



HAL
open science

Modélisation micromécanique des matériaux hétérogènes en régimes transitoires : contributions en vue de l'étude du vieillissement des structures en service

Renaud Masson

► To cite this version:

Renaud Masson. Modélisation micromécanique des matériaux hétérogènes en régimes transitoires : contributions en vue de l'étude du vieillissement des structures en service. Mécanique [physics.med-ph]. Université de la Méditerranée - Aix-Marseille II, 2010. tel-00605270

HAL Id: tel-00605270

<https://theses.hal.science/tel-00605270>

Submitted on 2 Jul 2011

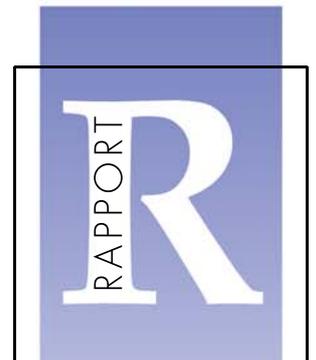
HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

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

**MODÉLISATION MICROMÉCANIQUE DES MATÉRIAUX HÉTÉROGÈNES
EN RÉGIMES TRANSITOIRES :
CONTRIBUTIONS EN VUE DE L'ÉTUDE DU VIEILLISSEMENT
DES STRUCTURES EN SERVICE**

par
Renaud MASSON

CEA CADARACHE
DIRECTION DE L'ÉNERGIE NUCLÉAIRE
DÉPARTEMENT D'ÉTUDES DES COMBUSTIBLES
SERVICE D'ÉTUDES ET DE SIMULATION
DU COMPORTEMENT DES COMBUSTIBLES



DIRECTION DES SYSTÈMES
D'INFORMATION

CEA / SACLAY 91191 GIF-SUR-YVETTE CEDEX FRANCE

**RAPPORT
CEA-R-6268**

2011

- Rapport CEA-R-6268 -

CEA Cadarache
Direction de L'Énergie Nucléaire
Département d'Études des Combustibles
Service d'Etudes et de Simulation du Comportement des Combustibles

MODÉLISATION MICROMÉCANIQUE DES MATÉRIAUX HÉTÉROGÈNES
EN RÉGIMES TRANSITOIRES :
CONTRIBUTIONS EN VUE DE L'ÉTUDE DU VIEILLISSEMENT
DES STRUCTURES EN SERVICE

par

Renaud MASSON

- Avril 2011 -

RAPPORT CEA-R-6268 – Renaud MASSON

«Modélisation micromécanique des matériaux hétérogènes en régimes transitoires : contributions en vue de l'étude du vieillissement des structures en service»

Résumé - La modélisation du comportement mécanique des matériaux de structure se nourrit de plus en plus de paramètres microstructuraux. Dans ce cadre, les méthodes d'homogénéisation présentent l'avantage de fournir des méthodes déductives qui, à partir des propriétés et de la répartition spatiale des hétérogénéités, déduisent les propriétés effectives du matériau considéré. Néanmoins de nombreuses applications soulèvent encore des difficultés. C'est en particulier le cas des matériaux de structure présentant un comportement élasto-viscoplastique et soumis à un trajet de chargement non monotone et non isotherme. Progresser sur le traitement par homogénéisation de ces situations concrètes constitue précisément le fil conducteur des différentes contributions présentées dans ce mémoire d'HDR. Dans le cas élastique linéaire, de nouvelles expressions pour le calcul du tenseur d'Eshelby sont tout d'abord établies afin d'améliorer l'efficacité des méthodes d'homogénéisation habituellement proposées. Toujours pour des comportements linéaires mais à présent viscoélastique, différentes approximations associées à l'utilisation du théorème de correspondance sont étudiées et comparées. On montre notamment l'équivalence d'une de ces approximations (la méthode des collocations) avec une formulation à variables internes du comportement effectif. Cette formulation à variables internes conduit à des résultats exacts dans certaines situations et simplifie notablement le traitement des comportements viscoélastiques linéaires vieillissants. Dans le cas des comportements élasto-viscoplastiques, s'ajoute à la difficulté précédente (couplage viscoélastique) celle du traitement des non linéarités. Des comparaisons établies entre différentes familles d'estimation permettent de bien cerner les effets des différentes approximations nécessaires pour traiter ces non linéarités. Une proposition d'amélioration est même formulée et mise en œuvre dans un cas particulier. On montre ensuite comment décliner l'approche par variables internes dans ce cas non linéaire. Enfin, la question des calculs de microstructures est aussi abordée en considérant le cas particulier où des zones de l'élément de volume considéré ont des propriétés mécaniques mal définies. Dans le cas élastique linéaire, de nouvelles bornes pour le comportement effectif sont établies en mariant le calcul de structure et une approche variationnelle de type Hashin et Shtrikman. Ce dernier point ouvre sur des perspectives de recherche importantes : bornes plus resserrées, comportements non linéaires, ... Côté méthodes d'homogénéisation, des perspectives précises sont aussi définies, en particulier pour les matériaux poly-cristallins, situation pour laquelle le champ d'investigation s'élargit nettement (fatigue, grandes déformations, ...) grâce à la formulation à variables internes proposée. Enfin, la simulation des effets d'irradiation constitue le troisième thème d'intérêt pour les années à venir, l'objectif général étant de mieux prédire les effets des déformations de gonflement induites par l'irradiation sur le comportement des structures en service.

2011 – Commissariat à l'Énergie Atomique – France

RAPPORT CEA-R-6268 – Renaud MASSON

« Micromechanical modelling of heterogeneous materials in transient conditions: contributions for the study of the ageing of structural components under service »

Abstract - The modelling of the mechanical behaviour of structural materials is increasingly based on microstructural parameters. Within this framework, homogenisation methods have the advantage of providing deductive methods which, starting from the properties and space distribution of each constituent, deduce the effective properties of the heterogeneous material. Nevertheless, many applications make still difficult the use of homogenisation methods. It is in particular the case of structural materials presenting elastic-viscoplastic behaviours and subjected to both non-monotone and ageing loadings. To progress on the treatment by homogenisation of these useful situations constitutes precisely the main idea of the various contributions presented in this work. For linear elasticity, new expressions for the computation of the Eshelby tensor are first of all established in order to improve the efficiency of homogenisation methods usually used. Always for linear behaviours but now viscoelastic, various approximations associated with the use of the theorem of correspondence are studied and compared. The equivalence of one of these approximations (the so-called "collocation method") with an internal variables formulation of the effective behaviour is shown. This internal variables formulation leads to exact results in some situations and strongly simplifies the treatment of ageing linear viscoelastic behaviours. In the case of elastic-viscoplastic behaviours, is added to the previous difficulty (viscoelastic coupling) that of the treatment of nonlinear behaviour. Comparisons made between various families of estimates make it possible to determine the effects of the various approximations needed to deal with these nonlinearities. An improvement is also proposed and implemented in a particular case while the extension of this internal variable formulation to nonlinear behaviours is discussed. Finally, full-field computations of microstructures are also tackled by considering the particular situation where regions of the representative volume element have ill-defined mechanical properties. In the linear elastic case, new bounds for the effective behaviour are derived by marrying the structural analysis and a variational approach. This last work opens on important prospects for further works: more tightened bounds, nonlinear behaviours, ... Considering homogenisation methods, further works are precisely defined, in particular for polycrystalline materials. In that situation, the field of investigation widens clearly (Fatigue, Large strains, ...) thanks to the internal variables formulation proposed. Lastly, the simulation of irradiation effects constitutes the third topic of interest for the years to come, the general objective being to better predict the effects of the swelling strains induced by irradiation on the behaviour of structural components under service.

2011 – Commissariat à l'Énergie Atomique – France

UNIVERSITÉ DE LA MEDITERRANEE - AIX-MARSEILLE II

INSTITUT DE MECANIQUE DE MARSEILLE (I.M.2)

**École Doctorale Sciences pour l'ingénieur :
Mécanique, Physique, Micro et Nanoélectronique
E.D. numéro 353**

**HABILITATION A DIRIGER DES
RECHERCHES**

Renaud MASSON

Soutenue le 20 décembre 2010

**Modélisation micromécanique des matériaux
hétérogènes en régimes transitoires : contributions
en vue de l'étude du vieillissement des structures
en service**

JURY

M. P. GILORMINI	DIRECTEUR DE RECHERCHE	ENSAM, Paris	Rapporteur
M. D. KONDO	PROFESSEUR	UPMC, Paris	Rapporteur
M. JC MICHEL	DIRECTEUR DE RECHERCHE	LMA, Marseille	Rapporteur
M. P. PONTE CASTAÑEDA	PROFESSEUR	UPenn, USA	Examineur
M. P. SUQUET	DIRECTEUR DE RECHERCHE	LMA, Marseille	Examineur
M. A. ZAOUÏ	DIRECTEUR DE RECHERCHE	ENSAM, Paris	Examineur

Remerciements



FIG. 1 – Après la soutenance, le 20 décembre 2010. De gauche à droite : P. Suquet, A. Zaoui, P. Ponte-Castañeda, JC. Michel, R. Masson, P. Gilormini et D. Kondo.

En premier lieu, je remercie très sincèrement l'ensemble des membres du jury d'avoir accepté d'examiner mes travaux et tout particulièrement, les trois rapporteurs, D. Kondo, P. Gilormini et JC Michel. Bien entendu, que A. Zaoui accepte de présider ce jury me touche tout particulièrement, tout comme la présence dans ce même jury de P. Suquet et, "cerise sur le gâteau", de P. Ponte-Castañeda, malgré la distance Philadelphie-Marseille (et les intempéries de dernière minute sur Roissy!).

Je souhaite aussi saluer ceux qui m'ont aidé dans le travail de rédaction de ce mémoire, notamment, trois collègues du CEA (F. Nguyen, JM. Gatt et I. Ramière) qui ont relu avec soins différentes versions intermédiaires du mémoire finalement remis aux membres du jury. Concernant les préparatifs de soutenance, je remercie très sincèrement R. Bousquet (CEA) dont l'aide s'est avérée très précieuse sans oublier Mme Callier (Univ. Méditerranée). J'ai été aussi très touché par la présence de nombreux collègues venus assister à cette soutenance, notamment les collègues du Département d'Etude des Combustibles. Merci à tous pour votre soutien et merci au CEA de m'avoir permis de réaliser ce projet!

Le mémoire qui suit, fait le bilan et donne les perspectives d'une dizaine d'années de travaux sur la modélisation des matériaux hétérogènes. Ces travaux ont rarement

fait l'objet d'une contribution solitaire mais sont au contraire le fruit de collaborations formelles ou informelles nouées avec des collègues de la Division Recherche et Développement d'eDF, du CEA ou du monde académique. Ces différentes collaborations sont autant de passionnantes "aventures" scientifiques et humaines. De ces collaborations sont nées diverses contributions scientifiques (des articles) dont les co-auteurs se reconnaîtront dans ce qui suit. J'ai eu vraiment beaucoup de chance de pouvoir collaborer avec eux et j'espère que nous aurons l'occasion de collaborer à nouveau, en particulier autour des thèmes de recherche définis à la fin de ce mémoire.

Enfin, mes proches m'ont fait le plaisir de se joindre à nous lors de la soutenance de ces travaux. Je les en remercie, mes plus vifs remerciements allant à mon épouse, Sandrine, ainsi qu'à mes enfants qui, en sus de leur soutien sans faille ces années passées, m'ont aidé à organiser cette soutenance d'HdR.

Table des matières

1	Introduction	3
2	Homogénéisation en élasticité linéaire	7
2.1	Déformations libres en élasticité linéaire	9
2.1.1	Exemples de manifestation mécanique des déformations libres	9
2.1.2	Principe de minimum pour le problème élastique linéaire avec déformations libres	10
2.2	Le problème d'Eshelby	14
2.2.1	Rappels	14
2.2.2	Motivations	15
2.2.3	Nouvelle expression en 3D	17
2.2.4	Résultats	19
2.2.5	Conclusions	20
2.3	Calculs de micro-structure sur maillages libres	22
2.3.1	Motivations	22
2.3.2	De nouvelles bornes	23
2.3.3	Illustration	25
2.3.4	Conclusions	28
2.4	Conclusions	29
3	La viscoélasticité linéaire	31
3.1	Rappels : le théorème de correspondance	33
3.1.1	Le problème de la sphère creuse sous pression	33
3.1.2	Limitations à l'emploi du théorème de correspondance, discussion	37
3.1.3	Application à l'homogénéisation	38
3.2	Inversion des transformées de Laplace-Carson	43
3.2.1	Méthode des collocations	43

3.2.2	La méthode “quasi-élastique”	44
3.2.3	Inversion de la transformée de Laplace-Carson : conclusions	45
3.3	Représentation par variables internes	46
3.3.1	Relation d’équivalence	46
3.3.2	Cas particulier des composites biphasés	47
3.3.3	Avantages de la représentation par variables internes	48
3.4	L’approche par déformation libre	50
3.4.1	Remarque préliminaire	50
3.4.2	L’approche par déformations libres (homogènes par phase)	51
3.5	Conclusions, perspectives	53
4	Comportements non linéaires	55
4.1	Principe général	58
4.1.1	L’approche par “Milieu linéaire de Comparaison”	58
4.1.2	Comparaisons pour des régimes stationnaires	60
4.2	Le modèle Affine et ses variantes quasi-élastiques	67
4.2.1	Le modèle Affine, rappels	67
4.2.2	Les variantes “quasi-élastiques” du modèle Affine	69
4.2.3	Perspectives	74
4.3	Formulation avec variables internes	76
4.3.1	Formulation dans le cas des polycristaux	76
4.3.2	Avantages de cette formulation, perspectives nouvelles d’utilisation	78
4.4	Conclusions, perspectives	79
5	Bilan des travaux effectués	81
6	Perspectives de recherche	85

L'ingénieur qui conçoit ou étudie une structure peut difficilement échapper à la question du comportement des matériaux constitutifs de la structure considérée. Ainsi, même s'il se limite à l'étude de la réponse élastique de la structure pour son dimensionnement, il devra se préoccuper de ses modes de ruine et donc élargir le cadre d'étude de son comportement. De plus en plus souvent, il va aussi regarder de plus près de quelles hétérogénéités est constitué le matériau considéré, a minima d'un point de vue qualitatif ! Je pense notamment à des exemples concrets tirés du domaine de l'énergie, en particulier au caractère anisotrope du fluage du matériau de gainage constituant les crayons combustible des réacteurs à eau sous pression (lié à la texture orthotrope de ce matériau et à la symétrie cristalline (hexagonale) de ses constituants), au clivage apparaissant dans la ferrite des aciers constituant certains composants du circuit primaire principal des réacteurs à eau sous pression (cuve, coudes moulés, ...), au rôle des porosités dans les déformations du combustible nucléaire, ... D'un point de vue quantitatif à présent, si on veut tenir compte des effets de ces hétérogénéités sur le comportement macroscopique du matériau considéré, il faut développer un modèle micromécanique (un modèle d'homogénéisation). Or, plusieurs travaux industriels de Recherche et de Développement s'appuient désormais sur des approches micromécaniques. Dans le domaine de l'énergie, on trouve encore plusieurs exemples allant de la modélisation de la conductivité thermique de certains combustibles au fluage propre du béton des enceintes des réacteurs à eau sous pression, ce dernier problème constituant un exemple d'application du théorème de correspondance de Mandel (1966) (viscoélasticité linéaire) à une situation concrète.

Cependant, l'utilisation quantitative des méthodes d'homogénéisation pour les études menées par les ingénieurs reste (relativement) modeste, même dans des domaines, comme celui de l'énergie, pour lequel la simulation numérique est très développée. Pour quelles raisons ? Pour répondre à cette question, examinons de plus près des situations concrètes rencontrées dans des études relevant du domaine de l'énergie et, pour lesquels, l'emploi de méthodes d'homogénéisation reste limité (voir Figure 1.1). Du point de vue des sollicitations imposées tout d'abord, les chargements étudiés sont souvent de nature thermo-

mécanique : si on prend l'étude de la cuve d'un réacteur à eau sous pression, par exemple, le chargement est constitué d'efforts imposés (la pression du caloporteur qui s'exerce en paroi interne) et de contraintes thermiques (générées par les dilatations différentielles à l'œuvre dans la (forte) épaisseur de ce composant). Bien entendu, ce chargement thermomécanique est dépendant du temps, les évolutions de la pression imposée ainsi que du gradient de température étant relatives à la situation considérée. Du point de vue du comportement à présent, la réponse du matériau de structure considéré est élastoplastique, tout au moins dans la partie la plus sollicitée de la structure (au voisinage du défaut, ...). La nature de l'érouissage joue alors un rôle important sur la réponse de la structure (voir Lefevre *et al.* (2001)). Pour certains composants, des effets différés sont aussi observés (fluage, relaxation, ...) : par exemple, le jeu initial pastille-gaine des crayons combustibles se ferme progressivement sous les effets combinés de la dilatation thermique de la pastille et du fluage de la gaine résultant de la pression du caloporteur. Si on retrouve des effets de la vitesse de chargement dans le cas de l'acier de cuve pour l'interprétation des essais Charpy de caractérisation à l'état irradié (programme de surveillance), ces effets du temps restent limités dans le cas des réacteurs à eau sous pression (dits de 2ème (parc électronucléaire actuel) et 3ème (EPR en construction) générations). Avec l'élaboration de nouvelles filières (dites de 4ème génération), l'importance relative de ces effets différés sur la réponse des structures étudiées va bien entendu s'accroître du fait des températures de fonctionnement visées, supérieures à celles des chaudières nucléaires actuelles.

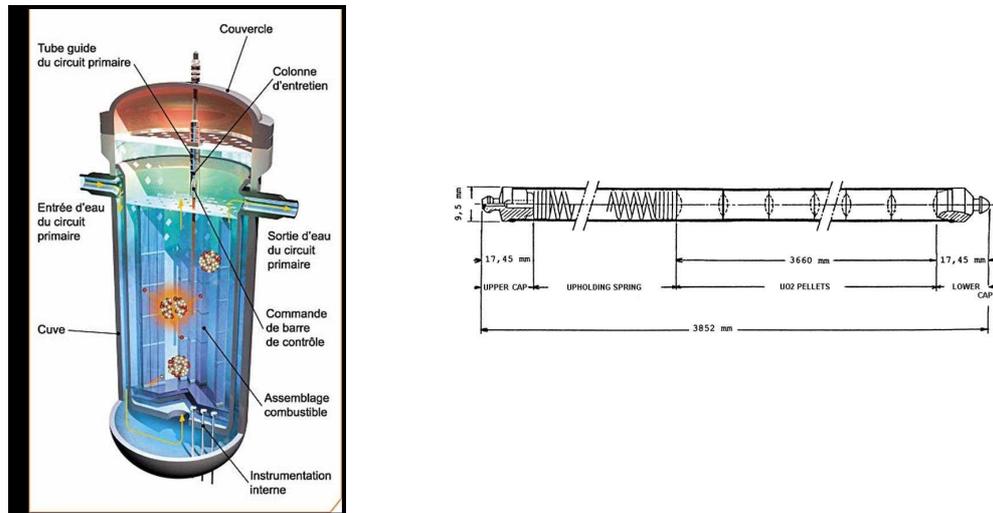


FIG. 1.1 – Cuve et crayon combustible d'un réacteur à eau sous pression (REP)

D'un point de vue théorique, les exemples décrits ci-dessus permettent de définir le domaine d'application attendu des méthodes d'homogénéisation. A l'évidence, il s'agit de comportements non linéaires (apparition de déformations irréversibles) et, compte-tenu de la complexité des trajets de chargement envisagés (trajet de chargement non mono-

tone, non radial et anisotherme), on ne pourra réduire le comportement envisagé à un cadre théorique plus simple. En particulier, on ne pourra pas faire usage de la théorie de la déformation pour nous limiter à un comportement élastique non linéaire. De même, nous ne pourrions pas nous contenter d'étudier les régimes de fluage stationnaires. Il nous faut donc étudier ici des comportements non linéaires élastoviscoplastiques (le cas élastoplastique pouvant être vu comme limite du cas élastoviscoplastique, je n'aborderai pas cette question dans ce mémoire). Il faut ajouter le qualificatif "vieillissant" pour tenir compte des effets de l'irradiation sur le comportement des structures étudiées (par exemple le gonflement induit par l'irradiation dans certains matériaux de structure comme les aciers austénitiques). Pour appliquer les méthodes d'homogénéisation aux problèmes concrets définis ci-dessus, il faut donc être capable de simuler par homogénéisation la réponse de matériaux hétérogènes élastoviscoplastiques vieillissants à des trajets de chargement non radiaux, non monotones et anisothermes. Difficile d'imaginer plus compliqué !

Même si des solutions ont été proposées (nous y reviendrons), il n'existait pas, lorsque j'ai entamé ce travail de recherche, une méthode d'homogénéisation qui fasse l'unanimité pour traiter le problème posé et ce, pour plusieurs raisons :

- sur de nombreuses questions (le traitement des non linéarités, par exemple), il existait plusieurs propositions différentes. Des comparaisons ont alors été utiles pour identifier les lacunes des différentes méthodes et en proposer de nouvelles. Un travail de comparaison et d'amélioration était donc nécessaire.
- la mise en œuvre des méthodes d'homogénéisation était lourde eu égard aux temps de calculs. Il y avait donc un travail d'optimisation à mener. Il ne s'agit pas ici de décrire des améliorations informatiques, mais les développements analytiques à la base de ce travail d'optimisation.
- la formulation de certains modèles d'homogénéisation laissait penser parfois qu'ils n'étaient pas appropriés à des situations réelles telles que celles décrites ci-dessus (le vieillissement par exemple). Il s'est avéré fructueux de formuler différemment, mais de façon équivalente, le même modèle afin de l'utiliser pour des applications concrètes. C'était un travail de formulation.

Enfin, dans le but de comparer les méthodes d'homogénéisation développées à des solutions de référence, nous avons aussi abordé la question des calculs de microstructures, ce qui nous a conduit à résoudre un problème nouveau. L'objectif de ce mémoire est de faire la synthèse de ces différentes contributions théoriques.

