume. *J. Mech. Phys. Solids* 42, 1995–2011. [45](#)
- Hervé, E., Zaoui, A., 1993. N-layered inclusion-based micromechanical modelling. *Int. J. Eng. Sci.* 31, 1–10. [176](#)
- Huet, C., 1990. Application of variational concepts to size effects in elastic heterogeneous bodies. *J. Mech. Phys. Solids* 38, 813–841. [45](#)
- Jean, A., 2009. Etude d'un élastomère chargé, de la nanostructure au macro-comportement. Thèse de doctorat. [1](#), [8](#), [10](#), [41](#), [45](#), [47](#), [51](#), [53](#), [61](#), [71](#), [76](#), [85](#), [86](#), [88](#), [94](#), [111](#), [155](#), [165](#), [166](#)
- Jeulin, D., 2001. Caractérisation Morphologique et modèles de structures Aléatoires, Extrait de : Homogénéisation en mécanique des matériaux (tome1). Hermès, France. [181](#)

- Jeulin, D., 2012. Morphology and effective properties of multi-scale random sets : A review. *C. R. Mecanique* 340, 219–229. [92](#)
- Jeulin, D., Ostoja-Starzewski, M., 2001. *Mechanics of random and multiscale microstructures*. Springer Wien New York. [175](#)
- Kachanov, M., Sevostianov, I., 2005. On quantitative characterization of microstructures and effective properties. *Int. J. Solids Struct.* 42, 309–336. [63](#)
- Kaci, M., Djidjelli, H., Boukerrou, A., Zaidi, L., 2007. Effect of wood filler treatment and ebagma compatibilizer on morphology and mechanical properties of low density polyethylene/olive husk flour composites. *eXPRESS Polymer Letters* 1, 467–473. [148](#)
- Kanit, T., Forest, S., Galliet, I., Mounoury, V., Jeulin, D., 2003. Determination of the size of the representative volume element for random composites : Statistical and numerical approach. *Int. J. Solids Struct.* 40, 3647–3679. [1](#), [7](#), [8](#), [33](#), [40](#), [41](#), [45](#), [51](#), [53](#), [71](#), [88](#), [92](#)
- Kanit, T., N’Guyen, F., Forest, S., Jeulin, D., Reed, M., Singleton, S., 2006. Apparent and effective physical properties of heterogeneous materials : Representativity of samples of two materials from food industry. *Comput. Meth. Appl. Mech. Engng.* 195, 3960–3982. [8](#), [10](#), [41](#), [42](#), [61](#), [87](#), [160](#), [165](#)
- Kari, S., Berger, H., Gabbert, U., 2007a. Numerical evaluation of effective material properties of randomly distributed short cylindrical fibre composites. *Computational Materials Science* 39, 198–204. [38](#), [52](#)
- Kari, S., Berger, H., Gabbert, U., Guinovart-Diaz, R., Bravo-Castillero, J., Rodriguez-Ramos, R., 2008. Evaluation of influence of interphase material parameters on effective material properties of three phase composites. *Composites Science and Technology* 68, 684–691. [38](#)
- Kari, S., Berger, H., Rodriguez-Ramos, R., Gabbert, G., 2007b. Computational evaluation of effective material properties of composites reinforced by randomly distributed spherical particles. *Compos. Struct.* 77, 223–231. [7](#), [8](#), [38](#), [39](#), [52](#)
- Kováčik, J., Simančík, F., 1998. Aluminium foam-modulus of elasticity and electrical conductivity according to percolation theory. *Scripta Mater.* 39, 239–246. [24](#)
- Landauer, R., 1952. The electrical resistance of binary metallic mixtures. *J. Appl. Phys.* 23, 779–784. [182](#)