Pour comprendre la structure de ce document, il est à présent nécessaire de faire un court rappel concernant les méthodes d'homogénéisation dont l'objectif général est de prédire le comportement effectif d'un matériau hétérogène à partir de la connaissance du comportement et de la répartition spatiale de ses constituants. Pour cela, on considère en général un Volume Élémentaire Représentatif (VER) de ce matériau hétérogène. Les dimensions de ce VER sont grandes devant la taille des hétérogénéités, elles-mêmes supposées grandes pour être représentées par un continuum. Toute procédure d'homogénéisation débute par une phase dite de "représentation" visant à décrire le milieu hétérogène (en général aléatoire) par des quantités statistiques, par exemple

la distribution des orientations cristallines d'un matériau poly-cristallin (sa texture). La phase de "localisation" consiste alors à relier par un modèle les grandeurs locales (la déformation d'un pore, par exemple) aux grandeurs macroscopiques imposées (la déformation macroscopique imposée aux bords du VER par exemple). Enfin, la phase d'homogénéisation permet par des opérations de moyenne volumique d'en déduire la réponse effective du VER (la contrainte macroscopique par exemple). Lorsque les constituants du matériau hétérogène considéré présentent un comportement élastique linéaire, de nombreuses méthodes (lois des mélanges par exemple) permettent d'estimer ou de borner les propriétés effectives recherchées. Pour des comportements non linéaires, une part significative des méthodes proposées ramènent, par linéarisation autour de quantités moyennes par phase, le problème initial à un problème linéaire (dans la suite du document, nous ferons aussi référence à des solutions alternatives).

La résolution d'un problème non linéaire conduisant, par linéarisation, à celle d'un problème linéaire, l'effort de recherche dans le cas linéaire reste nécessaire pour traiter le problème général défini ci-dessus : simuler par homogénéisation la réponse de matériaux hétérogènes élastoviscoplastiques vieillissants à des trajets de chargement non radiaux, non monotones et anisothermes. C'est l'objet du chapitre 2 de ce mémoire, dans lequel je reviens sur deux contributions nouvelles dans ce cas élastique linéaire. J'aborde alors dans les chapitres 3 et 4 qui suivent des comportements dépendants du temps, tout d'abord dans le cas linéaire (viscoélasticité linéaire) puis, non linéaire (élastoviscoplasticité). Chaque contribution présentée constitue une réponse aux questions définies ci-dessus : comparaison et amélioration, optimisation, formulation et résolution d'un problème nouveau.

Notations :

Dans ce document, les notations suivantes sont adoptées :

- $\mathbf{x} = x_i \mathbf{e}_i$ ($i = 1, 2, 3$) désigne un vecteur de l'espace (somme sur les indices répétés, $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3)$ est un repère orthonormé) ;
- $\boldsymbol{\varepsilon} = \varepsilon_{ij} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j$ désigne un tenseur du deuxième ordre (\otimes le produit tensoriel), $\boldsymbol{\delta}$ le tenseur du deuxième ordre unité tel que $\delta_{ij} = \delta_{ij}$ (δ est le symbole de Kronecker) ;
- $\mathbf{L} = L_{ijkl} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_l$ désigne un tenseur du quatrième ordre, le produit doublement contracté étant noté ":" selon $\mathbf{L} : \boldsymbol{\varepsilon} = L_{ijkl} \varepsilon_{kl} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j$.

Homogénéisation en élasticité linéaire

Pourquoi diable nous parler d'élasticité linéaire alors que, pour l'essentiel, les problèmes d'homogénéisation posés sont au mieux dépendants du temps, au pire non linéaires ? C'est que, même pour des problèmes non linéaires, les méthodes de résolution par homogénéisation font en général référence à un Milieu Linéaire de Comparaison (Ponte Castañeda (1991)) auquel il nous faudra appliquer les méthodes d'homogénéisation classiques (modèle auto-cohérent, Hashin et Shtrikman, ...) qui elles-mêmes font souvent appel à un problème certes ancien, mais à l'évidence "inoxydable" : le problème d'Eshelby (1961). Or, il s'est avéré nécessaire et fructueux de revisiter ce problème d'Eshelby afin d'y apporter dans le cas général une solution plus simple (voir section 2.2) qui, je l'espère, facilitera l'emploi des méthodes d'homogénéisation dans les années à venir.

Si le problème d'Eshelby est un problème ancien, je me suis également intéressé à des méthodes de résolution plus récentes : les calculs tridimensionnels de Volumes Élémentaires Représentatifs de micro-structures "réelles". De nombreux travaux ont en effet abordé cette question ces quinze dernières années : je pense en particulier à l'équipe de G. Cailletaud (Barbe *et al.* (2001)) et d'Anand (Staroselsky and Anand (1998)) pour la simulation de VER de polycristaux par la méthode des éléments finis ; aux simulations de VER par la méthode FFT (Moulinec and Suquet (1998)) utilisées tant pour la simulation de micro-structures de type composite (Moulinec and Suquet (1998)) que polycristallines (Lebensohn (2001)). La question nouvelle rapportée dans ce mémoire m'a été posée par un collègue d'EDF-R&D, C. Toulemonde, qui cherchait à effectuer des simulations de VER du béton, vu comme une matrice de ciment renforcée par des granulats en forte proportion (50%) : pour des raisons pratiques que nous détaillerons plus loin, la discrétisation spatiale (éléments finis ici mais ce pourrait être aussi des voxels avec la méthode FFT !) conduit à définir des mailles contenant au moins deux phases différentes. Quelles propriétés affecter à ces éléments ? Quelle propriété effective en déduire ? ... Voilà les questions que j'aborderai dans la section 2.3.

Que ce soit le problème d'Eshelby ou la méthode variationnelle étudiée dans la section 2.3, la notion de déformation libre (équivalente, nous le verrons plus loin, à la notion

de polarisation), joue un rôle central. C'est pourquoi je reviens tout d'abord sur cette notion en section 2.1.

Par la suite, on considère un VER V d'un matériau hétérogène élastique linéaire, une déformation macroscopique $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$ homogène étant appliquée sur sa surface extérieure ∂V . Les modules élastiques de chacune des phases (indice (s)) sont notés par les tenseurs d'ordre quatre \mathbf{L}^s ($1 \leq s \leq n_p$, n_p désignant le nombre de phases). En chaque point $\mathbf{x} \in V$, la densité d'énergie de déformation est définie par :

$$w(\mathbf{x}, \boldsymbol{\varepsilon}) = \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbf{L}(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\varepsilon} \quad (2.1)$$

$\boldsymbol{\varepsilon}$ étant le tenseur infinitésimal des déformations tandis que le module élastique $\mathbf{L}(\mathbf{x})$ est égal à \mathbf{L}^s si le point x considéré se trouve dans la phase d'indice (s). Les propriétés effectives du VER sont déterminées par son énergie effective de déformation selon Hill (1963) :

$$\bar{W}(\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}) = \min_{\boldsymbol{\varepsilon} \in K} \frac{1}{|V|} \int_V w(x, \boldsymbol{\varepsilon}) dx \quad (2.2)$$

K désignant l'ensemble des champs de déformation cinématiquement admissibles avec la déformation moyenne $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$. Le problème (2.2) peut être résolu par des modèles d'homogénéisation analytiques, certains s'appuyant sur la résolution du problème d'Eshelby (voir section 2.2). Mais, ce problème (2.2) peut être aussi résolu directement par un calcul éléments finis (par exemple) sur une réalisation donnée du VER considéré (voir section 2.3).

2.1 Déformations libres en élasticité linéaire

2.1.1 Exemples de manifestation mécanique des déformations libres

L'effet mécanique des dilatations thermiques sur les structures doit souvent être pris en compte pour leur dimensionnement. On peut citer par exemple, le dimensionnement des lignes de tuyauteries. La présence d'ancrages en certains points de la ligne de tuyauterie où des dilatations différentielles vont induire des efforts qui sont scrupuleusement étudiées en particulier dans des zones sensibles (soudures, transitions d'épaisseur, ...). Par ailleurs, les composants de forte épaisseur (forte épaisseur nécessaire pour une bonne tenue à la pression) soumis à des transitoires thermiques sont aussi le siège de dilatations thermiques différentielles (voir par exemple Masson *et al.* (2002) pour l'étude d'une cuve d'un réacteur à eau sous pression soumise à un transitoire thermique).

En chacun des points \mathbf{x} des structures considérées dans ces exemples, la réponse élastique linéaire s'écrit :

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \mathbf{L}(\mathbf{x}) : (\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x}) - \boldsymbol{\epsilon}^0(\mathbf{x})),$$

la déformation libre $\boldsymbol{\epsilon}^0(\mathbf{x})$ devant être considérée comme un paramètre de chargement extérieur. C'est le plus souvent une déformation d'origine thermique mais on peut imaginer une déformation induite par bien d'autres effets (gonflements induits par l'irradiation mais aussi déformation associée à une transformation de phase, ...). A noter que cette relation peut aussi s'écrire :

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \mathbf{L}(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x}) + \mathbf{p}^0(\mathbf{x}),$$

le tenseur du deuxième ordre $\mathbf{p}^0(\mathbf{x}) = -\mathbf{L}(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\epsilon}^0(\mathbf{x})$ étant symétrique et homogène à une contrainte. Il est souvent appelé tenseur de polarisation.

Si la structure considérée est libre de se dilater et que le champ de déformation libre appliqué à la structure est uniforme, cette structure va se dilater ou se contracter sans générer de contraintes. En revanche, si la structure n'est pas libre de se dilater (ancrage d'une ligne de tuyauterie par exemple) ou si la déformation libre n'est pas uniforme (gradient thermique dans l'épaisseur d'un composant par exemple), la structure va être le siège d'un champ de contrainte (des contraintes dites "thermiques" dans le cas d'une déformation libre d'origine thermique). Prenons par exemple le cas d'un cylindre, supposé infiniment long selon son axe, libre de se dilater radialement (pas d'effort imposé à sa périphérie) mais soumis à un gradient thermique parabolique de la forme (coordonnées cylindriques notées (r, θ, z)) :

$$T(r) = \frac{p}{4\lambda}(R^2 - r^2) + T(R).$$

Ce gradient thermique a ici pour origine une source de chaleur, uniformément répartie dans le cylindre (p la puissance volumique), R désignant le rayon extérieur du cylindre,

λ sa conductivité thermique et $T(R)$ la température imposée en périphérie du cylindre. La distribution de déformation libre (déformation thermique) résultante est donnée par :

$$\boldsymbol{\varepsilon}^0(r) = \alpha \left[\frac{p}{4\lambda}(R^2 - r^2) + \Delta T_R \right] \boldsymbol{\delta},$$

α désignant le coefficient de dilatation thermique, supposé indépendant de la température, du matériau constituant le cylindre, $\Delta T_R = T(R) - T_0$ (T_0 la température de référence pour laquelle la dilatation thermique est nulle).

Qualitativement, le centre du cylindre souhaitant se dilater davantage que sa périphérie, il va être mis en compression tandis que la périphérie sera en traction. Le matériau constituant le cylindre étant supposé isotrope (module d'Young E , coefficient de Poisson ν), cette distribution de déformation libre induit effectivement un champ de déplacement. Le cylindre étant supposé infiniment long dans la direction axiale, nous allons modéliser la déformation axiale comme une constante indépendante du rayon (déformations planes). Le déplacement radial, solution des équations de Navier dans le plan (r, θ) , est alors donné par :

$$\mathbf{u}(r) = \frac{1 + \nu}{1 - \nu} \frac{\alpha p}{16\lambda} \left[\left(3 - 2\nu + \frac{16\lambda(1 - \nu)}{pR^2} \Delta T_R \right) R^2 r - r^3 \right] \mathbf{e}_r.$$

La distribution de contraintes tangentielles (thermiques) dans une section droite du cylindre est alors donnée par :

$$\sigma_{\theta\theta}(r) = \frac{E}{1 - \nu} \frac{\alpha p}{16\lambda} (3r^2 - R^2).$$

Ce modèle très simple peut directement être appliqué à un cas d'application concret : la réponse thermomécanique d'une pastille combustible nucléaire d'un réacteur à eau sous pression en tout début de vie en réacteur (voir Figure 2.1). D'un rayon extérieur d'approximativement 4 mm, ces pastilles possèdent les caractéristiques suivantes : module d'Young de 200 GPa, coefficient de Poisson égal à 0,31, dilatation thermique s'élevant approximativement à $10^{-5} \text{ } ^\circ\text{C}^{-1}$. Elles sont par ailleurs caractérisées par une conductivité thermique médiocre (de l'ordre de $2 \cdot 10^{-3} \text{ W mm}^{-1} \text{ } ^\circ\text{C}^{-1}$) de sorte qu'en régime de fonctionnement nominal (puissance volumique produite égale à $0,4 \text{ W mm}^{-3}$, soit approximativement 200 W par centimètre de colonne combustible), le gradient de température entre le centre et la périphérie de la pastille s'élève à $800 \text{ } ^\circ\text{C}$. Dès la première montée en puissance, la contrainte tangentielle en périphérie pastille dépasse 1 GPa. Les conséquences pour cette céramique fragile (contrainte à rupture de l'ordre de 100 MPa) sont visibles sur la Figure 2.1 : on observe un réseau de fissures radiales qui traversent la céramique !

2.1.2 Principe de minimum pour le problème élastique linéaire avec déformations libres

En l'absence de déformations libres (et de forces de volume), l'énergie potentielle d'une structure soumise à des conditions aux limites mixtes (\mathbf{u}^d et \mathbf{T}^d : déplacements et

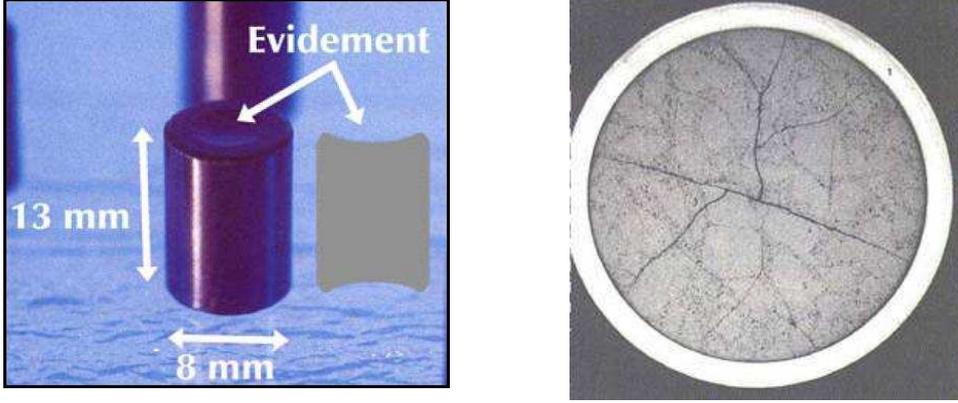


FIG. 2.1 – Figure de gauche : pastille combustible d'un REP. Figure de droite : céramographie d'une pastille de dioxyde d'Uranium irradiée : fragmentation radiale induite par les contraintes thermiques.

efforts imposés) s'écrit :

$$P(\mathbf{u}) = \int_V \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}(\mathbf{x})) : \mathbf{L}(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}(\mathbf{x})) dx - \int_{\partial V_{T^d}} \mathbf{T}^d \mathbf{u} dS, \quad (2.3)$$

\mathbf{u} désignant un champ de déplacement cinématiquement admissible avec le déplacement imposé \mathbf{u}^d , $\boldsymbol{\varepsilon}$ le champ de déformation associé (gradient symétrisé) et ∂V_{T^d} la surface extérieure de la structure soumise aux efforts \mathbf{T}^d . Le champ solution minimise l'énergie potentielle de sorte que, pour les conditions de chargement en déformation homogène au bord de la structure, on retrouve la relation (2.2).

En présence d'un champ de déformation libre $\boldsymbol{\varepsilon}^0(\mathbf{x})$ à l'œuvre dans la structure considérée et pour des conditions aux limites ($\mathbf{u}^d, \mathbf{T}^d$), le champ de déplacement solution minimise à présent la quantité suivante :

$$P(\mathbf{u}) = \int_V \left[\frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}(\mathbf{x})) : \mathbf{L}(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}(\mathbf{x})) - \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}(\mathbf{x})) : \mathbf{L}(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\varepsilon}^0(\mathbf{x}) \right] dx - \int_{\partial V_{T^d}} \mathbf{T}^d \mathbf{u} dS, \quad (2.4)$$

ou encore en remplaçant la quantité $(-\mathbf{L}(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\varepsilon}^0(\mathbf{x}))$ par la polarisation $\mathbf{p}^0(\mathbf{x})$:

$$P(\mathbf{u}) = \int_V \left[\frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}(\mathbf{x})) : \mathbf{L}(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}(\mathbf{x})) + \mathbf{p}^0(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}(\mathbf{x})) \right] dx - \int_{\partial V_{T^d}} \mathbf{T}^d \mathbf{u} dS. \quad (2.5)$$

Nous utiliserons cette quantité dans la section 2.3 mais nous pouvons d'ores et déjà en donner un exemple d'application en revenant au problème de la pastille combustible soumise à un gradient de déformation libre (thermique). Nous avons vu que, sous l'effet de ce gradient thermique, la pastille se fragmente (voir Figure 2.1). Nous allons donc considérer à présent un fragment de cette pastille (secteur angulaire d'angle θ_m et de rayon R) soumis à la même distribution de température que précédemment. Les bords

latéraux du fragment étant libres, le champ de déplacement présente une composante tangentielle et dépend de l'angle θ . Si des solutions pour le "coin infini" sont bien entendu disponibles (voir par exemple Michell (1902)), la solution exacte de ce problème (coin fini, distribution de déformations libres) n'est pas connue. Nous cherchons ici une solution approchée du déplacement, choisi de la forme¹ :

$$\mathbf{u} = u_r(r, \theta)\mathbf{e}_r + u_\theta(r, \theta)\mathbf{e}_\theta,$$

avec :

$$u_r(r, \theta) = \frac{\alpha p}{16\lambda} [AR^2r - (1 + B\theta^2)r^3] \quad \text{et} \quad u_\theta(r, \theta) = \frac{\alpha p}{16\lambda} C\theta r^3,$$

(A, B, C) désignant trois constantes qu'il nous reste à déterminer.

Cette forme du champ de déplacement assure qu'il est cinématiquement admissible avec l'unique condition aux limites cinématique ($\mathbf{u}^d(0) = \mathbf{0}$) tout en respectant la symétrie du problème par rapport à l'axe $\theta = 0$. Par linéarité, les deux composantes de ce déplacement sont proportionnelles au chargement (ici le gradient thermique $\frac{\alpha p}{4\lambda}$).

L'emploi du principe de minimum (2.4) avec la condition aux limites $\mathbf{T}^d = \mathbf{0}$ se réduit alors à chercher les trois constantes (A, B, C) minimisant le potentiel. Le champ de déplacement (et donc la déformation) dépendant linéairement de ces coefficients, l'énergie potentielle est une forme quadratique des coefficients (A, B, C). Ces trois coefficients sont donc solution d'un système linéaire à trois équations qu'on peut inverser aisément. On obtient :

$$A = 4(1 - \nu) \left[1 + \frac{4\lambda}{pR^2} \Delta T_R \right], \quad B = \frac{5}{8} \frac{3 - 34\nu}{5(1 - 2\nu) + (5 - 2\nu)\theta_m^2} \quad \text{et} \quad C = -\frac{7}{4}.$$

Cette solution approchée donne d'excellents résultats comme en témoigne la Figure 2.2. Sur cette figure sont représentées les variations radiales du déplacement tangentiel pour différentes valeurs de l'angle θ ($0 \leq \theta \leq \theta_m$). Les prédictions de l'approche proposée sont comparées à la solution de référence établie par un calcul éléments finis. On constate un très bon accord entre cette solution et la solution éléments finis.

A noter que le déplacement tangentiel est négatif dans le cas considéré. Il n'y a donc pas de conditions de contact unilatéral (entre fragments voisins) à traiter dans ce cas. Dès qu'il y a fermeture du jeu pastille-gaine en revanche, il faut tenir compte d'une pression de contact en périphérie pastille qui va induire une zone de contact inter-fragment (...) Cette solution a donc été améliorée pour tenir compte des différentes sollicitations apparaissant en réacteur (fermeture du jeu pastille-gaine, gonflement d'irradiation, ..., voir Masson (2006) et Baron *et al.* (2008)).

Bien qu'approchée, la forme du champ de déplacement est néanmoins très instructive. D'une part, on constate que le déplacement radial (qui pilote l'accroissement de diamètre du crayon combustible) dépend au deuxième ordre de l'angle θ . La poussée de la pastille

¹ Comme précédemment, nous négligeons les variations radiales de la déformation selon l'axe du cylindre (déformations planes) ainsi que les variations axiales du déplacement radial à l'origine de la forme en "diabolo" des fragments de pastille.

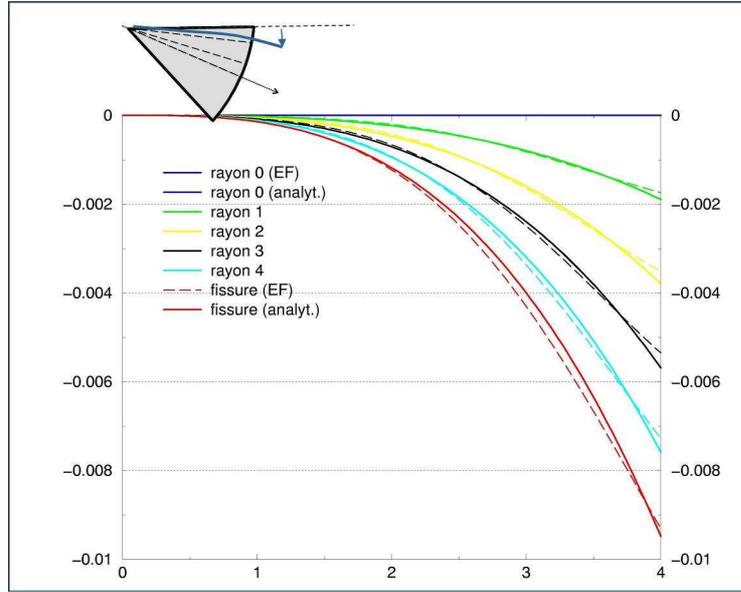


FIG. 2.2 – Déplacement tangentiel en fonction du rayon ($0 \leq r \leq 4$ mm) pour différentes valeurs de l’angle θ ($\theta = 0$ (“rayon 0” correspondant à l’axe de symétrie du fragment) à $\theta = \theta_m$ (“fissure” délimitant le bord extérieur du fragment) dans une pastille de dioxyde d’Uranium (régime nominal, jeu pastille-gaine ouvert) : comparaison de résultats exacts (éléments finis) à ceux obtenus grâce au modèle semi-analytique développé (échelle = millimètre).

sur la gaine est donc relativement homogène sur la gaine. De surcroît, seul le coefficient B dépend de la taille du fragment (θ_m) alors que la contribution $B\theta^2$ est du deuxième ordre. L’effet de la taille du fragment sur la déformation radiale est donc, elle aussi, du deuxième ordre. En revanche, l’ouverture $\varpi(r)$ des fragments de pastille (voir Figure 2.3), pilotée par la composante tangentielle du déplacement, dépend linéairement de la taille du fragment selon :

$$\varpi(r) = \frac{\alpha p}{8\lambda} |C| \theta_m r^3.$$

Or, cette ouverture dans le plan (r, θ) , combinée à la mise en diabolisme de la pastille dans le plan (r, z) , est la force motrice de l’interaction pastille-gaine pouvant conduire à l’apparition de fissures dans la gaine. Le résultat obtenu permet donc de mieux apprécier l’effet de la taille du fragment sur cette “force motrice” : toutes choses étant égales par ailleurs (propriétés mécaniques de la pastille, contact pastille-gaine, ...), nous constatons qu’une diminution de la taille du fragment est susceptible de diminuer le risque de rupture dans la gaine.

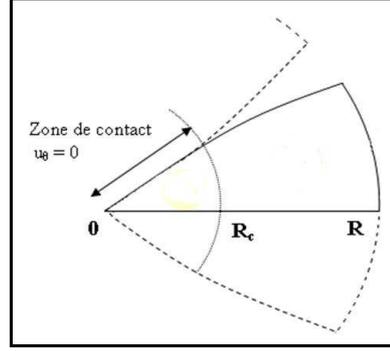


FIG. 2.3 – Ouverture entre fragments de pastille : les déplacements tangentiels des deux fragments représentés conduisent à un écartement des bords extérieurs fragments. Un déplacement tangentiel nul correspond à une zone de contact entre fragments.

2.2 Le problème d'Eshelby

2.2.1 Rappels

Comme Eshelby (1961), on considère par la suite un milieu infini obéissant à un comportement élastique linéaire, \mathbf{L} désignant le tenseur d'ordre quatre des modules élastiques. Si on soumet une région ellipsoïdale Ω de ce milieu à une déformation libre uniforme (déformation thermique, gonflement, ...) $\boldsymbol{\varepsilon}^0$, la déformation résultante, notée $\boldsymbol{\varepsilon}$ est, elle aussi, uniforme dans Ω et égale à $\mathbf{S} : \boldsymbol{\varepsilon}^0$ ($\varepsilon_{ij} = S_{ijkl}\varepsilon_{kl}^0$ avec sommation sur les indices répétés), expression dans laquelle \mathbf{S} est un tenseur du quatrième ordre, appelé aussi le tenseur d'Eshelby (S_{ijkl} désignent ses composantes dans un repère cartésien).

Ce tenseur d'Eshelby présente les habituelles symétries mineures $S_{ijkl} = S_{jikl} = S_{ijlk}$ mais n'obéit pas de façon générale aux symétries majeures ($S_{ijkl} \neq S_{klij}$). C'est pourquoi on emploie souvent le tenseur de Hill (1965), noté \mathbf{P} et défini par $\mathbf{S} = \mathbf{P} : \mathbf{L}$. Ce tenseur \mathbf{P} présente l'intérêt d'obéir aux symétries mineures et majeures (voir l'annexe C de Bornert (1996)). Comme ce tenseur \mathbf{P} relie la déformation de l'inclusion à la polarisation associée à $\boldsymbol{\varepsilon}^0$ ($\mathbf{p}^0 = -\mathbf{L} : \boldsymbol{\varepsilon}^0$)², on appelle ce tenseur \mathbf{P} le tenseur de polarisation de Hill.

Différentes expressions de ce tenseur de polarisation de Hill sont disponibles dans la bibliographie sur le sujet. En particulier (voir Willis (1981)) :

$$\mathbf{P} = \frac{1}{4\pi|\boldsymbol{\zeta}|} \int_{\|\mathbf{w}\|=1} \mathbf{M}(\mathbf{w}) \|\boldsymbol{\zeta}^{-1}\mathbf{w}\|^{-3} dS_{\mathbf{w}} \quad (2.6)$$

avec :

$$- \mathbf{M}_{ijkl}(\mathbf{w}) = \frac{1}{4} \left(A_{jk}^{-1} w_i w_l + A_{ik}^{-1} w_j w_l + A_{jl}^{-1} w_i w_k + A_{il}^{-1} w_j w_k \right), \mathbf{A} \text{ désignant le tenseur acoustique } (A_{ik} = L_{ijkl} w_j w_l);$$

²En effet, la déformation de l'inclusion est égale à $\mathbf{S} : \boldsymbol{\varepsilon}^0 = \mathbf{P} : \mathbf{L} : \boldsymbol{\varepsilon}^0 = -\mathbf{P} : \mathbf{p}^0$.

- $\boldsymbol{\zeta}$ le tenseur du deuxième ordre caractérisant la géométrie de l'ellipsoïde considéré : $\|\boldsymbol{\zeta}\boldsymbol{w}\| \leq 1$, l'origine étant prise au centre de l'inclusion.

2.2.2 Motivations

Si le milieu infini considéré est anisotrope, l'expression algébrique du tenseur de polarisation de Hill dépend d'une intégrale double (Mura, 1982). Différentes méthodes numériques ont été proposées pour calculer ces intégrales doubles (autant d'intégrales que de composantes!). Or, comme illustré sur la Figure 2.4, ce problème d'Eshelby est utilisé pour calculer des bornes (Hashin and Shtrikman (1963), Ponte Castañeda and Willis (1995)) ou des estimations (Kröner (1958), Mori and Tanaka (1973)) du comportement effectif de matériaux hétérogènes.

Dans beaucoup de cas linéaires, le milieu infini sera isotrope et les inclusions sphériques ou sphéroïdales auxquels cas, le tenseur de polarisation de Hill peut être calculé explicitement (voir Ponte Castañeda and Willis (1995) pour le cas d'inclusions sphéroïdales). Dans le cas d'un milieu infini isotrope (modules de cisaillement et de compressibilité (μ, k)) et d'une inclusion sphérique, le tenseur d'Eshelby a pour expression :

$$\boldsymbol{S} = \frac{3k}{3k + 4\mu} \boldsymbol{J} + \frac{6(k + 2\mu)}{5(3k + 4\mu)} \boldsymbol{K}, \quad (2.7)$$

avec $\boldsymbol{I} = \boldsymbol{J} + \boldsymbol{K}$, $I_{ijkl} = \frac{1}{2}(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk})$ et $J_{ijkl} = \frac{1}{3}\delta_{ij}\delta_{kl}$.

Cependant, même dans le cas élastique linéaire, on peut rencontrer des situations de symétrie plus complexes. Par ailleurs, comme rappelé plus haut, les méthodes d'homogénéisation dans le cas non linéaire procèdent généralement par linéarisation de la loi de comportement non linéaire (Milieu Linéaire de Comparaison). Les différentes méthodes de linéarisation proposées (voir Rekik *et al.* (2007)) conduisent à des propriétés élastiques fortement anisotropes. Par exemple, pour une linéarisation tangente (Molinari *et al.* (1987), Lebensohn and Tomé (1993), Rougier *et al.* (1994), Ponte Castañeda (1996)) d'une loi de comportement isotrope non linéaire (voir section 4.1), les tenseurs des modules linéarisés exhiberont au mieux une symétrie de révolution (autour de l'axe de traction). Dans ce cas, l'intégrale double peut être réduite à une intégrale simple (voir Kneer (1965) avec des corrections dans Hutchinson (1976), voir aussi Lin and Mura (1973) pour une réduction similaire dans le cas d'inclusions sphéroïdales plongées dans un milieu infini de symétrie cubique). Dans le cas général (matériaux polycristallins texturés, ...), les phases du Milieu Linéaire de Comparaison auront un comportement obéissant à une anisotropie beaucoup plus générale.

En pratique, le calcul numérique de ces intégrales doubles (voir Brenner *et al.* (2004) pour une comparaison de différentes méthodes de quadrature) réduit significativement les performances en termes de temps calcul des simulations envisagées et constitue donc un des verrous à l'utilisation plus intensive de ces méthodes d'homogénéisation (dans les codes de calcul de structure, par exemple). Comment faire "sauter" ce verrou? Mura (1982) avait déjà suggéré de tirer profit de la théorie des résidus, pour réduire cette intégrale double à une intégrale simple. Ting and Lee (1997) avaient appliqué cette méthode

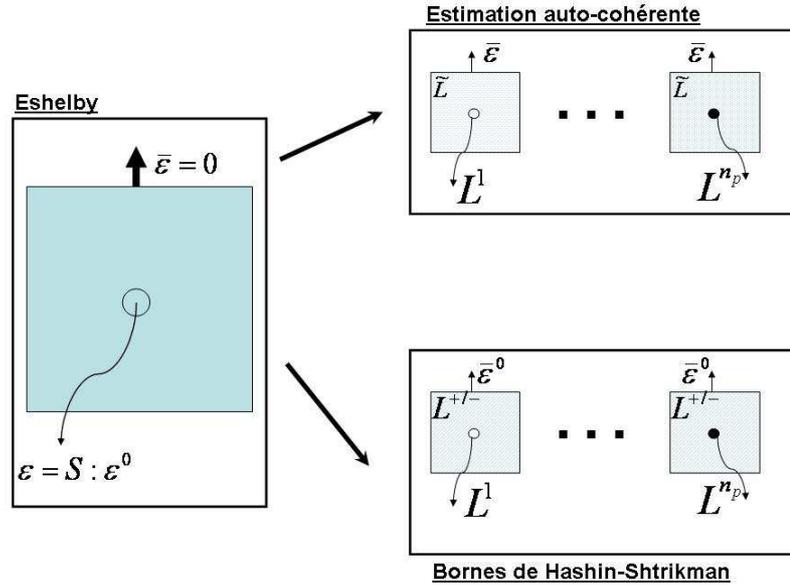


FIG. 2.4 – Une estimation (estimation autocohérente (Kröner (1958))) et des bornes (Hashin and Shtrikman (1963)) dont le calcul utilise la solution du problème d’Eshelby. Pour une déformation macroscopique imposée au bord du VER $\bar{\varepsilon}$, les moyennes par phase des déformations sont égales aux déformations des inclusions représentatives. A noter que dans le cas des bornes de Hashin et Shtrikman, la déformation appliquée loin de l’inclusion $\bar{\varepsilon}^0$ est choisie de façon à assurer que la moyenne des déformations dans chaque phase est égale à la déformation macroscopique imposée. Dans le cas du modèle autocohérent, le module effectif \tilde{L} cherché est solution de $\sum_r L^r : (\mathbf{Q} + L^r)^{-1} = \tilde{L} : (\mathbf{Q} + \tilde{L})^{-1}$, le tenseur du quatrième ordre \mathbf{Q} dépendant de \tilde{L} et du tenseur de polarisation de Hill associé à cette propriété effective et à la forme des inclusions, $\mathbf{Q} = \mathbf{P}^{-1} - \tilde{L}$ (c’est le tenseur d’influence de Hill). La borne supérieure d’Hashin et Shtrikman est obtenue en choisissant $L^{+/-}$ comme la plus grande (au sens des formes quadratiques associées) des rigidités des différentes phases (notée L^+ dans ce qui suit). Cette borne pour le module effectif est donnée par : $L^{HS+} = [\sum_r c_r (\mathbf{Q} + L^r)^{-1}]^{-1} - \mathbf{Q}$, le tenseur du quatrième ordre \mathbf{Q} faisant à nouveau référence au module du milieu infini L^+ et au tenseur de polarisation associé, $\mathbf{Q} = \mathbf{P}^{-1} - L^+$. Inversement, la borne inférieure conduit à choisir la plus faible des rigidités des différentes phases.

pour dériver des expressions explicites de la fonction de Green en fonction des pôles de l’intégrande (les valeurs propres de Stroh). Plus récemment, Suvorov and Dvorak (2002) ont dérivé des expressions explicites du tenseur de polarisation de Hill dans le cas d’inclusions de formes cylindrique ou “disk-shaped” (voir aussi Gruescu *et al.* (2005)). Ma contribution à ce sujet (Masson (2008)) se place dans le cas le plus général possible (symétrie quelconque du milieu infini et inclusion ellipsoïdale). Elle a débuté par l’étude du cas bidimensionnel, nettement plus simple, situation pour laquelle j’ai pu calculer explicitement les différentes composantes du tenseur \mathbf{P} (voir Masson (2008) pour la dé-

monstration et les expressions détaillées). Dans le cas tridimensionnel, les expressions sont certes plus lourdes mais j'ai pu réduire l'intégrale double à une intégrale simple (voir 2.2.3).

2.2.3 Nouvelle expression en 3D

On peut montrer (voir, par exemple, Suvorov and Dvorak (2002))³ que l'expression précédente (2.6) du tenseur de polarisation de Hill est équivalente à :

$$\mathbf{P} = \frac{1}{4\pi} \int_{\|\mathbf{x}\|=1} \mathbf{M}(\boldsymbol{\zeta}\mathbf{x}) dS_{\mathbf{x}}. \quad (2.8)$$

On en déduit que dans les axes principaux de la région ellipsoïdale Ω considérée ($\zeta_{ij} = \frac{1}{a_i} \delta_{ij}$), les composantes du tenseur de polarisation de Hill peuvent être calculées par les intégrales doubles suivantes

$$P_{ijkl} = \frac{1}{4\pi} \int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\phi=0}^{2\pi} M_{ijkl}(\mathbf{y}(\theta, \phi)) \sin(\theta) d\theta d\phi, \quad (2.9)$$

le vecteur \mathbf{y} étant défini par :

$$y_1 = \frac{\sin(\theta)\cos(\phi)}{a_1}, y_2 = \frac{\sin(\theta)\sin(\phi)}{a_2}, y_3 = \frac{\cos(\theta)}{a_3}.$$

L'inversion du tenseur acoustique intervenant dans l'expression de \mathbf{M} revenant à diviser la matrice des co-facteurs par le déterminant de \mathbf{A} , les intégrandes apparaissant dans (2.9) sont en fait des fractions rationnelles dépendant de $(\cos(\phi), \sin(\phi))$ et de $(\cos(\theta), \sin(\theta))$. Si, on considère à présent les fonctions de l'angle ϕ :

$$P_{(\phi)ijkl} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\pi} M_{ijkl}(\theta) \sin(\theta) d\theta, \quad (2.10)$$

(expression dans laquelle la dépendance de l'intégrande vis-à-vis de l'angle ϕ a été omise afin d'alléger les notations), le changement de variables $t = 1/\tan(\frac{\theta}{2})$ permet de réduire l'expression de l'intégrale précédente P_{ϕ} à :

$$P_{(\phi)ijkl} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{+\infty} \frac{t p_{ijkl}(\frac{t^2-1}{2t})}{(1+t^2)^2 q(\frac{t^2-1}{2t})} dt,$$

expression dans laquelle p_{ijkl} et q sont des fonctions polynomiales de degré six dont les coefficients dépendent des différentes composantes du tenseur des modules, de l'angle ϕ

³ Pour passer de l'expression (2.6) à l'expression (2.8), il faut effectuer le changement de variable $\mathbf{x} = \frac{1}{\|\boldsymbol{\zeta}^{-1}\mathbf{w}\|} \boldsymbol{\zeta}^{-1}\mathbf{w}$ et utiliser le fait que $\mathbf{M}(\lambda\mathbf{w}) = \mathbf{M}(\mathbf{w})$, λ étant un scalaire.

et de la forme de l'ellipsoïde ⁴.

Si $Im(z)$ et $Re(z)$ désignent respectivement les parties imaginaire et réelle du nombre

⁴En voici les expressions en fonction des modules L , de l'angle ϕ et des deux vecteurs $\mathbf{n} = (0, 0, \frac{1}{a_3})$ et $\mathbf{m} = (\frac{\cos(\phi)}{a_1}, \frac{\sin(\phi)}{a_2}, 0)$. Le polynôme de degré six $q(z)$ est défini par :

$$\begin{aligned}
q(z) &= \sum_{i=0}^{i=6} q_i z^i, \\
q_6 &= \varepsilon_{mnl} Q_{m1} Q_{n2} Q_{l3}, \\
q_5 &= \varepsilon_{mnl} (Q_{m1} (S_{n2} Q_{l3} + Q_{n2} S_{l3}) + S_{m1} Q_{n2} Q_{l3}), \\
q_4 &= \varepsilon_{mnl} (Q_{m1} (S_{n2} S_{l3} + Q_{n2} T_{l3} + T_{n2} Q_{l3}) + S_{m1} (Q_{n2} S_{l3} + S_{n2} Q_{l3}) + T_{m1} Q_{n2} Q_{l3}), \\
q_3 &= \varepsilon_{mnl} (Q_{m1} (S_{n2} T_{l3} + T_{n2} S_{l3}) + S_{m1} (S_{n2} S_{l3} + Q_{n2} T_{l3} + T_{n2} Q_{l3}) + T_{m1} (Q_{n2} S_{l3} + S_{n2} Q_{l3})), \\
q_2 &= \varepsilon_{mnl} (Q_{m1} T_{n2} T_{l3} + S_{m1} (S_{n2} T_{l3} + T_{n2} S_{l3}) + T_{m1} (Q_{n2} T_{l3} + T_{n2} Q_{l3} + S_{n2} S_{l3})), \\
q_1 &= \varepsilon_{mnl} (S_{m1} T_{n2} T_{l3} + T_{m1} (S_{n2} T_{l3} + T_{n2} S_{l3})), \\
q_0 &= \varepsilon_{mnl} T_{m1} T_{n2} T_{l3},
\end{aligned}$$

avec :

$$\begin{aligned}
Q_{ik} &= L_{ijkl} n_j n_l = L_{i3k3} n_3^2, \\
S_{ik} &= R_{ik} + R_{ki}, \quad R_{ik} = L_{ijkl} n_j m_l = L_{i3k1} m_1 n_3 + L_{i3k2} m_2 n_3, \\
T_{ik} &= L_{ijkl} m_j m_l = L_{i1k1} m_1^2 + (L_{i1k2} + L_{i2k1}) m_1 m_2 + L_{i2k2} m_2^2.
\end{aligned}$$

Le polynome de degré six $p_{ijkl}(z)$ est défini par :

$$\begin{aligned}
p_{ijkl}(t) &= \sum_{u=0}^{u=4} \underbrace{(\hat{A}_{jk}^u n_i n_l + \hat{A}_{ik}^u n_j n_l + \hat{A}_{jl}^u n_i n_k + \hat{A}_{il}^u n_j n_k)}_{p_{(1)ijkl}^u} t^{6-u} \\
&+ \sum_{u=0}^{u=4} (\hat{A}_{jk}^u (n_i m_l + n_l m_i) + \hat{A}_{ik}^u (n_j m_l + n_l m_j) \\
&\quad + \hat{A}_{jl}^u (n_i m_k + n_k m_i) + \hat{A}_{il}^u (n_j m_k + n_k m_j)) t^{5-u} \\
&\quad \underbrace{\hspace{15em}}_{p_{(2)ijkl}^u} \\
&+ \sum_{u=0}^{u=4} \underbrace{(\hat{A}_{jk}^u m_i m_l + \hat{A}_{ik}^u m_j m_l + \hat{A}_{jl}^u m_i m_k + \hat{A}_{il}^u m_j m_k)}_{p_{(3)ijkl}^u} t^{4-u} \\
&= p_{(1)ijkl}^0 t^6 + (p_{(1)ijkl}^1 + p_{(2)ijkl}^0) t^5 + (p_{(1)ijkl}^2 + p_{(2)ijkl}^1 + p_{(3)ijkl}^0) t^4 \\
&\quad + (p_{(1)ijkl}^3 + p_{(2)ijkl}^2 + p_{(3)ijkl}^1) t^3 + (p_{(1)ijkl}^4 + p_{(2)ijkl}^3 + p_{(3)ijkl}^2) t^2 \\
&\quad + (p_{(2)ijkl}^4 + p_{(3)ijkl}^3) t + p_{(3)ijkl}^4
\end{aligned} \tag{2.11}$$

avec :

$$\begin{aligned}
\hat{A}_{ij}^0 &= \frac{1}{2} \varepsilon_{ikl} \varepsilon_{jmn} Q_{km} Q_{ln}, \quad \hat{A}_{ij}^1 = \frac{1}{2} \varepsilon_{ikl} \varepsilon_{jmn} (Q_{km} S_{ln} + S_{km} Q_{ln}), \\
\hat{A}_{ij}^2 &= \frac{1}{2} \varepsilon_{ikl} \varepsilon_{jmn} (Q_{km} T_{ln} + S_{km} S_{ln} + T_{km} Q_{ln}), \quad \hat{A}_{ij}^3 = \frac{1}{2} \varepsilon_{ikl} \varepsilon_{jmn} (S_{km} T_{ln} + T_{km} S_{ln}), \\
\hat{A}_{ij}^4 &= \frac{1}{2} \varepsilon_{ikl} \varepsilon_{jmn} T_{km} T_{ln}.
\end{aligned} \tag{2.12}$$

complexe z , cette dernière intégrale peut être simplifiée à l'aide du théorème des résidus et du lemme de Jordan (voir, par exemple, Carrier *et al.* (1966)) pour donner :

$$P_{(\phi)ijkl} = \frac{1}{4\pi} \left(\operatorname{Im} \left(\frac{{}^i p_{ijkl}(\iota)}{q(\iota)} \right) - \sum_{u=1}^3 \operatorname{Re} \left[\left(2\ln(z_u + \sqrt{1+z_u^2}) - \iota\pi \right) \frac{p_{ijkl}(z_u)}{(1+z_u^2)^{\frac{3}{2}} q'(z_u)} \right] \right), \quad (2.13)$$

(z_1, z_2, z_3) étant les racines complexes avec partie imaginaire positive de l'équation sextique $q(z) = 0$ et $z \rightarrow \ln(z)$ la valeur principale du logarithme naturel.