- Lippmann, N., Steinkopff, T., Schmauder, S., Gumbsch, P., 1997. 3D-finite-element-modelling of microstructures with the method of multiphase elements. *Computational Materials Science* 9, 28–35. [60](#)
- Maire, E., Fazekas, A., Salvo, L., Dendievel, R., Souhail, Y. Cloetens, P., Letang, J., 2003. X-ray tomography applied to the characterization of cellular materials : related finite element modeling problems. *Compos. Sci. Technol* 63, 2431–2443. [149](#)
- Matheron, G., 1975. *Random sets and integral geometry*. J. Wiley, New York. [50](#), [85](#), [89](#)
- Maxwell, J. C., 1873. *A treatise on electricity and magnetism*. Clarendon Press, Oxford, 360–366. [182](#)
- Michel, J. C., Moulinec, H., Suquet, P., 1999. Effective properties of composite materials with periodic microstructure : A computational approach. *Comput. Meth. Appl. Mech. Engng.* 172, 109–143. [44](#)
- Milton, G. W., 1982. Bounds on the elastic and transport properties of two-component composites. *J. Mech. Phys. Solids* 30, 177–191. [181](#)
- Minh, C., Imad, A., Kanit, T., Boussu, F., 2013. Numerical analysis of a ballistic impact on textile fabric. *Int. J. Mech. Scie.* 69, 32–39. [7](#), [40](#), [41](#)
- Minh, C., Kanit, T., Boussu, F., Imad, A., 2011. Numerical multi-scale modeling for textile woven fabric against ballistic impact. *Comput. Mater. Scie.* 50, 2172–2184. [40](#)
- Minshnaevsky Jr, L. L., 2004. Three-dimensional numerical testing of microstructures of particle reinforced composites. *Acta Mater.* 52, 4177–4188. [38](#)
- Mir, S. S., Nafsin, N., Hasan, M., Hasan, N., Hassan, A., 2013. Improvement of physico-mechanical properties of coir-polypropylene biocomposites by fiber chemical treatment. *Materials and design* 52, 251–257. [148](#)
- Mori, T., Tanaka, K., 1973. Average stress in the matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions. *Acta Metallurgica* 21, 571–574. [34](#), [176](#)
- Musielak, M., Marcoux, M., Quintard, M., 2013. Détermination des paramètres de transfert du TCE à travers le béton. *Journées techniques.* [7](#), [27](#)

- Nemat-Nasser, S., Hori, M., 2005. *Micromechanics : overall properties of heterogeneous materials*. Springer. [71](#)
- Nguyen, V. D., Béchet, E., Geuzaine, C., Noels, L., 2011. Imposing periodic boundary condition on arbitrary meshes by polynomial interpolation. *Comp. Mater. Science*. 00, 1–28. [8](#), [45](#), [46](#), [71](#), [99](#)
- Oumarou, M. M., Jeulin, D., Renard, D., Castaing, P., 2012. Multi-scale statistical approach of the elastic and thermal behavior of a thermoplastic polyamid-glass fiber composite. *TECHNISCHE MECHANIK* 32, 484–506. [10](#), [12](#), [47](#), [61](#), [86](#), [164](#)
- Paiboon, J., Griffiths, D. V., Huang, J., Fenton, G. A., 2013. Numerical analysis of effective elastic properties of geomaterials containing voids using 3D random fields and finite elements. *Int. J. Solids Str.* 50, 3233–3241. [72](#)
- Pierard, O., Gonzalez, C., Segurado, J., Llorca, J., Doghri, I., 2007. Micromechanics of elasto-plastic materials reinforced with ellipsoidal inclusions. *Int. J. Solids Struct.* 44, 6945–6962. [52](#)
- Quey, R., Dawson, R., Barbe, F., 2011. Large-scale 3d random polycrystals for the finite element method : Generation, meshing and remeshing. *Comp. Methds. Appl. Mech. Anrg.* 200, 1729–1745. [7](#), [41](#)
- Reuss, A., 1929. Berechnung der fließgrenz von mischkristellen auf grund der plastizitätsbedingung für einkristalle. *Z. Angew. Math. Mech.* 9, 49–58. [34](#), [174](#)
- Rintoul, M. D., Torquato, S., 1997. Precise determination of the critical threshold and exponents in a three-dimensional continuum percolation model. *J. Phys. A : Math. Gen* 30, L585–L592. [109](#), [120](#)
- Rokbi, M., Osmani, H., Imad, A., Benseddiq, N., 2011. Effect of chemical treatment on flexure properties of natural fiber-reinforced polyester composite. *Eng. Proc.* 10, 2092–2097. [148](#)
- Sab, K., 1992. On the homogenization and the simulation of random materials. *European Journal of Mechanics. A. Solids* 11, 585–607. [33](#)
- Segurado, J., Gonzalez, C., Llorca, J., 2003. A numerical investigation of the effect of particle clustering on the mechanical properties of composites. *Acta Mater.* 51, 2355–2369. [38](#)