Finalement, l'expression des différentes composantes du tenseur de polarisation de Hill \mathbf{P} se réduit aux intégrales simples suivantes :

$$P_{ijkl} = \frac{1}{8\pi} \int_0^{2\pi} \left(\operatorname{Im} \left(\frac{{}^i p_{ijkl}(\iota)}{q(\iota)} \right) - \sum_{u=1}^3 \operatorname{Re} \left[\left(2\ln(z_u + \sqrt{1+z_u^2}) - \iota\pi \right) \frac{p_{ijkl}(z_u)}{(1+z_u^2)^{\frac{3}{2}} q'(z_u)} \right] \right) d\phi. \quad (2.14)$$

A noter que cette expression n'est valable que si les racines de la sextique $q(z) = 0$ sont simples. Différentes expressions alternatives sont données dans la plupart des cas dégénérés possibles (Masson (2008)).

2.2.4 Résultats

Si N_ϕ et N_θ désignent respectivement les nombres de pas d'intégration sur les deux angles d'Euler ϕ et θ , le temps de calcul associé à l'intégration usuelle est proportionnel au produit ($N_\phi * N_\theta$) tandis qu'il est proportionnel à N_ϕ avec l'expression réduite proposée. Le rapport des temps de calcul (noté ξ) entre la méthode réduite et la méthode habituelle varie donc en $\frac{1}{N_\theta}$. Néanmoins, il faut souligner que le calcul de l'intégrande associé à la nouvelle expression proposée demande plus d'opérations que le calcul habituel. Une application numérique était donc bien nécessaire pour vérifier l'efficacité de la méthode proposée.

Pour cela, on a considéré une matrice à symétrie cubique ($\frac{L_{1122}}{L_{1111}} = 0.57, \frac{L_{1212}}{L_{1111}} = 0.49$) et une inclusion sphéroïdale ($a_2 = a_3 = 1$), l'anisotropie étant contrôlée par le paramètre géométrique a_1 . Toutes les opérations d'intégration sont effectuées par la méthode des trapèzes avec les mêmes exigences de précision. Pour différents rapports a_1/a_3 , le nombre d'intégrations nécessaires pour atteindre le niveau de précision exigé (N_ϕ, N_θ) a été déterminé (résultats reportés dans le tableau 2.1). Comme attendu, plus l'anisotropie est forte, plus ce nombre de pas est important. Nous avons aussi reporté dans le tableau 2.1 le ratio des temps de calcul ξ . On constate tout d'abord que, quand $a_1/a_3 = 1$, ξ est supérieur à $1/N_\theta = 1/32 \approx 0,03$. Ce résultat montre bien que l'intégrande associé à la nouvelle expression nécessite plus d'opérations (approximativement cinq fois plus) que

l'intégrande associé à l'expression usuelle mais reste plus efficace qu'une intégration numérique (ξ reste inférieur à 1!). Par ailleurs, on retrouve bien que ξ dépend linéairement de $1/N_\theta$ et que ce rapport décroît significativement quand le rapport de forme a_1/a_3 croît de 1 à 100. Ces résultats mettent bien en évidence l'efficacité de la méthode proposée, en particulier, lorsque l'anisotropie devient forte.

Ici, l'anisotropie était contrôlée par la forme de l'ellipsoïde. Cependant, des situations de forte anisotropie sont aussi rencontrées dans bien d'autres applications comme l'homogénéisation de matériaux présentant un comportement non linéaire (voir, par exemple, les travaux de Ghahremani (1977)). L'apport de la méthode proposée reste donc très général.

TAB. 2.1 – Nombre de pas d'intégration (N_ϕ, N_θ) et rapport des temps de calcul (ξ) en fonction du paramètre d'anisotropie a_1/a_3

a_1/a_3	1	10	100
N_ϕ	64	256	1024
N_θ	32	128	512
ξ	0,16	0,04	0,011

2.2.5 Conclusions

Comme illustré dans le paragraphe précédent, le gain sur le temps de calcul de ces nouvelles expressions est significatif, en particulier dans des situations de fortes anisotropies. Les nouvelles expressions proposées sont donc d'un grand intérêt pour la mise en œuvre numérique des méthodes d'homogénéisation.

Par ailleurs, parmi les perspectives de travaux sur cette question, on peut citer l'étude des cas particuliers (le cas incompressible, par exemple, qui est utile pour l'étude des milieux hétérogènes viscoplastiques) ainsi que l'extension aux expressions en vitesse du tenseur \mathbf{P} (Suvorov and Dvorak (2002)). Ces dernières expressions permettent de traiter les situations pour lesquelles une des phases voit ses propriétés élastiques évoluer avec le temps (par l'intermédiaire de la température dans le cas d'un chargement thermomécanique par exemple).

Les nouvelles expressions proposées pourraient aussi permettre de calculer plus efficacement les moments d'ordre deux des champs microscopiques (par exemple la moyenne de $\sigma_{ij}\sigma_{kl}$ sur une des phases constituant le VER), quantité d'intérêt pour la modélisation des comportements non linéaires comme nous le verrons dans le chapitre 4. Pour les méthodes d'estimation courantes (modèle autocohérent par exemple), ce calcul des moments d'ordre deux nécessite effectivement de dériver le tenseur de polarisation de Hill par rapport au tenseur des modules élastiques attaché au milieu infini (voir Brenner *et al.* (2004) pour plus de détails). On pourrait donc tirer profit de l'expression réduite (2.14) (ou de l'expression établie dans le cas bidimensionnel dans Masson (2008)), pour dériver directement la relation $\mathbf{P}(\mathbf{L})$. Pour une composante L_{mnpq} du tenseur des modules,

cette dérivée nécessitera nécessairement de calculer $\frac{\partial z_s}{\partial L_{mnpq}}$, le triplet (z_1, z_2, z_3) désignant les racines complexes de la sextique définie dans la section ci-dessus. Pour calculer ces quantités, il suffit de remarquer que :

$$s = 1 \dots 3 : \quad q_0 + \sum_{i=1}^{i=6} q_i z_s^i = 0,$$

de sorte que :

$$\left(\sum_{i=1}^{i=6} i q_i z_s^{i-1} \right) \frac{\partial z_s}{\partial L_{mnpq}} = - \sum_{i=0}^{i=6} \frac{\partial q_i}{\partial L_{mnpq}} z_s^i.$$

A noter enfin que la méthode développée dans ce travail a depuis été employée (Barthélémy (2009)) afin de calculer les propriétés effectives de milieux élastiques fissurés.

2.3 Calculs de micro-structure sur maillages libres

2.3.1 Motivations

Les calculs de VER (par la méthode des éléments finis par exemple) présentent un avantage majeur par rapport aux méthodes d'homogénéisation : c'est un problème de structure qui présente certes des conditions aux limites particulières (conditions en contrainte ou en déformation homogènes au bord du VER ou conditions de périodicité) mais qui peut être traité comme un problème de structure habituel tel que défini par la minimisation (2.2). C'est pourquoi un mécanicien des structures s'intéressant aussi à la mécanique des matériaux hétérogènes saura aisément appréhender un tel calcul.

Cette apparente (et relative) simplicité cache en réalité des difficultés qu'il ne faut pas oublier. En pratique, un calcul de VER est limité par un nombre de degrés de liberté maximal, dépendant de la machine utilisée (et donc de l'année du calcul ...), de la stratégie de calcul (parallélisation, ...), ... Pour un trajet de chargement donné, on peut en particulier se demander quelle est l'influence de la taille du VER (nombre de particules pour un composite, nombre de grains pour un agrégat, ...) sur le résultat final. Par ailleurs, lors de l'étape de représentation du matériau hétérogène considéré, on va établir un modèle de micro-structure et donc faire des hypothèses (forme des phases, taille minimale, ...). Quelles sont les conséquences de ces hypothèses sur le résultat du calcul ?

Ces difficultés étant intimement liées à la représentation discrète de la micro-structure (mailles ou voxel), Toulemonde (2006) propose de dissocier la question du maillage de celle du calcul, comme d'autres auteurs auparavant (voir Zohdi and Wriggers (2001) dans le cas élastique linéaire ou même Barbe *et al.* (2001) dans le cas d'agrégats de cristaux élastoviscoplastiques). Si, pour simplifier, on considère un matériau biphasé constitué d'une matrice (phase notée (m) par la suite) et d'inclusions (notées (i)). La méthodologie proposée initialement dans Toulemonde (2006) consiste à mailler (en vue d'un calcul éléments finis) une micro-structure et affecter à ce maillage :

- mailles contenues dans la matrice : module élastique de la matrice (\mathbf{L}^m) ;
- mailles contenues dans les inclusions : module élastique des inclusions (\mathbf{L}^i) ;

Reste à définir le comportement des mailles intermédiaires (celles ayant des nœuds dans la matrice et les inclusions). Dans ce qui suit, nous supposons qu'il n'y a qu'un seul type de mailles intermédiaires et nous notons V_2 , le volume constitué par les mailles intermédiaires (fraction volumique c_2) et V_1 celui constitué des mailles dont le comportement est clairement défini (fraction volumique $c_1 = 1 - c_2$).

Le choix le plus naturel consiste à affecter à ces mailles intermédiaires le comportement de la phase la plus molle ou celui de la phase la plus rigide. Le problème de structure est alors bien posé et on obtient ainsi un encadrement du comportement effectif. C'est le Strengthening Theorem établi par Hill (1963). Or, on connaît dans ce volume V_2 les fractions volumiques des phases en présence. On aimerait pouvoir utiliser cette information pour améliorer l'encadrement du comportement effectif. Les principaux résultats obtenus sur cette question sont détaillés dans le paragraphe suivant.

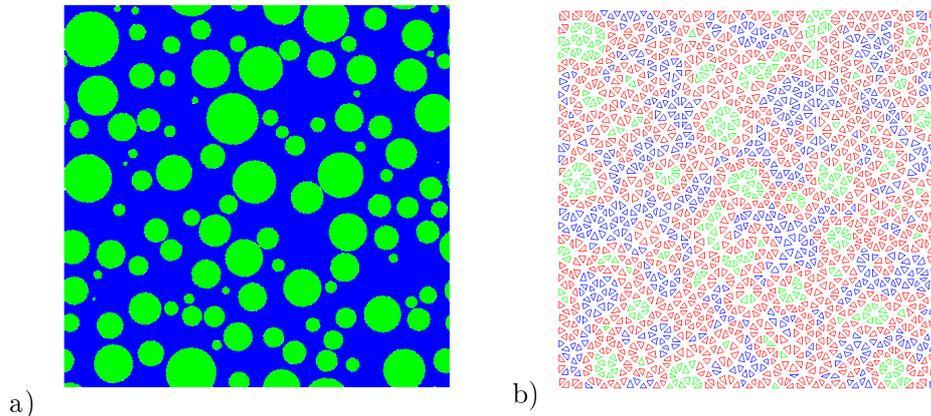


FIG. 2.5 – Illustration dans le cas bidimensionnel de la méthodologie proposée : la microstructure du composite biphasé considéré est représentée figure de gauche. Après projection sur un maillage régulier comptant 2000 éléments triangulaires, on obtient des éléments bien définis (bleus pour les éléments dans la matrice et verts pour les éléments dans les inclusions) et des éléments “intermédiaires” (rouge). Ces éléments sont représentés (vue éclatée) sur la figure de droite. Le maillage étant grossier, la proportion d’éléments intermédiaires est loin d’être négligeable.

2.3.2 De nouvelles bornes

Pour décrire le comportement linéaire élastique du volume V_2 , il s’est avéré fructueux d’adopter un choix plus général que celui retenu dans Toulemonde (2006). Ainsi, plutôt que d’affecter un module arbitraire à ce volume, nous introduisons deux degrés de liberté : le module et la polarisation. Ainsi, dans le volume V_2 , le comportement adopté est :

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{L}^0 : \boldsymbol{\varepsilon} + \mathbf{p}^0, \quad (2.15)$$

avec \mathbf{L}^0 et \mathbf{p}^0 homogènes dans le volume V_2 . Il nous faut souligner ici que nous adoptons le même point de départ que la méthode proposée par le passé par Hashin et Shtrikman (voir Willis (1981)) pour encadrer le comportement effectif de matériaux hétérogènes : on introduit une polarisation qui va nous permettre de majorer l’écart entre le comportement réel et son approximation (2.15). Néanmoins, cette méthode générale est appliquée à un problème nouveau, ce qui conduit aux différences suivantes :

- cette approximation est limitée à une sous partie du VER seulement (volume V_2) ;
- la polarisation est la même pour chaque phase de ce sous-volume ;
- la seule information morphologique que l’on souhaite utiliser est la fraction volumique des deux phases dans V_2 .

Nous ne détaillons pas les différentes étapes du raisonnement (voir Toulemonde *et al.* (2008) pour le détail) mais revenons sur les principaux résultats obtenus. Tout d’abord, si :

$$\mathbf{L}^0 > \mathbf{L}^+ = \max_r(\mathbf{L}^r),$$

(l'inégalité devant être comprise au sens des formes quadratiques associées à ces tenseurs d'ordre quatre), on obtient l'encadrement général suivant :

$$\begin{aligned} \overline{W}(\overline{\boldsymbol{\varepsilon}}) \leq & \min_{\boldsymbol{\varepsilon} \in K} \left(\frac{c_1}{|V_1|} \int_{V_1} w(x, \boldsymbol{\varepsilon}) dx + \frac{c_2}{|V_2|} \int_{V_2} \left(\frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon}(x) : \mathbf{L}^0 : \boldsymbol{\varepsilon}(x) + \mathbf{p}^0 : \boldsymbol{\varepsilon}(x) \right) dx \right) \\ & + \frac{1}{2} \mathbf{p}^0 : \left(\frac{c_2}{|V_2|} \int_{V_2} (\mathbf{L}^0 - \mathbf{L}(x))^{-1} dx \right) : \mathbf{p}^0, \end{aligned} \quad (2.16)$$

quel que soit le choix de la polarisation \mathbf{p}^0 et du module $\mathbf{L}^0 > \mathbf{L}^+$. Le Strengthening Theorem constitue d'ailleurs un cas particulier de cette nouvelle majoration, obtenue pour le choix d'une polarisation nulle dans le volume V_2 . Dès que la polarisation est non nulle, on constate que le terme de droite de cet encadrement :

$$\frac{1}{2} \mathbf{p}^0 : \left(\frac{c_2}{|V_2|} \int_{V_2} (\mathbf{L}^0 - \mathbf{L}(x))^{-1} dx \right) : \mathbf{p}^0$$

est non nul et dépend des fractions volumiques des différentes phases sur le volume V_2 ... l'objectif affiché est bien atteint. Il nous reste à en tirer profit !

La question qui suit est alors : quels sont les choix pour $(\mathbf{p}^0, \mathbf{L}^0)$ permettant d'obtenir l'encadrement le plus resserré ? Pour un choix donné de module \mathbf{L}^0 , la polarisation optimale doit satisfaire à la relation :

$$\int_{V_2} \boldsymbol{\varepsilon}(x) dx + \left(\int_{V_2} (\mathbf{L}^0 - \mathbf{L}(x))^{-1} dx \right) : \mathbf{p}^0 = 0. \quad (2.17)$$

expression dans laquelle le champ de déformation $\boldsymbol{\varepsilon}$ est le champ solution du problème de structure suivant :

- $\overline{\boldsymbol{\varepsilon}}$ appliquée aux bords du VER ;
- comportement "réel" dans V_1 ;
- souplesse \mathbf{L}^0 et polarisation \mathbf{p}^0 dans V_2 .

C'est un problème de structure bien posé (dont on peut calculer une solution approchée par un calcul éléments finis !). Par superposition des solutions à des problèmes élémentaires ($\overline{\boldsymbol{\varepsilon}}$ appliquée aux bords du VER et polarisation nulle, puis bords libres et polarisations unitaires et indépendantes dans le volume V_2 , ...), on peut facilement déduire de l'égalité précédente la polarisation optimale pour un module \mathbf{L}^0 donné (voir Toulemonde *et al.* (2008)) pour l'expression de cette polarisation optimale.

Le choix de \mathbf{L}^0 s'est avéré moins intuitif. Il nous faut tout d'abord remarquer que la condition d'optimalité sur la polarisation permet d'établir que les moyennes sur le volume V_2 des déformations et des contraintes sont liées par :

$$\int_{V_2} \boldsymbol{\sigma}(x) dx = \hat{\mathbf{L}}^0 : \int_{V_2} \boldsymbol{\varepsilon}(x) dx \quad \text{avec} \quad \hat{\mathbf{L}}^0 = \mathbf{L}^0 + \left(\frac{1}{|V_2|} \int_{V_2} (\mathbf{L}(x) - \mathbf{L}^0)^{-1} dx \right)^{-1} \quad (2.18)$$

le tenseur du quatrième ordre $\hat{\mathbf{L}}^0$ étant appelé le "module effectif sur le volume V_2 ". L'avantage de cette expression repose sur le fait qu'elle ne dépend plus que du module

dans le volume V_2 . On peut même montrer (voir Toulemonde *et al.* (2008)) que c'est une fonction décroissante de ce module \mathbf{L}^0 et telle que :

- $\lim_{\mathbf{L}^0 \rightarrow \max_r(\mathbf{L}^r)} \hat{\mathbf{L}}^0 = \max_r(\mathbf{L}^r)$, cette situation correspondant à une polarisation optimale nulle (on retrouve le Strengthening Theorem) ;
- $\lim_{\mathbf{L}^0 \rightarrow \infty} \hat{\mathbf{L}}^0 = \langle \mathbf{L}^r \rangle_2$, limite qui correspond à la borne de Voigt définie sur le volume V_2 et qui est inférieure à $\max_r(\mathbf{L}^r)$.

Ce module effectif sur le volume V_2 traduisant sa rigidité moyenne, on constate que c'est le choix d'un module \mathbf{L}^0 infiniment rigide (avec la polarisation optimale associée !) qui conduira à une réponse moyenne du volume V_2 la plus souple. C'est donc vers ce choix empirique, par ailleurs confirmé par les simulations réalisées, que nos travaux se sont orientés. Pour faire un choix moins arbitraire, il faudrait utiliser la condition d'optimalité portant sur le module \mathbf{L}^0 , qui s'écrit :

$$\int_{V_2} \boldsymbol{\varepsilon}(x) \otimes \boldsymbol{\varepsilon}(x) dx - \mathbf{p}^0 : \left(\int_{V_2} (\mathbf{L}^0 - \mathbf{L}(x))^{-2} dx \right) \otimes \mathbf{p}^0 = \mathbf{0}. \quad (2.19)$$

la polarisation optimale \mathbf{p}^0 étant solution de (2.17) tandis que $\boldsymbol{\varepsilon}$ désigne toujours le champ de déformation solution du problème de structure bien posé défini plus haut. En pratique, cette relation est relativement lourde à exploiter avec des analyses éléments finis (itérations sur \mathbf{L}^0 !).

Bien entendu, le choix $\mathbf{L}^0 < \mathbf{L}^- = \min_r(\mathbf{L}^r)$ permet d'établir une minoration de l'énergie de déformation effective par des arguments similaires (le module effectif dans ce cas tend vers la borne de Reuss sur le volume V_2 pour un module \mathbf{L}^0 tendant vers zéro !) de sorte qu'on obtient bien des bornes. Dans la référence Toulemonde *et al.* (2008), ces bornes sont appelées "bornes de type Hashin et Shtrikman" pour des raisons évidentes.

2.3.3 Illustration

Nous pouvons illustrer ces résultats théoriques en considérant une sphère creuse (matrice de caractéristiques élastiques isotropes (μ, k)) soumise à une pression extérieure $\bar{\boldsymbol{\sigma}} = -p_e \boldsymbol{\delta}$. Nous retrouverons ce problème de la sphère creuse dans la section 3.1.1. Dans le cas considéré ici (voir Figure 2.6), le volume V_2 correspond à une calotte sphérique définie par $a - e \leq r \leq a + e$ (a le rayon de la cavité, e l'épaisseur de la calotte). On ne connaît dans cette zone que :

- la fraction volumique de vide $\left(\frac{a^3 - (a - e)^3}{b^3} \right)$;
- la fraction volumique de matrice $\left(\frac{(a + e)^3 - a^3}{b^3} \right)$.

La fraction volumique de cette zone mal définie est égale à $c_2 = \frac{(a + e)^3 - (a - e)^3}{b^3}$. On peut donner deux types d'interprétation à ce volume V_2 :

- il représente des mailles situées à l'interface des deux phases et dont le comportement est mal défini. La solution exacte est donc obtenue lorsque le paramètre (numérique) c_2 tend vers zéro ;

- il représente une zone physiquement mal définie, par exemple une zone de la matrice endommagée, le front de cette zone endommagée n'étant pas sphérique mais irrégulier dans l'intervalle $[a - e; a + e]$. Le paramètre e (ou c_2) est alors une donnée du problème. Il s'agit alors d'encadrer au mieux les propriétés apparentes de la sphère creuse, ce paramètre étant fixé.

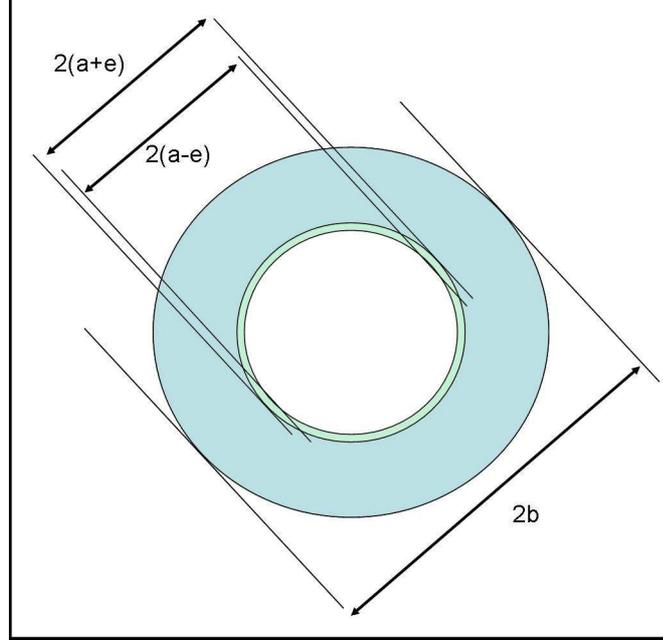


FIG. 2.6 – Problème de la sphère creuse avec une interface $a - e \leq r \leq a + e$ mal définie.

Lorsque $c_2 = 0$, la solution de ce problème élastique linéaire est bien connue dans le cas de constituants isotropes (voir par exemple Timoshenko and Goodier (1951)). Le champ de contrainte solution obéit à la symétrie (sphérique) du problème et s'écrit :

$$\begin{cases} \sigma_{rr}(r) = A_1 - 2\frac{A_2}{r^3} \\ \sigma_{\theta\theta}(r) = \sigma_{\phi\phi}(r) = A_1 + \frac{A_2}{r^3} \end{cases} \quad (2.20)$$

(r désigne le rayon : $a \leq r \leq b$). On peut facilement vérifier que ce champ de contrainte satisfait aux équations d'équilibre. Il satisfait par ailleurs aux conditions aux limites si :

$$\begin{cases} A_1 = \frac{1}{1-f}(-pe) \\ A_2 = \frac{a^3}{2(1-f)}(-pe) \end{cases} \quad , \quad (2.21)$$

f désignant la porosité, $f = \left(\frac{a}{b}\right)^3$. Pour un comportement élastique isotrope, on peut calculer le champ de déformation puis de déplacement solution du problème élastique posé :

$$\mathbf{u}(r) = \left(\frac{A_1}{3k}r + \frac{A_2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \right) \mathbf{e}_r, \quad (2.22)$$

\mathbf{e}_r désignant le vecteur unitaire dans la direction radiale. On peut en déduire la déformation (notée $\bar{\varepsilon}_m \boldsymbol{\delta}$) au bord extérieur du volume V selon :

$$\bar{\varepsilon}_m = \frac{(-p_e)}{1-f} \left[\frac{1}{3k} + \frac{f}{4\mu} \right],$$

expression dont on en déduit la compressibilité (apparente) de cette sphère creuse qui s'élève à :

$$k^a = \frac{1-f}{\frac{1}{k} + \frac{3f}{4\mu}}. \quad (2.23)$$

Pour une épaisseur e , les bornes obtenues par le Strengthening Theorem sont faciles à calculer : il suffit de remplacer la porosité f dans l'expression précédente (2.23) par $f^+ = \left(\frac{a+e}{b}\right)^3$ ou $f^- = \left(\frac{a-e}{b}\right)^3$ pour obtenir les bornes inférieures et supérieures, respectivement. Le calcul des bornes de type Hashin-Shtrikman nécessitent des développements analytiques légèrement plus lourds que nous ne détaillerons pas ici⁵. Nous nous contentons de présenter les principaux résultats ainsi obtenus, notamment avec la Figure 2.7-a qui nous montre l'évolution en fonction du paramètre c_2 des nouvelles bornes dérivées ci-dessus. Nous constatons tout d'abord que la borne de type Hashin-Shtrikman inférieure est identique à celle dérivée par le Strengthening Theorem. Ce n'est pas suprenant car une des deux phases (les cavités) est infiniment souple. En revanche, la borne supérieure de type Hashin-Shtrikman obtenue améliore très significativement la borne supérieure obtenue par le Strengthening Theorem. Pour une fraction volumique c_2 s'élevant à 25%, la borne supérieure (normalisée par la compressibilité apparente de la sphère creuse k^a) passe de 10% (ST) à quelques pourcents (HST), ce qui est très satisfaisant.

La figure 2.7-b permet par ailleurs d'illustrer dans le cas considéré la discussion précédente concernant le choix des caractéristiques \mathbf{L}^0 :

- quand \mathbf{L}^0 tend vers le module de la matrice, la borne de type Hashin Shtrikman tend vers la borne obtenue par le Strengthening Theorem ;
- la borne de type Hashin Shtrikman est une fonction décroissante de \mathbf{L}^0 .

⁵Quelques indications pour mener ce calcul : on considère une sphère creuse constituée d'un trou $0 \leq r \leq a - e$, d'une calotte sphérique ($a - e \leq r \leq a + e$) de modules (μ^0, k^0) et de la matrice ($a + e \leq r \leq b$). On résout alors deux problèmes mécaniques distincts : dans un cas, cette sphère creuse est soumise à une pression tandis que dans l'autre cas le chargement est constitué d'une polarisation $\mathbf{p}^0 = p^0 \boldsymbol{\delta}$ appliquée uniformément sur le volume V_2 , la frontière extérieure de la sphère creuse étant libre de contrainte. Pour ces deux problèmes les champs de déplacement, déformation et contrainte sont dans chaque couche d'une forme similaire à la solution de la sphère creuse (par exemple déplacement radial variant comme $\alpha_1 r + \frac{\alpha_2}{r^2}$). L'écriture des conditions aux limites et des conditions de continuité du déplacement radial et du vecteur contrainte permet, pour chaque problème, de déterminer les 4 constantes inconnues. On en déduit la polarisation optimale (équation (2.17)), scalaire dépendant des caractéristiques du volume V_2 (μ^0, k^0), du chargement p_e et des paramètres géométriques a, e, b ; puis la réponse effective (déformation volumique moyenne) du problème initial.

Au final, c'est bien le choix d'un volume V_2 infiniment raide qui permet d'obtenir la borne supérieure de type Hashin Shtrikman la plus resserrée. Nous nous sommes donc assurés dans ce cas particulier que le choix empirique proposé est bien le plus pertinent.

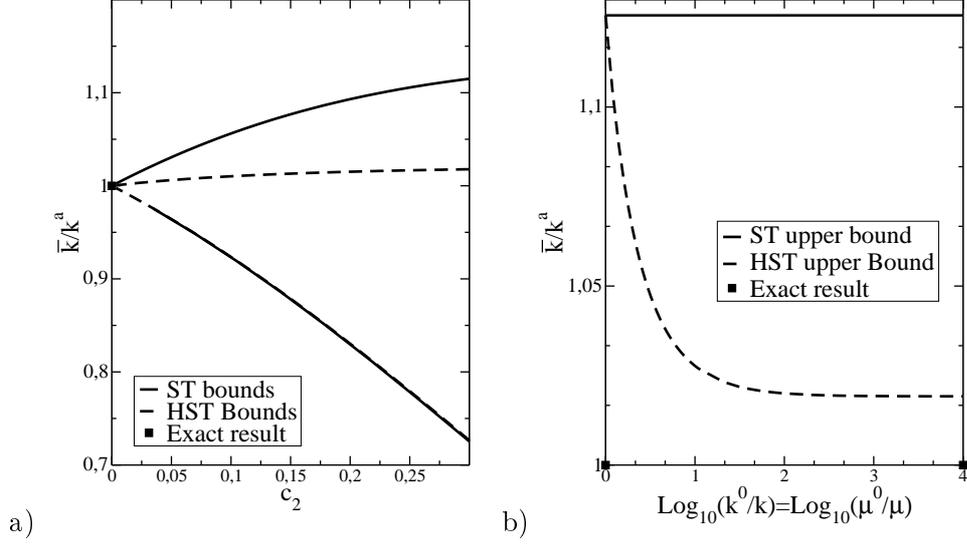


FIG. 2.7 – Compressibilité apparente de la sphère creuse normalisée par la solution de référence ($\frac{k}{\mu} = 3$, $f = 0, 1$). a) Evolutions des bornes de Hill (ST) et des nouvelles bornes (HST) proposées en fonction de la fraction volumique c_2 de la zone “grise”. b) Evolution de la nouvelle borne supérieure proposée (HST) en fonction des caractéristiques élastiques L^0 du volume V_2 ($c_2 = 0,38$) et comparaison avec la borne de Hill (ST) et le résultat exact.

2.3.4 Conclusions

Comme l’illustration précédente, les calculs menés par J. El-Gharib et reportés dans Toulemonde *et al.* (2008) montrent dans deux situations distinctes (calcul de cellule et micro-structure 3D) que les choix proposés conduisent bien à une amélioration significative de l’encadrement des propriétés effectives. A titre d’illustration dans le cas du béton (contraste de l’ordre de 3 entre les propriétés des renforts et de la matrice), l’incertitude sur les propriétés effectives élastiques passe de $\pm 36\%$ (Strengthening Theorem) à $\pm 13\%$ (nos nouvelles bornes).

Ce calcul d’une réalisation de micro-structure tridimensionnelle du béton illustre bien les forces et les faiblesses de la méthode proposée. Parmi les points forts de la méthodologie, on trouve :

- sa capacité à simuler de grands VER avec un nombre de degrés de liberté relativement réduit (près d’un million d’éléments pour représenter 2000 cailloux dans un VER, la taille du plus petit cailloux étant 5 fois inférieure à celle du VER !);

– sa capacité (potentielle) à ne pas simplifier a priori la micro-structure considérée. Ainsi, les cailloux ont été représentés par des boules jusqu’à présent mais, puisqu’on ne maille pas les interfaces, rien n’empêche de les représenter par des polyèdres ; En contrepartie, la “zone d’ombre” (le volume V_2) est, de loin, non négligeable (c_2 est de l’ordre de 40%), ce qui rend encore difficile l’application de la méthodologie à des problèmes plus contrastés (exemple : fluage stationnaire du béton), les bornes risquant alors d’être trop éloignées. Toutefois, de nombreuses piste d’améliorations ont été identifiées et font actuellement l’objet de travaux.

Enfin, l’illustration développée dans la section précédente montre que le champ d’application des nouvelles bornes proposées dépasse les préoccupations initiales (méthodologie Benhur de maillage libre de microstructures de béton). Dans le cas de la sphère creuse, la couche définissant le volume V_2 peut aussi représenter une zone physiquement mal définie, soit parce que la frontière porosité-matrice est déterminée géométriquement à $\pm e$ près (couches de corrosion non sphériques, précision expérimentale, ...), soit parce que des mécanismes de dégradation (endommagement, irradiation, altération chimique, ...) ne permettent que de déterminer une porosité locale dans cette zone. Dans tous ces cas, le paramètre e (ou c_2) et la fraction volumique de porosité dans ce volume V_2 permettent néanmoins d’encadrer le comportement apparent de la structure et nous avons vu que les nouvelles bornes proposées conduisent bien à un encadrement plus resserré que celui déduit des bornes de Hill.

2.4 Conclusions

Même si les deux problèmes abordés dans les sections 2.2 et 2.3 font appel à la notion de déformations libres ou, ce qui est équivalent, à des polarisations, elles relèvent de méthodologies d’homogénéisation différentes (méthode semi-analytique d’un coté, calcul par éléments finis de réalisations de VER de l’autre). Néanmoins, ce travaux ont *in fine* le même objectif : encadrer ou estimer des propriétés effectives.

Pour ces deux problèmes, les perspectives sont nombreuses. Dans le cas du calcul du tenseur d’Eshelby, le cas incompressible mériterait en particulier de faire l’objet d’un travail similaire. Par ailleurs, des pistes précises d’extension de la méthodologie proposée au calcul des moments d’ordre deux (quantités mécaniques dont nous reparlerons dans le chapitre 4) ont été définies dans la section 2.2.5.

Dans le cas des calculs de VER, l’amélioration des bornes proposées fait l’objet d’investigations complémentaires. Par ailleurs, la question des estimations dans le cas linéaire ainsi que celle de l’extension au non linéaire de la méthodologie proposée restent des questions ouvertes. Enfin, nous avons souligné dans la section 2.3.4 que les nouvelles bornes proposées pouvaient plus généralement être utilisées pour encadrer les propriétés effectives d’un VER dans lequel des zones volumiques sont (géométriquement ou physiquement) mal définies. L’utilisation des bornes proposées dans cette situation nécessite de connaître la fraction volumique des phases en présence dans ces zone “mal définies”.

La viscoélasticité linéaire

Le traitement classique (pour l'homogénéisation) de la viscoélasticité linéaire repose sur le théorème de correspondance associé à la transformée de Laplace. Ce traitement dont le principe est rappelé en section 3.1 pose en pratique deux difficultés :

- l'inversion de la transformée de Laplace est en général lourde à mettre en œuvre ;
- le théorème de correspondance conduit à une formulation par noyau intégral de la loi de comportement effectif, formulation nettement moins commode que les formulations par variables internes couramment utilisées dans les codes éléments finis.

Dans les sections 3.2 et 3.3, je reviens sur les éléments de réponse apportés à ces deux questions : ce sont tout d'abord des travaux menés en collaboration avec R. Brenner, O. Castelnau et A. Zaoui (section 3.2) qui ont débouché sur une inversion efficace et rapide de la transformée de Laplace-Carson. L'objet de la section 3.3 est de montrer que l'inversion classique par collocation revient de fait à adopter une formulation par variables internes. Ce travail a été effectué en collaboration avec Jean-Marc Ricaud. Il a débouché sur un modèle simple et robuste, qualités qui nous ont permis d'envisager son intégration dans un code éléments finis afin de l'appliquer au calcul de structures (travaux en cours). Enfin, nous revenons dans la section 3.4 sur une approche simplifiée, l'approche par déformations libres homogènes, pour en montrer les limites.

Dans ce chapitre, nous considérons un VER V d'un matériau hétérogène dont les constituants possèdent un comportement viscoélastique linéaire. En chaque point de ce VER, le comportement de chacune des phases d'indice (s) est caractérisé par la relation intégrale suivante ¹ :

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t) = \int_{-\infty}^t \mathbf{L}^s(t, u) : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{x}, u) du = \int_{-\infty}^t \mathbf{L}^s(t, u) : d\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}, u).$$

¹La dérivée sous l'intégrale doit être interprétée au sens des distributions pour tenir compte des éventuels sauts de déformation.

Le comportement de chaque phase d'indice (s) est donc caractérisé par une fonction de relaxation, tenseur d'ordre quatre fonction du temps notée $\mathbf{L}^s(t)$ ($1 \leq s \leq n_p$). $L_{ijkl}^s(t, \tau)$ désigne la composante (ij) de l'état de contrainte à l'instant t résultant de l'application à partir de l'instant τ ($\tau \leq t$) d'un état de déformation dont l'unique composante non nulle est la composante (kl) qui vaut 1.

Cette forme intégrale est très générale (elle découle des principes de superposition et de causalité). Nous allons faire l'hypothèse supplémentaire d'un comportement non vieillissant de chacune des phases constituant le VER considéré (nous reviendrons plus loin sur cette notion de vieillissement), propriété qui mathématiquement s'écrit :

$$1 \leq s \leq n_p : \quad \mathbf{L}^s(t, \tau) = \mathbf{L}^s(t - \tau).$$

La sollicitation imposée à cet élément de volume est par ailleurs nulle pour des instants antérieurs à l'instant $t = 0$, de sorte qu'en chaque point de ce VER, la déformation et la contrainte sont nulles pour $t < 0$. Dans ce cas, la relation de comportement en un point \mathbf{x} d'une phase d'indice (s) s'écrit :

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t) = \int_0^t \mathbf{L}^s(t - u) : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{x}, u) du.$$

Le membre de droite de la précédente relation est une intégrale de Stieltjes. On adopte la convention de notation suivante pour représenter de façon concise cette intégrale par la suite :

$$[\mathbf{L}^s \star \boldsymbol{\varepsilon}](t) = \int_0^t \mathbf{L}^s(t - u) : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{x}, u) du.$$

Pour des comportements élastiques linéaires (voir chapitre 2), nous avons défini l'énergie potentielle du VER (relation (2.2)). Dans le cadre de la viscoélasticité linéaire, une quantité équivalente est définie par :

$$\overline{W}(t) = \frac{1}{2|V|} \int_V [[\mathbf{L}(\mathbf{x}) \star \boldsymbol{\varepsilon}] \star \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x})](t) dx, \quad (3.1)$$

pour une histoire de déformation macroscopique $\overline{\boldsymbol{\varepsilon}}(\tau)$ imposée aux bords du VER ($0 \leq \tau \leq t$).

Dans cette expression, pour tout instant (τ) de l'intervalle de temps $[0; t]$, $\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}, \tau)$ désigne le champ de déformation dérivant d'un champ de déplacement cinématiquement admissible avec la déformation macroscopique $\overline{\boldsymbol{\varepsilon}}(\tau)$ ($0 \leq \tau \leq t$). Si les fonctions de relaxation des différentes phases constituant le VER respectent les symétries majeures, i.e. :

$$1 \leq s \leq n_p : \quad L_{ijkl}^s = L_{klij}^s,$$

alors la solution cherchée (l'histoire du champ de déplacement sur l'intervalle de temps considéré) rend stationnaire la quantité définie dans la relation (3.1) (Mandel (1966)).

3.1 Rappels : le théorème de correspondance

Pour effectuer ces rappels, je préfère partir d'un cas particulier pour illustrer les avantages et les limites de l'emploi du théorème de correspondance. Le lecteur pourra consulter par exemple Mandel (1966) (annexe XXI) pour une présentation générale de la viscoélasticité linéaire et du théorème de correspondance. Ce cas particulier présente aussi l'intérêt d'étudier par un modèle simple l'effet du gonflement d'irradiation sur le comportement mécanique d'une pastille combustible : dans certaines situations (températures supérieures à 1000°C , approximativement), des petites bulles de gaz se forment au sein du combustible. Les pastilles combustibles étant le siège de la réaction nucléaire, les fissions nucléaires créent des produits de fission et, en particulier, des produits de fission gazeux qui vont se concentrer dans ces bulles de gaz (voir Figure 3.1). Ces bulles de gaz sont alors soumises à deux effets contradictoires :

- l'apport en produits de fission gazeux contribuent à augmenter la pression dans ces bulles. La pastille combustible pouvant se déformer viscoplastiquement aux températures atteintes dans le combustible, les bulles vont alors croître ;
- la partie centrale de la pastille combustible est plus chaude que sa périphérie, ce qui induit des dilatations différentielles : le centre de la pastille est donc le siège de contraintes "thermiques" de compression. Et comme les bulles apparaissent dans cette zone en compression (là où les températures sont les plus chaudes), l'effet de structure résultant sur la matrice entourant les bulles est une compression qui tend donc à diminuer la taille de ces bulles.

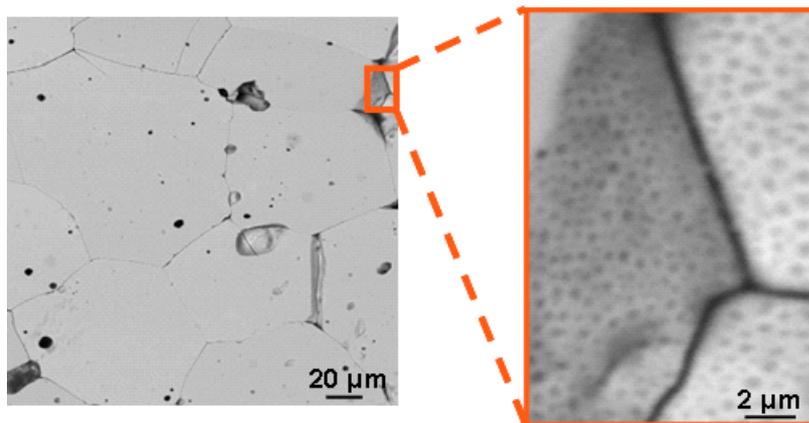


FIG. 3.1 – Céramographie d'une pastille combustible (dioxyde d'Uranium) irradiée révélant la présence de bulles intragranulaires (figure tirée de Julien (2008)).

3.1.1 Le problème de la sphère creuse sous pression

On peut représenter schématiquement ces effets contradictoires en représentant le combustible et les bulles par une sphère creuse de rayon intérieur et extérieur a et b ,

respectivement. La fraction volumique de bulle est donc égale à $f = (\frac{a}{b})^3$. La pression $p_i(t)$ appliquée en paroi interne de cette sphère creuse représente la poussée des produits de fission sur le combustible qui s'accumulent dans ces bulles, tandis que la pression $p_e(t)$ appliquée sur la surface extérieure de la sphère creuse représente l'effet des contraintes thermiques au centre de la pastille combustible. Enfin, nous nous plaçons dans le cadre des petites déformations : les équations d'équilibre seront écrites sur la configuration initiale définie par les constantes géométriques (a, b) .

On va par ailleurs représenter le comportement mécanique de la pastille combustible par la loi viscoélastique linéaire non vieillissante suivante :

$$\sigma_m(t) = 3 \int_0^t k(t-u) d\varepsilon_m(u), \quad \mathbf{s}(t) = 2 \int_0^t \mu(t-u) d\mathbf{e}(u) \quad (3.2)$$

expression dans laquelle \mathbf{e} , \mathbf{s} sont les déviateurs des déformations et des contraintes, respectivement, tandis que ε_m et σ_m désignent leurs parties sphériques. Les modules de relaxation de compressibilité et de cisaillement sont des fonctions du temps notées $k(t)$ et $\mu(t)$. En l'absence de forces de volume, les évolutions temporelles des champs de contrainte $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t)$, de déformation $\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}, t)$ et de déplacement $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ sont solutions de :

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{u}(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{0} \quad \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}, 0) = \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{0} \\ \operatorname{div}(\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t)) = 0 \\ \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) + (\nabla \mathbf{u}(\mathbf{x}, t))^T) \\ \sigma_m(t) = 3 \int_0^t k(t-u) d\varepsilon_m(u) \quad \mathbf{s}(t) = 2 \int_0^t \mu(t-u) d\mathbf{e}(u) \\ \sigma_{rr}(a, t) = -p_i(t) \quad \text{et} \quad \sigma_{rr}(b, t) = -p_e(t). \end{array} \right. \quad (3.3)$$

La résolution de ce problème est bien connue (voir par exemple Salençon (1996)) mais elle va nous permettre d'introduire les principales notions utilisées par la suite.

Pour résoudre le problème posé, nous allons utiliser la transformée de Laplace-Carson. La transformée de Laplace-Carson d'une fonction du temps $f(t)$ est définie par² :

$$f^*(p) = p \int_0^{+\infty} f(t) e^{-pt} dt.$$

C'est une fonction de la variable réelle p . Nous notons par la suite $TLC^{-1}[f^*(p)] = f(t)$ la transformée de Laplace-Carson inverse d'une fonction f^* quelconque de p ($f(t)$ est aussi appelée l'originale de $f^*(p)$).