- Segurado, J., Llorca, J., 2002. A numerical approximation to the elastic properties of sphere-reinforced composites. *J. Mech. Phys. Solids* 50, 2107–2121. [7](#), [38](#), [40](#), [52](#), [123](#)
- Segurado, J., Llorca, J., 2006. Computational micromechanics of composites : The effect of particle spatial distribution. *Mechanics of Materials* 38, 873–883. [38](#)
- Silva, L. J., Panzera, T. H., Christoforo, A. L., Durao, L. M. P., Lahr, F. A. R., 2012. Numerical and experimental analyses of biocomposites reinforced with natural fibres. *Int. J. Mate. Eng.* 2, 43–49. [149](#)
- Siracusa, G., La Rosa, A. D., Siracusa, V., Trovato, M., 2001. Eco-compatible use of olive husk as filler in thermoplastic composites. *J. Poly. Environment* 9, 157–161. [148](#)
- Smallwood, H., 1944. Limiting law of the reinforcement of rubber. *J. Appl. Phys.* 15, 758–766. [178](#)
- Smith, J., 1976. The elastic constants of a particulate-filled glassy polymer : Comparison of experimental values with theoretical predictions. *Polym. Engin. Scie.* 16, 394–399. [103](#)
- Tawerghi, E., Yi, Y.-B., 2009. A computational study on the effective properties of heterogeneous random media containing particulate inclusions. *J. Phys. D : Appl. Phys.* 42. [7](#), [39](#)
- Terada, K., Kikuchi, N., 1998. Characterization of the mechanical behavior of solid-fluid mixture by homogenization method. *Comput. Methods. Appl. Engrg* 153, 223–257. [33](#)
- Torquato, S., 1991. Random heterogeneous media : Microstructure and improved bounds on effective properties. *Appl. Mech. Rev* 44, 37–77. [175](#)
- Torquato, S., 1997. Morphology and effective properties of disordered heterogeneous media. *Int. J. Solids Structures* 35, 2385–2406. [10](#), [87](#)
- Torquato, S., 2002. *Random heterogeneous materials : microstructure and macroscopic properties.* Springer. [175](#)
- Tucker, C. L., Liang, E., 1999. Stiffness predictions for unidirectional short fiber composites : Review and evaluation. *Composites Science and Technology* 59, 655–671. [35](#), [36](#)

- Voigt, W., 1889. Über die beziehung zwischen den beiden elastizitatskonstanten isotroper korper. Wied. Ann. 38, 573–587. [34](#), [174](#)
- Wiener, O., 1912. Die theorie des mischkorpers fur das feld des stationaren stromung. Abhandl Math-Phys Kl Königl Sachsischen Ges 32, 509–604. [180](#)
- Willot, F., Jeulin, D., 2009. Elastic behavior of composites containing boolean random sets of inhomogeneities. Int. J. Eng. Sci. 47, 313–324. [44](#), [166](#)
- Wu, T., Temizer, I., Wriggers, P., 2013. Computational thermal homogenization of concrete. Cement and Concrete Comp. 35, 59–70. [99](#)
- Zaoui, A., 1999. Matériaux hétérogènes et composites. Ecole Polytechnique, Paris. [28](#), [35](#), [176](#)
- Zhou, Q., Zhang, H. W., Zheng, Y. G., 2012. A homogenization technique for heat transfer in periodic granular materials. Advanced Pow. Tech. 23, 104–114. [98](#)

BIBLIOGRAPHIE