L'application de la transformée de Laplace-Carson à la loi de comportement précédente conduit, pour un réel p donné, à la loi de comportement de type élastique linéaire suivante :

$$\sigma_m^*(p) = 3k^*(p) \varepsilon_m^*(p), \quad \mathbf{s}^*(p) = 2\mu^*(p) \mathbf{e}^*(p), \quad (3.4)$$

²La transformée de Laplace-Carson diffère de la transformée de Laplace que par le facteur (p) dans le membre de droite de cette équation. En particulier, la transformée de Laplace-Carson d'une constante est la même constante. C'est pourquoi on utilise préférentiellement la transformée de Laplace-Carson.

expression dans laquelle les nouvelles caractéristiques élastiques $(\mu^*(p), k^*(p))$ dépendent de p .

En notant $(p_i^*(p), p_e^*(p))$ les transformées de Laplace-Carson du chargement en pressions $(p_i(t), p_e(t))$ imposé à la sphère creuse, on constate que pour un réel p donné, le problème transformé est équivalent à un problème élastique avec les conditions aux limites $(p_i^*(p), p_e^*(p))$. La solution à ce problème élastique linéaire a été rappelée dans le paragraphe 2.3.3. Le champ de contrainte solution obéit à la symétrie (sphérique) du problème et s'écrit :

$$\begin{cases} \sigma_{rr}^*(r, p) = A_1^*(p) - 2\frac{A_2^*(p)}{r^3} \\ \sigma_{\theta\theta}^*(r, p) = \sigma_{\phi\phi}^*(r, p) = A_1^*(p) + \frac{A_2^*(p)}{r^3} \end{cases} \quad (3.5)$$

(r désigne le rayon : $a \leq r \leq b$). On peut facilement vérifier que ce champ de contrainte satisfait aux équations d'équilibre. Il satisfait par ailleurs aux conditions aux limites si :

$$\begin{cases} A_1^*(p) = \frac{1}{1-f} (f p_i^*(p) - p_e^*(p)) \\ A_2^*(p) = \frac{a^3}{2(1-f)} (p_i^*(p) - p_e^*(p)) \end{cases} \quad (3.6)$$

Avec la loi de comportement, on peut calculer le champ de déformation puis le champ de déplacement solution du problème élastique posé :

$$\mathbf{u}^*(r, p) = \left(\frac{A_1^*(p)}{3k^*(p)} r + \frac{A_2^*(p)}{2\mu^*(p)} \frac{1}{r^2} \right) \mathbf{e}_r, \quad (3.7)$$

\mathbf{e}_r désignant le vecteur unitaire dans la direction radiale. On peut en déduire la déformation au bord extérieur du volume V selon :

$$\bar{\varepsilon}_m^*(p) = \frac{1}{1-f} \left[\frac{f p_i^*(p) - p_e^*(p)}{3k^*(p)} + f \frac{(p_i^*(p) - p_e^*(p))}{2\mu^*(p)} \right]$$

Par application de la transformée de Laplace-Carson inverse, on peut en déduire les évolutions temporelles des différents champs inconnus. Par exemple, le champ de déplacement solution s'écrit :

$$\mathbf{u}(r, t) = \left(r \int_0^t TLC^{-1} \left[\frac{1}{3k^*(p)} \right] (t-u) dA_1(u) + \frac{1}{r^2} \int_0^t TLC^{-1} \left[\frac{1}{2\mu^*(p)} \right] (t-u) dA_2(u) \right) \mathbf{e}_r. \quad (3.8)$$

Ces évolutions temporelles constituent la solution du problème original (théorème de correspondance de Lee-Mandel). On peut effectivement vérifier que ces évolutions temporelles sont solutions du problème de structure de départ (3.3).

Pour aller plus loin avec les expressions précédentes, il nous faut préciser la forme des modules de relaxation du matériau considéré. Ici, nous adoptons un comportement de type Maxwell :

$$\dot{\varepsilon}_m = \frac{1}{3k^e} \dot{\sigma}_m, \quad \dot{\varepsilon} = \frac{1}{2\mu^e} \dot{\mathbf{s}} + \frac{1}{2\mu^v} \mathbf{s} \quad (3.9)$$

(les indices en exposant e et v désignant les caractéristiques élastiques et visqueuses) de sorte que les transformées de Laplace-Carson des modules de relaxation s'écrivent :

$$k^*(p) = k^e, \quad \mu^*(p) = \frac{1}{\frac{1}{\mu^e} + \frac{1}{p \mu^v}}. \quad (3.10)$$

Dans ce cas particulier, on obtient facilement les inverses des transformées de Laplace-Carson apparaissant dans (3.8). L'évolution temporelle du déplacement se simplifie pour donner :

$$\mathbf{u}(r, t) = \left(\frac{r}{3k^e} A_1(t) + \frac{1}{r^2} \left(\frac{1}{2\mu^e} A_2(t) + \frac{1}{2\mu^v} \int_0^t A_2(u) du \right) \right) \mathbf{e}_r, \quad (3.11)$$

($A_1(t)$ et $A_2(t)$ sont les originales de $A_1^*(p)$ et $A_2^*(p)$, respectivement) tandis que l'évolution temporelle de la déformations macroscopique s'élève à :

$$\bar{\varepsilon}_m(t) = \frac{1}{3k^e} A_1(t) + \frac{f}{2} \left(\frac{1}{2\mu^e} A_2(t) + \frac{1}{2\mu^v} \int_0^t A_2(u) du \right). \quad (3.12)$$

Si la question de l'inversion des transformées de Laplace-Carson ne pose pas de problème dans ce cas particulier, c'est en général une source d'obstacle non pas théorique mais pratique. Nous revenons sur cette question dans la section 3.2 suivante. Avant d'aller plus loin, il nous faut noter pour la suite que la loi de comportement apparente de la sphère creuse (relation (3.12)) est de type Maxwell avec précontrainte :

$$\dot{\bar{\varepsilon}}_m(t) = \frac{1}{1-f} \left(\frac{1}{3k^e} + \frac{f}{4\mu^e} \right) [\dot{\bar{\sigma}}_m(t) + f \dot{p}_i(t)] + \frac{f}{1-f} \frac{1}{4\mu^v} [\bar{\sigma}_m(t) + f p_i(t)].$$

Bien entendu, si la porosité est nulle, on retrouve le comportement de la matrice constituant la sphère creuse. Pour une porosité non nulle, le comportement différé de cette sphère creuse a pour temps caractéristique :

$$\frac{1}{\tau} = \frac{f}{\mu^v} \frac{12\mu^e k^e}{4\mu^e + 3f k^e},$$

dépendant de la porosité ainsi que des caractéristiques élastiques et du module de cisaillement visqueux de la matrice.

La loi de comportement de la sphère creuse peut même être avantageusement écrite comme une loi à une variable interne selon :

$$\bar{\sigma}_m = -p_e(t) = (1-f) \frac{12\mu^e k^e}{4\mu^e + 3f k^e} \left(\bar{\varepsilon}_m(t) - \bar{\alpha}(t) \right) - f p_i(t), \quad (3.13)$$

l'unique variable interne $\alpha(t)$ étant la déformation visqueuse dont l'équation d'évolution est : $\dot{\bar{\alpha}} = \frac{f}{(1-f)4\mu^v} (f p_i(t) + \bar{\sigma}_m(t))$. A noter qu'on retrouve le module de compressibilité élastique apparent (expression (2.23)) déterminé dans la section 2.3.3 précédente : $(1-f) \frac{12\mu^e k^e}{4\mu^e + 3f k^e} = 3k^a$.

3.1.2 Limitations à l'emploi du théorème de correspondance, discussion

Quelles sont les principales hypothèses nous ayant permis de résoudre le problème exposé dans le paragraphe précédent ? Tout d'abord, pour avoir équivalence, il faut que les conditions aux limites conservent la même forme avec le temps (linéarité par rapport aux contraintes et aux déplacements, surface d'application, nature, ...). Si par exemple, on impose plutôt un déplacement sur la surface extérieure de la sphère creuse sur un intervalle de temps donné, un traitement par intervalles de temps pour lesquels la forme de ces conditions aux limites est constante sera nécessaire (voir Salençon (1996)). Par ailleurs, la forme de la loi de comportement adoptée pour la description du comportement viscoélastique du matériau considéré est particulière : $\mu(t - t')$ représente la contrainte à l'instant t causée par l'application d'un chargement en déformation unitaire à l'instant $t' \leq t$. C'est pourquoi on parle de loi viscoélastique linéaire non vieillissante, le caractère non vieillissant se traduisant formellement par le fait que cette contrainte à t ne dépend que de $t - t'$.

Dès qu'on étudie la réponse d'une structure à une sollicitation générale, on sort de ce cadre de modélisation et ce, pour plusieurs raisons :

- les caractéristiques de la loi de comportement dépendent souvent du chargement appliqué. C'est le cas par exemple d'un chargement pour lequel la température est variable alors que les caractéristiques élastiques ou visqueuses de la loi de comportement dépendent de cette même température.
- les caractéristiques de la loi de comportement peuvent aussi dépendre du temps, indépendamment des sollicitations thermomécaniques considérées (réactions chimiques, rayonnement, ...).

C'est tout à fait le cas de notre exemple de départ (la pastille combustible) : les caractéristiques du matériau vont dépendre de la température et de l'irradiation (sans oublier l'évolution de la microstructure, par exemple la densification!), de sorte que la fonction de fluage apparaissant dans la loi de comportement (3.2) ne dépend pas de $(t - t')$ mais dépend séparément de t et de t' .

Dans ces deux situations, on peut cependant s'appuyer sur le théorème de correspondance mais en adoptant une résolution incrémentale tirant profit de l'expression (3.13) exprimée en vitesse :

$$\begin{cases} \dot{\bar{\sigma}}_m(t) &= (1 - f) \frac{12\mu^e k^e}{4\mu^e + 3fk^e} (\dot{\bar{\epsilon}}_m(t) - \dot{\bar{\alpha}}(t)) - f \dot{p}_i(t) \\ \dot{\bar{\alpha}}(t) &= \frac{f}{(1-f)4\mu^v} (f p_i(t) + \bar{\sigma}_m(t)) \end{cases} \quad (3.14)$$

C'est ce que nous allons illustrer en considérant le cas où le matériau constituant la sphère creuse obéit à une loi viscoélastique linéaire de type Maxwell vieillissante, ses caractéristiques élastiques dépendant à présent du temps. Pour déterminer à un instant t donné la réponse apparente de la sphère creuse dans ce cas vieillissant, il suffit de considérer une sphère creuse définie par les mêmes rayons internes et externes (a, b) et

soumise à la même histoire de pression imposée mais obéissant à une loi de comportement viscoélastique linéaire non vieillissante ($\mu^e = \mu^e(t), k^e = k^e(t)$). La réponse apparente à l'instant t de cette sphère creuse (linéaire) est donnée par la loi (3.14). On en déduit la loi d'évolution du problème (non linéaire) de départ selon :

$$\begin{cases} \dot{\bar{\sigma}}_m(t) &= -\dot{p}_e(t) = (1-f) \frac{12\mu^e k^e}{4\mu^e + 3fk^e} (\dot{\bar{\varepsilon}}_m(t) - \dot{\bar{\alpha}}(t)) - f \dot{p}_i(t), \\ \dot{\bar{\alpha}}(t) &= \frac{f}{(1-f)4\mu^v} (f p_i(t) + \bar{\sigma}_m(t)), \end{cases}$$

expression dans laquelle les modules élastiques prennent leurs valeurs instantannées ($\mu^e = \mu^e(t)$ et $k^e = k^e(t)$).

On peut donc encore utiliser le théorème de correspondance dans le cas considéré à condition de l'appliquer incrémentalement. Dans l'exemple présenté, on remarque que la formulation à variables internes (3.13) a grandement facilité l'extension au cas vieillissant. On pourrait aussi traiter la non linéarité géométrique en ajoutant aux équations constitutives précédentes celles de l'évolution des rayons (calculées grâce au champ de vitesse du déplacement attaché au problème linéarisé à l'instant considéré, ...). Nous verrons dans la section 3.3 comment utiliser cette même méthodologie dans le cas de matériaux hétérogènes viscoélastiques linéaires mais vieillissants.

3.1.3 Application à l'homogénéisation

Nous considérons à présent le VER défini en début de chapitre (n_p phases possédant un comportement viscoélastique linéaire non vieillissant, $\mathbf{L}^s(t)$ désignant la fonction de relaxation de la phase d'indice (s)). Cet élément de volume est soumis à son bord à une histoire de déformation macroscopique $\bar{\varepsilon}(u)$ ($0 \leq u \leq t$). Nous cherchons son module de relaxation effectif tel que :

$$\bar{\sigma}(t) = \int_0^t \bar{\mathbf{L}}(t-u) : \dot{\bar{\varepsilon}}(u) du.$$

Afin de déterminer les propriétés effectives de ce VER, nous allons procéder comme dans le cas particulier considéré précédemment (voir illustration reportée sur la Figure 3.2) :

- application de la transformée de Laplace-Carson aux lois constitutives de chacune des phases du composite : pour un réel p donné, on obtient ainsi un VER fictif possédant la même distribution spatiale de phases. Le comportement de chacune des phases (s) de ce VER fictif est à présent élastique linéaire (module égal à $\mathbf{L}^{s*}(p)$) tandis que le chargement est la déformation macroscopique $\bar{\varepsilon}^*(p)$;
- homogénéisation du matériau fictif élastique hétérogène ainsi défini. On en déduit le module effectif $\bar{\mathbf{L}}^*(p)$;
- application de la transformée de Laplace-Carson inverse pour déterminer l'originale de $\bar{\mathbf{L}}^*(p)$ qui est la fonction de relaxation effective recherchée.

De même, on peut bien entendu déterminer les évolutions de quantités moyennes (moyenne des contraintes dans une des phases, ...).

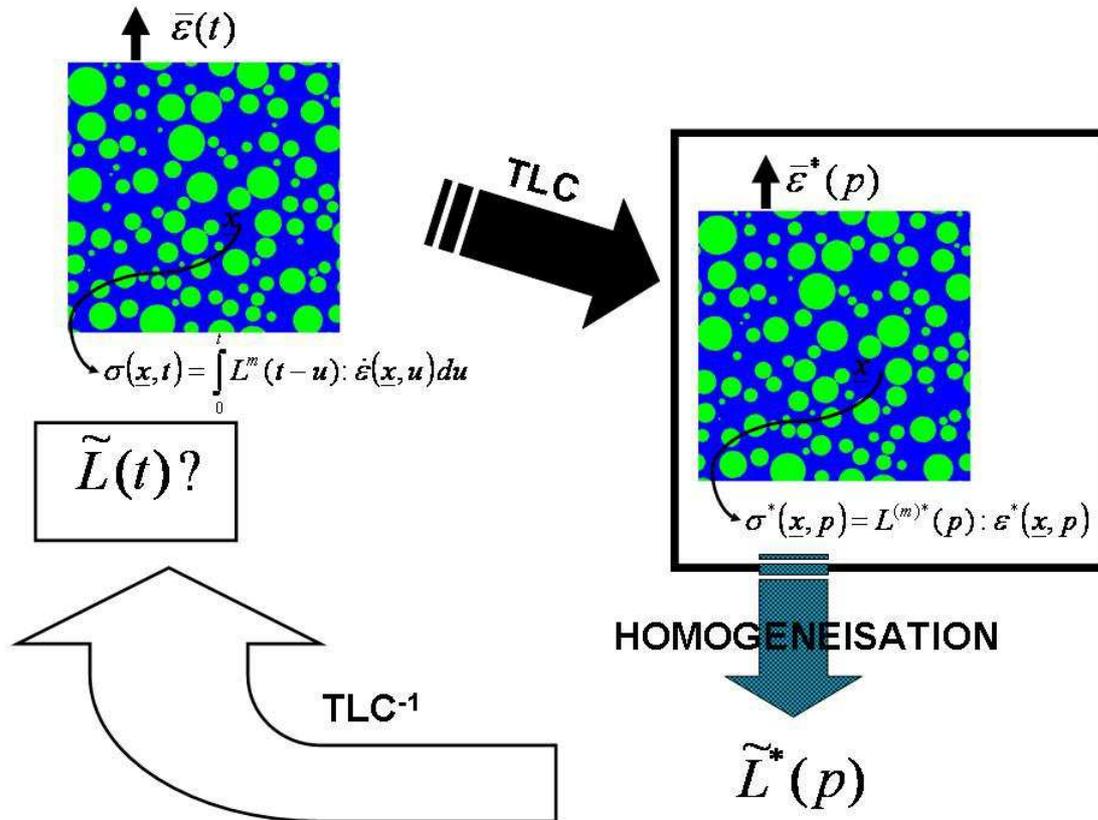


FIG. 3.2 – Homogénéisation en viscoélasticité linéaire, principe de détermination de la fonction de relaxation effective $\tilde{L}(t)$ dans le cas d'un composite constitué de deux phases (TLC désigne la transformée de Laplace-Carson, TLC^{-1} son inverse).

Lors de l'étape d'homogénéisation du matériau élastique hétérogène fictif, plusieurs méthodes sont envisageables : les bornes de Voigt et Reuss, le modèle de Mori and Tanaka (1973), le modèle de sphères composites de Hashin (1962), le modèle autocohérent (Kröner (1958)) ... tous ces modèles ont déjà été étendus au cas viscoélastique linéaire en utilisant le théorème de correspondance : voir Christensen (1969) pour le modèle de sphères composites, Wang and Weng (1992), Brinson and Lin (1998), (...) pour le modèle de Mori and Tanaka (1973), ou encore Laws and McLaughlin (1978) pour le modèle autocohérent.

Considérons par exemple le cas d'un matériau composite constitué de deux phases (fractions volumiques (c_1, c_2) avec $c_1 + c_2 = 1$). Les deux phases obéissent à un compor-

tement isotrope de type Maxwell selon :

$$\dot{\epsilon}_m = \frac{1}{3k_i^e} \dot{\sigma}_m + \frac{1}{3k_i^v} \sigma_m, \quad \dot{\epsilon} = \frac{1}{2\mu_i^e} \dot{\mathbf{s}} + \frac{1}{2\mu_i^v} \mathbf{s}, \quad \text{pour chaque phase } i = 1, 2. \quad (3.15)$$

Pour simplifier les calculs, les modules élastiques de chacune des phases sont identiques ($\mu_1^e = \mu_2^e = \mu^e$ et $k_1^e = k_2^e = k^e$, élasticité homogène) et nous adoptons les définitions suivantes (temps caractéristiques) :

$$\tau_i^d = \frac{\mu_i^v}{\mu^e} \quad \tau_i^m = \frac{k_i^v}{k^e}, \quad \text{pour chaque phase } i = 1, 2.$$

Du point de vue macroscopique, le comportement d'un VER du matériau hétérogène considéré est isotrope. Si ce VER est soumis à son bord à une histoire de déformation $\bar{\epsilon}(t)$ à partir de l'instant $t = 0$, la réponse macroscopique $\bar{\sigma}(t)$ est définie par deux fonctions de fluage ($\tilde{\mu}(t), \tilde{k}(t)$) selon :

$$\bar{\sigma}(t) = 3 \int_0^t \tilde{k}(t-u) d\bar{\epsilon}_m(u) \delta + 2 \int_0^t \tilde{\mu}(t-u) d\bar{\epsilon}(u), \quad (3.16)$$

(avec $\bar{\epsilon}_m = \frac{1}{3} \delta : \bar{\epsilon}$).

La transformée de Laplace-Carson nous permet de ramener ce problème viscoélastique linéaire à un problème de matériaux hétérogènes élastiques linéaires, le comportement des deux phases étant défini par :

$$i = 1, 2 : \quad \sigma_{im}^*(p) = 3k_i^*(p) \epsilon_{im}^*(p) \quad \text{et} \quad \mathbf{s}_i^*(p) = 2\mu_i^*(p) \mathbf{e}_i^*(p), \quad (3.17)$$

p étant le paramètre associé à la transformée de Laplace-Carson tandis que $(\mu_i^*(p), k_i^*(p))$ sont définis pour chaque phase (i) par :

$$k_i^*(p) = \frac{1}{\frac{1}{k^e} + \frac{1}{p k_i^v}}, \quad \mu_i^*(p) = \frac{1}{\frac{1}{\mu^e} + \frac{1}{p \mu_i^v}}. \quad (3.18)$$

Nous notons $(\tilde{\mu}^*(p), \tilde{k}^*(p))$ les transformées de Laplace-Carson des fonctions de relaxation effectives cherchées.

Pour aller plus loin, nous allons considérer des microstructures particulières :

- une microstructure “série” qui correspond à une estimation de type Reuss ;
- une microstructure “parallèle” (estimation de Voigt) ;
- une microstructure de type matrice-inclusion avec une fraction volumique d'inclusions relativement basse (inférieure à 0.2) : dans ce cas, le comportement effectif sera estimé à l'aide du schéma de Mori and Tanaka (1973) (estimation qui correspond dans ce cas à la borne inférieure d'Hashin-Shtrikman).

La transformée de Laplace-Carson des estimations des modules effectifs ($\tilde{\mu}_\gamma(t)$, $\tilde{k}_\gamma(t)$) obtenues avec les modèles de Reuss et Voigt (notées respectivement par l'exposant $\gamma = R, V$) sont :

$$\tilde{\mu}_R^* = \left\langle \frac{1}{\mu^*} \right\rangle^{-1}, \quad \tilde{k}_R^* = \left\langle \frac{1}{k^*} \right\rangle^{-1}, \quad \tilde{\mu}_V^* = \langle \mu^* \rangle, \quad \tilde{k}_V^* = \langle k^* \rangle,$$

tandis que le modèle de Mori-Tanaka conduit à ($i = 1$ désigne la matrice) :

$$\tilde{\mu}_{MT}^* = \mu_1^* + c_2 \left(\frac{\mu_2^* - \mu_1^*}{1 + c_1 \frac{\mu_2^* - \mu_1^*}{\mu_1^* + \mu_2^*}} \right), \quad \tilde{k}_{MT}^* = k_1^* + c_2 \left(\frac{k_2^* - k_1^*}{1 + c_1 \frac{k_2^* - k_1^*}{k_1^* + k_2^*}} \right),$$

$$\text{avec } \hat{k}^* = \frac{4}{3}\mu_1^*, \quad \hat{\mu}^* = \frac{\mu_1^*}{6} \frac{9k_1^* + 8\mu_1^*}{k_1^* + 2\mu_1^*}.$$

Toutes ces estimations des transformées de Laplace-Carson des fonctions de relaxation sont des fractions rationnelles de la variable p . Ces fractions rationnelles admettent des développements en série de la forme ($\gamma=R, V, MT$ pour les modèles de Reuss (R), Voigt (V) et Mori-Tanaka (MT), respectivement) :

$$\tilde{\mu}_\gamma^*(p) = \sum_{i=1}^{N_{(\gamma)p}^d} \mu_{\tau_{(\gamma)i}^d} \frac{p}{p + \frac{1}{\tau_{(\gamma)i}^d}}, \quad \tilde{k}_\gamma^*(p) = \sum_{i=1}^{N_{(\gamma)p}^m} k_{\tau_{(\gamma)i}^m} \frac{p}{p + \frac{1}{\tau_{(\gamma)i}^m}}, \quad (3.19)$$

avec les conditions suivantes :

$$\sum_{i=1}^{N_p^d} \mu_{\tau_i^d} = \mu^e \quad \text{et} \quad \sum_{i=1}^{N_p^m} k_{\tau_i^m} = k^e. \quad (3.20)$$

Des expressions des temps de relaxation effectifs (τ_i^d, τ_i^m), leur nombre (N_p^d, N_p^m) et leur amplitude ($\mu_{\tau_i^d}, k_{\tau_i^m}$) sont reportés dans le tableau 3.1.

Pour les modèles de Voigt et Reuss, ces résultats sont directement exprimés en fonction des fractions volumiques des phases, des modules élastiques ainsi que des temps de relaxation des deux phases ($i = 1, 2$, $\tau_i^m = \frac{k_i^v}{k^e}$, $\tau_i^d = \frac{\mu_i^v}{\mu^e}$). Pour le modèle de Mori-Tanaka, les résultats sont exprimés en fonction de quatre constantes additionnelles :

$$\frac{1}{\hat{\tau}_a^m} = \left\langle \frac{1}{\tau^m} \right\rangle + \frac{1}{4 + 3\xi} \left(\frac{3\xi}{\tau_1^d} + 4 \left(\frac{c_2}{\tau_1^m} + \frac{c_1}{\tau_2^m} \right) \right), \quad \frac{1}{\hat{\tau}_b^m} = \sqrt{\frac{1}{4 + 3\xi} \left(\frac{3\xi}{\tau_1^d} \left\langle \frac{1}{\tau^m} \right\rangle + \frac{4}{\tau_1^m \tau_2^m} \right)},$$

$$\frac{1}{\hat{\tau}_a^d} = \frac{\left(\frac{15}{\tau_1^d} + \frac{9}{\tau_2^d} \right) \xi + (6\xi + 12) \left\langle \frac{1}{\tau^d} \right\rangle + \frac{8}{\tau_2^d} + \frac{20}{\tau_1^m}}{15\xi + 20}, \quad \frac{1}{\hat{\tau}_b^d} = \sqrt{\frac{\frac{(9+6c_2)\xi}{\tau_1^d \tau_2^d} + \frac{8+12c_2}{\tau_2^d \tau_1^m} + \frac{6\xi c_1}{\tau_1^{d2}} + \frac{12c_1}{\tau_1^d \tau_1^m}}{15\xi + 20}},$$

($\xi = \frac{k^e}{\mu^e}$) ainsi que des fonctions polynomiales :

$$p^d(x) = \frac{5c_2 \mu^e}{(2+3c_2)\tau_2^d(15\xi+20)} \left(\frac{(20+15\xi)\tau_2^d}{(\hat{\tau}_b^d)^2} + x \left((6+9c_2)\xi + 8 + 12c_2 + (9\xi+12)c_1 \frac{\tau_2^d}{\tau_1^d} \right) \right),$$

$$p^m(x) = k^e \left(\left\langle \frac{1}{\tau^m} \right\rangle x + \frac{1}{4+3\xi} \left(\frac{4}{\tau_1^m \tau_2^m} + 3\xi \left\langle \frac{1}{\tau^m} \right\rangle \frac{1}{\tau_1^d} \right) \right).$$

		Reuss	Voigt	Mori-Tanaka
Cisaillement	Temps de relaxation	$N_p^d = 1$ $\bar{\tau}^d = \langle \frac{1}{\tau^d} \rangle^{-1}$	$N_p^d = 2$ $\bar{\tau}_1^d = \tau_1^d$ $\bar{\tau}_2^d = \tau_2^d$	$N_p^d = 3$ $\bar{\tau}_1^d = \tau_1^d$ $\bar{\tau}_2^d = 2\hat{\tau}_a^d \left(1 - \sqrt{1 - 4(\hat{\tau}_a^d/\hat{\tau}_b^d)^2}\right)^{-1}$ $\bar{\tau}_3^d = 2\hat{\tau}_a^d \left(1 + \sqrt{1 - 4(\hat{\tau}_a^d/\hat{\tau}_b^d)^2}\right)^{-1}$
	Amplitudes	$\mu_{\bar{\tau}^d} = \mu^e$	$\mu_{\bar{\tau}_1^d} = c_1\mu^e$ $\mu_{\bar{\tau}_2^d} = c_2\mu^e$	$\mu_{\bar{\tau}_1^d} = \frac{2c_1}{(2+3c_2)}\mu^e$, $\mu_{\bar{\tau}_2^d} = \frac{\bar{\tau}_2^d}{\hat{\tau}_a^d - \frac{2}{\bar{\tau}_2^d}}p^d\left(-\frac{1}{\bar{\tau}_2^d}\right)$ $\mu_{\bar{\tau}_3^d} = \mu^e - \mu_{\bar{\tau}_1^d} - \mu_{\bar{\tau}_2^d}$
Compressibilité	Temps de relaxation	$N_p^m = 1$ $\bar{\tau}^m = \langle \frac{1}{\tau^m} \rangle^{-1}$	$N_p^m = 2$ $\bar{\tau}_1^m = \tau_1^m$ $\bar{\tau}_2^m = \tau_2^m$	$N_p^m = 2$ $\bar{\tau}_1^m = 2\hat{\tau}_a^m \left(1 - \sqrt{1 - 4(\hat{\tau}_a^m/\hat{\tau}_b^m)^2}\right)^{-1}$ $\bar{\tau}_2^m = 2\hat{\tau}_a^m \left(1 + \sqrt{1 - 4(\hat{\tau}_a^m/\hat{\tau}_b^m)^2}\right)^{-1}$
	Amplitudes	$k_{\bar{\tau}^m} = k^e$	$k_{\bar{\tau}_1^m} = c_1k^e$ $k_{\bar{\tau}_2^m} = c_2k^e$	$k_{\bar{\tau}_1^m} = \frac{(\bar{\tau}_1^m)^2\bar{\tau}_2^m}{\bar{\tau}_1^m - \bar{\tau}_2^m}p^m\left(-\frac{1}{\bar{\tau}_1^m}\right)$ $k_{\bar{\tau}_2^m} = k^e - k_{\bar{\tau}_1^m}$

TAB. 3.1 – Valeurs exactes des caractéristiques effectives obtenues à l’aide des modèles de Voigt, Reuss et Mori-Tanaka (voir Ricaud and Masson (2009)).

On retrouve dans le cas particulier considéré que, sauf dans le cas du modèle de Reuss, un mélange de constituants maxwelliens n’est pas maxwellien (i.e. le comportement effectif est caractérisé par plusieurs temps de relaxation). En revanche, on obtient ici un spectre discret, conséquence de la forme très particulière des modules symboliques dans les cas envisagés : ce sont des fractions rationnelles de la variable (p). Nous avons même tiré parti de cette particularité pour inverser analytiquement les transformées de Laplace-Carson.

Dans le cas général, la forme des modules symboliques peut s’avérer nettement plus complexe et ainsi conduire à un spectre de relaxation continu (voir par exemple Rougier *et al.* (1993)). Enfin, rares sont les cas qui permettent un traitement analytique de l’inversion de la transformée de Laplace-Carson. Comment obtenir les variations temporelles des propriétés effectives dans le cas général ? Cette question de l’inversion des transformées de Laplace-Carson est étudiée dans la section suivante.

3.2 Le problème de l'inversion des transformées de Laplace-Carson

Comme expliqué dans la section précédente, les situations pour lesquelles on peut inverser les transformées de Laplace-Carson pour établir une expression analytique des quantités effectives recherchées sont relativement rares. Une condition nécessaire pour que cette inversion analytique soit possible est que le modèle d'homogénéisation linéaire appliqué au problème pseudo-linéaire défini pour un réel p donné conduise à une définition analytique des propriétés effectives. Si on considère les modèles d'homogénéisation s'appuyant sur la résolution du problème d'Eshelby, il faudra envisager des situations isotropes (comportement et distribution spatiale des phases). Par exemple, comme nous l'avons vu dans la section précédent, le modèle de Mori-Tanaka peut permettre d'obtenir des expressions analytiques de la transformée de Laplace-Carson des fonctions effectives de fluage (ou de relaxation). Elle se présente comme une fraction rationnelle des fonctions de fluage des différents constituants. L'inversion de cette fraction rationnelle, fonction de la variable p sera à coup sûr possible si les fonctions de fluage des constituants sont elles-mêmes des fractions rationnelles de la variable p ou, ce qui est équivalent, que la loi de comportement constitutive, liant la contrainte, la déformation et leurs dérivées, s'exprime comme une équation différentielle linéaire à coefficients constants et de degré fini. En revanche, le modèle autocohérent va définir implicitement les propriétés effectives comme solution de l'équation d'autocohérence. Cette équation n'ayant de solution analytique que dans certains cas particuliers (biphasé à constituants isotropes incompressibles par exemple), rares seront les cas pour lesquels on pourra obtenir une expression algébrique des propriétés effectives transformées et, a fortiori, de leurs originales ³.

3.2.1 Méthode des collocations

Dans le cas général donc, les transformées de Laplace-Carson des propriétés effectives sont connues numériquement pour un réel p quelconque. Comment se servir de cette information pour calculer la meilleure approximation possible des fonctions du temps originales correspondantes? La méthode des collocations consiste à représenter chaque composante $r(t)$ des fonctions de relaxation par le développement en série de Prony suivant :

$$r(t) \approx r_a(t) = \sum_{i=1}^{N_p} r_{\tau_i} e^{-\frac{t}{\tau_i}}, \quad (3.21)$$

les N_p coefficients de ce développement devant satisfaire à la relation suivante :

$$\sum_{i=1}^{N_p} r_{\tau_i} = r^e, \quad (3.22)$$

³voir, par exemple, Brenner *et al.* (2002) pour l'expression de la fonction de fluage effective prévue par le modèle autocohérent dans le cas d'un biphasé dont les phases constitutives possèdent un comportement isotrope incompressible de type Maxwell.

r^e désignant le module de relaxation élastique. Si la mesure de l'erreur entre la fonction originale $r(t)$ et son approximation $r_a(t)$ est mesurée par :

$$\int_0^{+\infty} (r(t) - r_a(t))^2 dt,$$

alors les valeurs optimales des coefficients r_{τ_i} sont données par (voir Schapery (1962)) :

$$1 \leq i \leq N_p^a \quad r^*\left(\frac{1}{\tau_i}\right) = r_a^*\left(\frac{1}{\tau_i}\right). \quad (3.23)$$

Cette méthode d'inversion a été mise en oeuvre à plusieurs reprises, notamment dans Turner *et al.* (1994) ou Masson and Zaoui (1999). Cette méthode est lourde (il faut plus d'une dizaine de temps de collocation ($\tau_1, \dots, \tau_{N_p^a}$)) mais elle reste très efficace. Par ailleurs, des travaux récents (voir Rezik and Brenner (2007)) laissent penser que la méthode peut encore largement gagner en efficacité (diminution du nombre de temps de relaxation).

3.2.2 La méthode “quasi-élastique”

En effectuant le changement de variable $w = \log_{10}(pt)$ dans l'expression de la transformée de Laplace-Carson d'une fonction du temps $r(t)$, Schapery (1962) obtient :

$$r^*(p) = \int_{-\infty}^{+\infty} r\left(\frac{10^w}{p}\right) g(w) dw \quad (3.24)$$

et remarque que la fonction de pondération $g(w)$ apparaissant dans cette intégrale satisfait :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} g(w) dw = 1,$$

et est quasiment nulle, hormis sur l'intervalle $-2 \leq w \leq 1$. D'où l'idée d'approcher cette fonction de pondération par une fonction de Dirac centrée sur le point w_0 avec $-2 \leq w_0 \leq 1$, ce qui conduit à l'approximation :

$$r^*(p) \approx r(t)_{t=10^{w_0}/p}.$$

Inversement, l'approximation de la transformée de Laplace-Carson inverse :

$$r(t) \approx r^*(p)_{p=10^{w_0}/t} \quad (3.25)$$

est appelée l'approximation quasi-élastique. Quelle valeur choisir pour le paramètre w_0 ? Cela dépend en fait de la nature des variations de la fonction $r(t)$. Pour des fonctions du temps variant de façon quasi-linéaire avec $\log(t)$, Schapery (1962) suggère de choisir $w_0 = -C/\log(10)$ (C la constante d'Euler), ce qui le conduit à adopter l'approximation :

$$r(t) \approx r^*(p)_{p=1/2t}. \quad (3.26)$$

Même s'ils se réfèrent à Schapery (1962), Turner *et al.* (1994) adoptent une valeur différente du paramètre w_0 en vue de simuler les propriétés effectives de polycristaux ($w_0 = 0$) :

$$r(t) \approx r^*(p)_{p=1/t}. \quad (3.27)$$

Dans le cas de matériaux multiphasés isotropes dont les phases obéissent à un comportement de Maxwell, nous avons montré (voir Brenner *et al.* (2002)) que l'approximation (3.26) modifie la nature de la loi de comportement des phases (le comportement n'est plus un comportement de Maxwell). Par ailleurs, le choix (3.27) conduit à la meilleure approximation dans le cas d'un chargement de fluage. Dans l'exemple présenté dans le paragraphe 3.1.1, on peut effectivement constater que, sous les mêmes conditions (comportement de Maxwell, chargement de fluage (pressions appliquées constantes)), l'approximation quasi-élastique conduit même à la solution exacte. Il y a deux explications à cela : tout d'abord, si la fonction de fluage obéit à un comportement de type Maxwell, la relation (3.27) appliquée à la fonction de fluage est exacte : $\mu(t) = \mu^*(1/t)$. Par ailleurs, la transformée de Laplace-Carson du champ de déplacement (mais c'est également vrai pour la moyenne des déformations), dans le cas particulier de la sphère creuse, est proportionnelle au produit de cette même fonction de fluage et du chargement (les pressions). Si ce chargement est constant, on obtient donc : $u(r, t) = u^*(r, 1/t)$.

En revanche, même si on se limite à des matériaux multiphasés dont les phases obéissent à un comportement de Maxwell, l'approximation (3.27) n'est plus pertinente dès lors que l'on considère d'autres trajets de chargement (relaxation, écrouissage à vitesse de déformation imposée, ...). Une forme générale d'approximation quasi-élastique s'exprime alors (Brenner *et al.* (2002)) :

$$r(t) \approx r^*(p)_{p=h(t)/t}, \quad (3.28)$$

la fonction $h(t)$ étant choisie, pour le trajet de chargement considéré, de façon à ce que cette approximation soit exacte lorsque le matériau n'est constitué que d'une seule phase. Dans le cas d'un essai de relaxation, par exemple, cette fonction $h(t)$ est définie par :

$$h_\tau(t) = \frac{t e^{-\frac{t}{\tau}}}{\tau(1 - e^{-\frac{t}{\tau}})},$$

τ désignant la moyenne des temps de relaxation des différentes phases constituant le matériau hétérogène considéré.

3.2.3 Inversion de la transformée de Laplace-Carson : conclusions

Il n'y a donc pas une, mais plusieurs approximations quasi-élastiques, que l'on peut définir de façon générale comme la relation (3.28), la fonction $h(t)$ étant telle que, pour le trajet de chargement simulé, cette relation devienne exacte lorsque le matériau hétérogène considéré est monophasé. Cette définition générale impose implicitement les restrictions suivantes sur son domaine d'application :

- le comportement de chacune des phases du matériau hétérogène considéré devra être de la même nature (Maxwell ou Kelvin-Voigt, ...);
- la nature du trajet de chargement doit être simple. Par exemple, si on considère un chargement biaxé, avec un chargement de fluage dans une direction et un chargement de traction à vitesse de déformation imposée dans la direction complémentaire, la fonction $h(t)$ ne sera plus définie de façon unique. Laquelle choisir ?

A noter que même des essais rhéologiques d'apparence simple conduisent à de telles difficultés. C'est le cas de l'essai de fluage en compression uniaxée, utilisé au CEA pour la caractérisation du comportement des pastilles de combustible avant irradiation. On observe en général une mise en tonneau des pastilles due à l'ancrage latéral entre la face supérieure de l'éprouvette et le plateau supérieur de la machine de compression. Si, dans la direction de compression, on effectue bien un essai de fluage, dans la direction transverse en revanche, l'éprouvette est soumise à une sollicitation de type relaxation (composantes transverses du déplacement bloquées au niveau de la surface de contact supérieure de l'éprouvette).

3.3 Représentation par variables internes

3.3.1 Relation d'équivalence

Nous avons vu précédemment que l'approche par collocation est, certes lourde de mise en œuvre, mais efficace dès lors que l'on aborde des problèmes généraux. Nous allons voir dans ce qui suit que nous pouvons même en tirer profit. Mais, pour cela, il nous faut au préalable remarquer que, si la fonction de relaxation $r(t)$ peut être représentée par le développement en séries de Prony suivant :

$$r(t) = \sum_{i=1}^{N_p} r_{\tau_i} e^{-\frac{t}{\tau_i}},$$

alors, la relation intégrale classique :

$$F(t) = \int_0^t r(t-u) dq(u),$$

(q une composante du déplacement, F une composante de la contrainte) peut être représentée de façon équivalente par la loi de comportement (voir Ricaud and Masson (2009) pour les détails) :

$$F(t) = r^e \left(q(t) - \sum_{i=1}^{N_p} \alpha_{\tau_i}(t) \right), \quad (3.29)$$

expression dans laquelle les N_p variables internes $\alpha_{\tau_i}(t)$ sont solutions de N_p équations différentielles du premier ordre suivantes :

$$\dot{\alpha}(t) + \frac{1}{\tau} \alpha(t) = \frac{1}{\tau} \frac{r_{\tau}}{r^e} q(t) \quad \text{avec} \quad \alpha(0) = 0, \quad (3.30)$$

τ étant égal à τ_1, \dots, τ_p . On peut même donner un sens physique aux rapports $\frac{r_{\tau_i}}{r^e}$ apparaissant dans les lois d'évolution de ces variables internes : la réponse de chaque variable interne à l'essai de relaxation défini par : $q(t) = q^0, t > 0^+$ s'écrit :

$$i = 1 \dots N^p, t > 0^+, \alpha_{\tau_i}(t) = \frac{r_{\tau_i}}{r^e} q^0 (1 - e^{-\frac{t}{\tau_i}}). \quad (3.31)$$

Les rapports $\frac{r_{\tau_i}}{r^e}$ représentent donc l'amplitude relative de chacune des variables internes (α_{τ_i}).

Cette relation d'équivalence entre méthode des collocations et représentation par variables internes va nous permettre d'utiliser beaucoup plus efficacement les résultats établis à l'aide du théorème de correspondance. C'est ce que nous allons illustrer en considérant un cas particulier.

3.3.2 Cas particulier des composites biphasés

Nous considérons à présent le composite biphasé défini dans le paragraphe 3.1.3. Plutôt que d'utiliser les modèles semi-analytiques utilisés précédemment, nous pouvons encadrer par la méthodologie de calcul de micro-structure présentée en 2.3 ces caractéristiques effectives (pour une réalisation d'un VER de ce matériau hétérogène). Nous avons vu précédemment que pour déduire de tels calculs les fonctions effectives originales, on peut utiliser la méthode de collocation :

$$\tilde{\mu}(t) \approx \sum_{i=1}^{N_p^d} \mu_{\tau_i^d} e^{-\frac{t}{\tau_i^d}}, \quad \tilde{k}(t) \approx \sum_{i=1}^{N_p^m} k_{\tau_i^m} e^{-\frac{t}{\tau_i^m}}, \quad (3.32)$$

avec les contraintes habituelles suivantes :

$$\sum_{i=1}^{N_p^d} \mu_{\tau_i^d} = \mu^e, \quad \sum_{i=1}^{N_p^m} k_{\tau_i^m} = k^e. \quad (3.33)$$

les coefficients $(\mu_{\tau_1^d}, \dots, k_{\tau_{N_p^m}^m})$ étant obtenus par la résolution de (3.23) et de résultats de calculs éléments finis effectués pour $p = \frac{1}{\tau_1^d}, \dots, \frac{1}{\tau_{N_p^m}^m}$.

C'est en fait équivalent (voir plus haut) à approcher la représentation intégrale habituelle par la loi de comportement à variables internes suivante :

$$\bar{\mathfrak{s}}(t) \approx 2\mu^e \left(\bar{\mathfrak{e}}(t) - \sum_{i=1}^{N_p^d} \alpha_{\tau_i^d}^d(t) \right), \quad \bar{\sigma}_m(t) \approx 3k^e \left(\bar{\mathfrak{e}}_m(t) - \sum_{i=1}^{N_p^m} \alpha_{\tau_i^m}^m(t) \right), \quad (3.34)$$

les variables internes scalaires $\alpha_{\tau_i^m}^m(t)$ et tensorielles (second-ordre symétrique) $\alpha_{\tau_i^d}^d(t)$ ayant pour loi d'évolution :

$$\begin{cases} \dot{\alpha}(t) + \frac{1}{\tau_i^m} \alpha(t) = \frac{1}{\tau_i^m} \frac{k_{\tau_i^m}}{k^e} \bar{\mathfrak{e}}_m(t) & 1 \leq i \leq N_p^m, \\ \dot{\alpha}(t) + \frac{1}{\tau_i^d} \alpha(t) = \frac{1}{\tau_i^d} \frac{\mu_{\tau_i^d}}{\mu^e} \bar{\mathfrak{e}}(t) & 1 \leq i \leq N_p^d. \end{cases} \quad (3.35)$$

Si, pour estimer ces fonctions de fluage, on choisit d'employer des méthodes d'homogénéisation, plusieurs méthodes sont envisageables mais rares sont les cas pour lesquels une expression algébrique des fonctions de fluage pourront être obtenues. C'est pourtant le cas du modèle de Mori and Tanaka (1973), modèle souvent utilisé pour étudier le comportement de matériaux hétérogènes de type inclusion-matrice avec une fraction volumique d'inclusion relativement faible. Pour ce modèle étendu au cas viscoélastique linéaire, nous avons vu (voir section 3.1.3) que la représentation par série de Prony s'avère exacte. Donc, le modèle de Mori-Tanaka appliqué à un biphasé maxwellien conduit à une représentation exacte par une loi de comportement à variables internes telle que (3.34). Dans cette situation, on peut même montrer que cette loi possède trois variables internes tensorielles (second-ordre) et deux scalaires (voir 3.1).

A noter que les amplitudes respectives de ces différentes variables internes étant d'un ordre de grandeur équivalent, il n'est pas possible d'en négliger certaines (tout au moins pour les situations envisagées).

En résumé, nous avons montré que, soit de façon approchée (cas général), soit de façon exacte, la loi de comportement effective d'un matériau biphasé isotrope à constituants viscoélastiques linéaires peut s'écrire comme une loi de comportement à variables internes du type (3.34) et (3.35). Dans le cas général, c'est l'approximation par la méthode des collocations qui conduit à ce résultat.

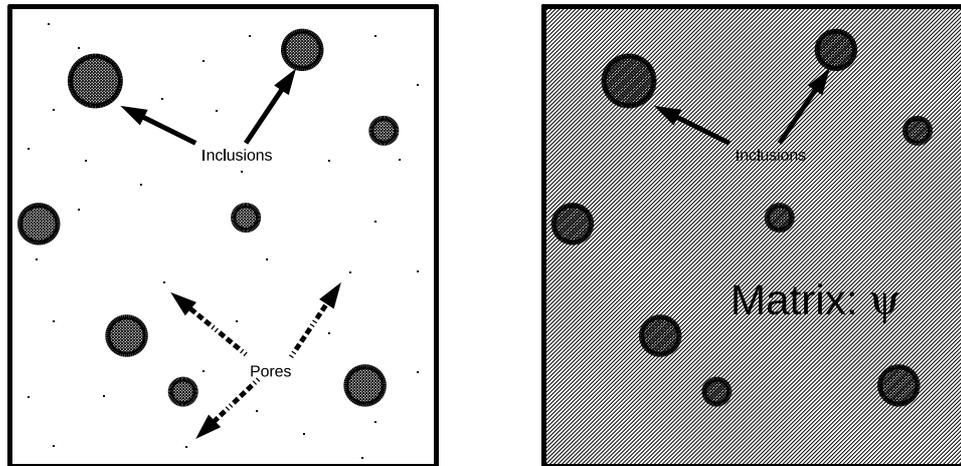
A noter enfin (voir Ricaud and Masson (2009)) que dans ce cas bi-phasé, on peut établir les lois d'évolution générales des moyennes des contraintes dans les deux phases. Ainsi, les évolutions temporelles des moyennes des contraintes dans la matrice ont pour expression (élasticité homogène) :

$$\begin{aligned}\bar{\sigma}_m^{(1)}(t) &= \frac{3}{c_1} \left(\frac{1}{k_1^v} - \frac{1}{k_2^v} \right)^{-1} \left(\dot{\bar{\epsilon}}_m(t) - \frac{1}{3} \left(\frac{1}{k^e} \dot{\bar{\sigma}}_m(t) + \frac{1}{k_2^v} \bar{\sigma}_m(t) \right) \right), \\ \bar{\mathbf{s}}^{(1)}(t) &= \frac{2}{c_1} \left(\frac{1}{\mu_1^v} - \frac{1}{\mu_2^v} \right)^{-1} \left(\dot{\bar{\boldsymbol{\epsilon}}}(t) - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\mu^e} \dot{\bar{\mathbf{s}}}(t) + \frac{1}{\mu_2^v} \bar{\mathbf{s}}(t) \right) \right).\end{aligned}\tag{3.36}$$

avec $\bar{\sigma}_m^{(1)}(0) = \bar{\sigma}_m(0)$ et $\bar{\mathbf{s}}^{(1)}(0) = \bar{\mathbf{s}}(0)$. Ces expressions présentent l'intérêt d'être valables quel que soit le modèle d'homogénéisation retenu pour établir le comportement effectif du composite considéré.

3.3.3 Avantages de la représentation par variables internes

Les avantages de la représentation par variables internes de la loi de comportement par rapport à une représentation par noyau intégral sont nombreuses : tout d'abord, il n'est pas nécessaire de garder en mémoire dans un calcul numérique l'ensemble de l'histoire de chargement (la valeur des variables internes au pas de temps précédent est suffisante). On peut donc envisager des trajets de chargement complexes (cyclique, ...) et, donc, des cas d'application très généraux (calcul à la fatigue, ...).



a)

b)

FIG. 3.3 – Représentation schématique du composite considéré dans Ricaud and Masson (2009) : *a*) à l'échelle la plus petites, les pores sont représentés par des points. *b*) après homogénéisation à l'échelle la plus petite (ψ est le potentiel effectif de la matrice poreuse). Sur les deux figures, les inclusions élastiques sont représentées par des disques hachurés.

Par ailleurs, l'extension à des problèmes viscoélastiques de type vieillissant est immédiate. Dans Ricaud and Masson (2009), nous avons illustré ce dernier point en simulant la densification d'un matériau composite constitué d'une matrice poreuse viscoélastique renforcée par des inclusions élastiques (voir Figure 3.3).

Compte-tenu de la faible fraction volumique d'inclusions, nous avons utilisé l'extension au cas viscoélastique linéaire du modèle de Mori-Tanaka qui se ramène à un simple modèle à variables internes. La diminution de la porosité dans la matrice conduit à une augmentation de sa compressibilité visqueuse avec le chargement, ce qui s'apparente à un comportement vieillissant. On tire alors profit de la représentation par variables internes pour construire incrémentalement une solution de type Mori-Tanaka au problème posé. Par comparaison à des calculs de référence (microstructure périodique), le modèle proposé représente parfaitement l'effet de cette densification sur le fluage effectif du composite considéré (voir Figure 3.4).

Notons pour finir que le traitement des non linéarités est aussi grandement simplifié. Nous reviendrons sur ce point dans le chapitre suivant.

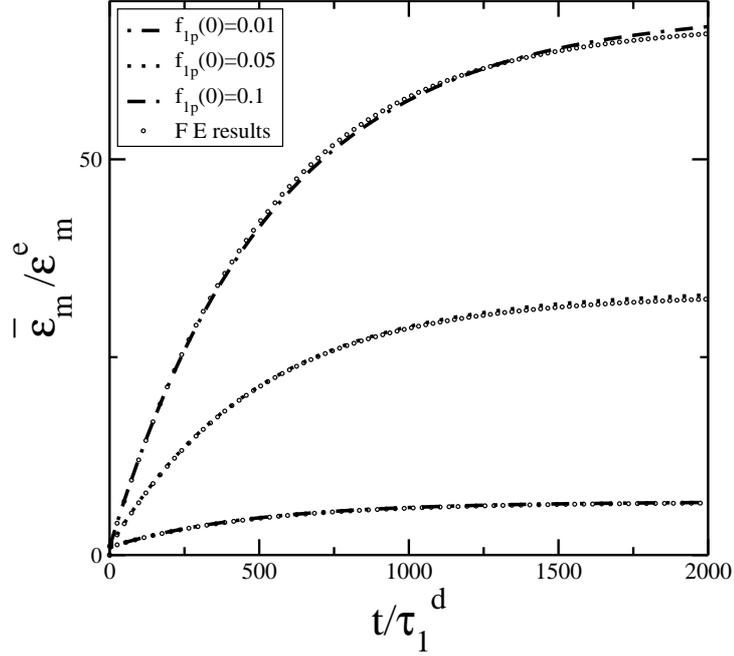


FIG. 3.4 – Évolution de la déformation macroscopique (normalisée par la déformation élastique) en fonction du temps pour différentes valeurs de la porosité initiale. Les résultats de référence obtenus par éléments finis sont comparés à ceux dérivés du modèle de Mori-Tanaka à variables internes proposé ($c_2 = 0.2$, $\xi \approx 2.3$, $\mu^e = 70 \text{ GPa}$ et $\bar{\sigma}^0 = -200 \text{ MPa}$).

3.4 L'approche par déformation libre, une alternative au théorème de correspondance ?

3.4.1 Remarque préliminaire

Si on étudie la réponse à une sollicitation de fluage du composite défini dans la section précédente, deux états asymptotiques peuvent être facilement identifiés :

- la réponse élastique qui caractérise la réponse instantanée (mise en charge) ;
- la réponse purement visqueuse aux temps longs, caractéristique du fluage stationnaire.

On peut définir pour, ces deux régimes de réponse, un matériau composite possédant la même distribution spatiale de phases que le composite viscoélastique mais dont le comportement est de type élastique linéaire :

- réponse purement élastique : phases élastiques linéaires. Dans le cas particulier étudié, les caractéristiques élastiques sont uniformes de sorte que :

$$\forall \mathbf{x} \in V \quad \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \bar{\boldsymbol{\sigma}}, \quad \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x}) = \bar{\boldsymbol{\epsilon}} = \frac{1}{3k^e} \bar{\sigma}_m \boldsymbol{\delta} + \frac{1}{2\mu^e} \bar{\mathbf{s}}$$

- réponse purement visqueuse : comportement de chaque phase (s) caractérisé par

une relation de type élastique linéaire entre la contrainte et la vitesse de déformation selon

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2\mu_s^v} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}), \quad \dot{\varepsilon}_m(\mathbf{x}) = \frac{1}{3k_s^v} \sigma_m(\mathbf{x}).$$

La réponse effective est alors définie par :

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}} = \frac{1}{2\tilde{\mu}^v} \bar{\boldsymbol{\sigma}} \quad \text{et} \quad \dot{\varepsilon}_m = \frac{1}{3\tilde{k}^v} \bar{\sigma}_m,$$

expression dans laquelle les propriétés effectives $(\tilde{\mu}^v, \tilde{k}^v)$ sont estimées par la méthode d'homogénéisation retenue.

Si on utilise l'estimation de Mori-Tanaka pour calculer la réponse effective du composite viscoélastique linéaire, on s'attend donc à retrouver dans ces deux régimes les estimations de Mori-Tanaka des composites de type élastique linéaire ainsi définis.

Ce sont les théorèmes de la valeur initiale et de la valeur finale qui assure cette cohérence. Soit dans le cas particulier considéré :

$$\lim_{p \rightarrow +\infty} \tilde{\mu}^*(p) = \mu^e \quad \lim_{p \rightarrow 0} \frac{1}{p} \tilde{\mu}^*(p) = \tilde{\mu}^v,$$

des relations similaires pouvant être dérivées pour le module de compressibilité effectif.

Quelle que soit la méthode retenue par la suite, elle doit a minima donner des estimations cohérentes avec les deux états asymptotiques définis dans cette section, lorsqu'ils existent. Cette condition de cohérence va nous être utile dans le paragraphe suivant.

3.4.2 L'approche par déformations libres (homogènes par phase)

Pour les comportements considérés dans ce mémoire, on peut écrire la loi de comportement en un point (\mathbf{x}) du VER de la façon suivante :

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{x}, t) = (\mathbf{L}^{e(r)})^{-1} : \dot{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{x}, t) + \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^v(\mathbf{x}, t), \quad (3.37)$$

$\boldsymbol{\varepsilon}^v(\mathbf{x}, t)$ désignant la déformation visqueuse au point \mathbf{x} de la phase (r) considéré :

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^v(\mathbf{x}, t) = \mathbf{M}^{v(r)} : \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t),$$

tandis que $\mathbf{L}^{e(r)}$ est le module élastique de la phase d'indice (r) . Cette nouvelle expression permet d'assimiler le comportement des différentes phases du composite à un comportement élastique linéaire avec déformation libre. Le comportement effectif est alors défini par :

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}(t) = (\bar{\mathbf{L}}^e)^{-1} : \dot{\bar{\boldsymbol{\sigma}}}(t) + \dot{\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}}^v(t),$$

la vitesse de déformation visqueuse macroscopique étant assimilée à la déformation libre macroscopique (déformation de l'élément de volume s'il est libre de contrainte) tandis

que $\bar{\mathbf{L}}^e$ désigne le module élastique effectif.

Si on souhaite utiliser un modèle d'homogénéisation, on va en général considérer des déformations libres homogènes par phase (voir, par exemple Weng (1981) dans le cas du modèle autocohérent). Ainsi pour chacune des phases (r) constituant le composite considéré :

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^v(\mathbf{x}, t) \approx \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{v(r)}(t), \quad (3.38)$$

de sorte que le comportement dans cette phase s'écrit à présent :

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{x}, t) = (\mathbf{L}^{e(r)})^{-1} : \dot{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{x}, t) + \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{v(r)}(t).$$

Reste à choisir les déformations libres homogènes par phase : on général, on choisit les valeurs moyennes par phase :

$$r = 1, 2 : \quad \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{v(r)}(t) = \langle \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^v(t) \rangle_r = \mathbf{M}^{v(r)} : \langle \boldsymbol{\sigma}(t) \rangle_r \quad (3.39)$$

Cette dernière hypothèse conduit à de mauvaises estimations : les réponses obtenues sont en général trop "raides" et conduisent à des contraintes internes trop élevées. Pour s'en convaincre, reprenons l'exemple du composite biphasé maxwellien précédent. Les modules élastiques étant homogènes dans le cas particulier considéré, on obtient :

$$\dot{\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}}^v(t) = \langle \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^v(t) \rangle = c_1 \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{v(1)}(t) + c_2 \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{v(2)}(t),$$

le modèle de Mori-Tanaka conduisant à l'estimation suivante des moyennes par phase des contraintes dans chacune des phases :

$$\begin{aligned} \langle \boldsymbol{\sigma}(t) \rangle_1 &= \bar{\boldsymbol{\sigma}} + c_2 \mathbf{L}^e (\mathbf{I} - \mathbf{S}) \left(\boldsymbol{\varepsilon}^{v(2)}(t) - \boldsymbol{\varepsilon}^{v(1)}(t) \right) \\ \langle \boldsymbol{\sigma}(t) \rangle_2 &= \bar{\boldsymbol{\sigma}} + c_1 \mathbf{L}^e (\mathbf{I} - \mathbf{S}) \left(\boldsymbol{\varepsilon}^{v(1)}(t) - \boldsymbol{\varepsilon}^{v(2)}(t) \right), \end{aligned} \quad (3.40)$$

\mathbf{S} désignant le tenseur d'Eshelby associé à une inclusion sphérique plongée dans un milieu infini de modules $\bar{\mathbf{L}}^e$. Si on prend la dérivée temporelle de ces deux relations, on obtient :

$$\begin{aligned} \langle \dot{\boldsymbol{\sigma}}(t) \rangle_1 &= \dot{\bar{\boldsymbol{\sigma}}} + c_2 \mathbf{L}^e (\mathbf{I} - \mathbf{S}) \left(\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{v(2)}(t) - \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{v(1)}(t) \right) \\ \langle \dot{\boldsymbol{\sigma}}(t) \rangle_2 &= \dot{\bar{\boldsymbol{\sigma}}} + c_1 \mathbf{L}^e (\mathbf{I} - \mathbf{S}) \left(\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{v(1)}(t) - \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{v(2)}(t) \right). \end{aligned} \quad (3.41)$$

En injectant dans ces nouvelles relations les définitions des déformations libres (3.39), on obtient les équations d'évolution des contraintes moyennes par phase avec l'approche proposée. Par ailleurs, on remarque que dans le régime de fluage stationnaire, les vitesses de contrainte s'annulent de sorte que, compte-tenu des relations (3.41) :

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{v(2)}(t) = \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{v(1)}(t) = \dot{\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}}^v.$$

Autrement dit, on obtient le modèle de Voigt dans cet état de fluage stationnaire alors qu'on s'attend à retrouver le modèle de Mori-Tanaka dans ce régime (voir section précédente). Cet exemple nous permet donc de mettre en évidence les limites de l'approche par

déformation libre, plus précisément, l'approche par déformation libre homogène par phase.

Remarque : Dans le problème de la sphère creuse sous pression étudié en section 3.1.1, la solution en déplacement a été dérivée de l'emploi du théorème de correspondance, en particulier l'expression (3.11) pour une matrice possédant un comportement de Maxwell. Le champ de déformation dérivant de la solution en déplacement (3.11) peut se décomposer en une partie élastique et visqueuse selon :

$$\dot{\epsilon}(r, t) = \frac{1}{3k^e} \dot{\sigma}_m(r, t) \boldsymbol{\delta} + \frac{1}{2\mu^e} \dot{\mathbf{s}}(r, t) + \dot{\epsilon}^v(r, t),$$

la distribution radiale des déformations visqueuses dans la matrice étant définie par :

$$\dot{\epsilon}_{rr}^v(r, t) = -\frac{1}{\mu^v r^3} \int_0^t A_2(u) du, \quad \dot{\epsilon}_{\theta\theta}^v(r, t) = \dot{\epsilon}_{\phi\phi}^v(r, t) = \frac{1}{2\mu^v r^3} \int_0^t A_2(u) du.$$

Cette solution constituant la solution de référence, utiliser l'approche par déformation libre homogène par phase pour résoudre ce problème de la sphère creuse sous pression consiste donc à approcher le comportement de la matrice par :

$$\dot{\epsilon}(r, t) = \frac{1}{3k^e} \dot{\sigma}_m(r, t) \boldsymbol{\delta} + \frac{1}{2\mu^e} \dot{\mathbf{s}}(r, t) + \dot{\epsilon}^{v(m)},$$

$\dot{\epsilon}^{v(m)}$ désignant cette déformation libre homogène dans la matrice. On remplace donc une distribution de déformation en $\frac{1}{r^3}$ dans la matrice par une constante. C'est donc bien l'approximation (3.38) qui pose problème dans cette approche⁴.

3.5 Conclusions, perspectives

Nous verrons dans le chapitre suivant qu'une des façons d'aborder le problème de l'homogénéisation de matériaux hétérogènes élastoviscoplastiques est de faire appel, après linéarisation, à un Milieu Linéaire de Comparaison de type viscoélastique linéaire. Les développements rapportés dans ce chapitre vont, de ce point de vue, s'avérer très utiles.

Si on reste dans le domaine de la viscoélasticité linéaire, nous avons vu que l'étude de trajets de chargement réels conduit souvent à un comportement de type vieillissant. Or, nous avons expliqué que le traitement par le théorème de correspondance nécessite, en général, d'employer la méthode des collocations, ce qui est équivalent, comme nous l'avons montré, à introduire un nombre fini de variables internes (voir section 3.3). Le

⁴L'hypothèse d'une déformation libre homogène dans la matrice constituant la sphère creuse modifie en effet significativement la solution en déplacement qui s'écrit alors :

$$u(r) = Ar + \frac{B}{r^2} + Cr \ln(r).$$

La solution en déplacement de référence est donc modifiée par l'ajout d'un terme ($Cr \ln(r)$) non nul dès lors que la vitesse de déformation libre est non nulle ($C = \frac{6\mu^e}{4\mu^e + 9k^e} \dot{\epsilon}_{rr}^{0(m)}$). Ce terme additionnel permet au champ de déplacement de satisfaire les équations de Navier.

traitement du cas vieillissant est alors immédiat. L'approximation quasi-élastique devrait aussi permettre un traitement plus aisé du cas vieillissant mais, comme nous l'avons vu, cette approximation reste moins générale.

A noter enfin que les travaux de thèse de J. Julien (en collaboration avec JC Michel et M. Garageu du Laboratoire de Mécanique et d'Acoustique (Marseille) ainsi que des collègues du Laboratoire de Simulation des Combustibles (CEA)) visent à rendre compte de façon plus réaliste la description du couplage entre le gonflement gazeux des cavités et le fluage des pastilles combustibles tel que illustré dans la section 3.1.1. Ces travaux ont déjà fait l'objet de communications (voir Julien *et al.* (2006) et Julien *et al.* (2007)).

Comportements non linéaires, régimes transitoires

De nombreuses structures sont soumises à des trajets de chargement non monotones et non radiaux. Dans le cas des réacteurs à eau sous pression, on trouve de nombreux exemples de tels chargements : tenue de la cuve des réacteurs REP à un choc thermique pressurisé (voir, par exemple, Moinereau *et al.* (2006)), comportement thermomécanique des crayons combustibles (Baron *et al.* (2008)), ... Il faut souligner qu'un tel chargement peut même avoir des effets bénéfiques sur la tenue d'une structure (voir par exemple, l'effet de pré-chargement à chaud (voir figure 4.1 extraite de Lefevre *et al.* (2001)), situation pour laquelle nous avons étendu le critère de rupture par clivage de Beremin (1983)). Et, pour ces trajets de chargement généraux, la réponse des structures considérées est généralement de nature élastoviscoplastique.

Bref, le cadre des comportements élastoviscoplastiques pour l'homogénéisation des matériaux hétérogènes doit nécessairement être abordé si l'on veut étudier des structures réelles. Or, il existe de nombreuses façons différentes et complémentaires d'aborder la question suivante : soit un VER V d'un matériau hétérogène constitué de phases possédant un comportement élastoviscoplastique et soumis à un trajet de chargement donné : quelle est la réponse effective de ce VER à cette sollicitation ? La loi de comportement élastoviscoplastique d'une des phases (s) du VER considéré sera de la forme :

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}(\boldsymbol{x}, u) = \boldsymbol{M}^{e(s)} : \dot{\boldsymbol{\sigma}}(\boldsymbol{x}, u) + \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^v(\boldsymbol{x}, u), \quad (4.1)$$

$\boldsymbol{M}^{e(s)}$ désigne sa souplesse élastique tandis que la vitesse de déformation viscoplastique $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^v$ dérive du potentiel de dissipation $\phi^{(s)}$ de la phase d'indice (s) selon :

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^v = \frac{\partial \phi^{(s)}}{\partial \boldsymbol{\sigma}}(\boldsymbol{\sigma}). \quad (4.2)$$

On note en particulier que le potentiel de dissipation ne dépend pas de variables internes additionnelles (déformation viscoplastique cumulée, ...), afin uniquement de simplifier les développements analytiques qui suivent. Le VER étant soumis à une histoire de déformation homogène à son bord $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}(t)$, les champs de déplacement, déformation et contrainte

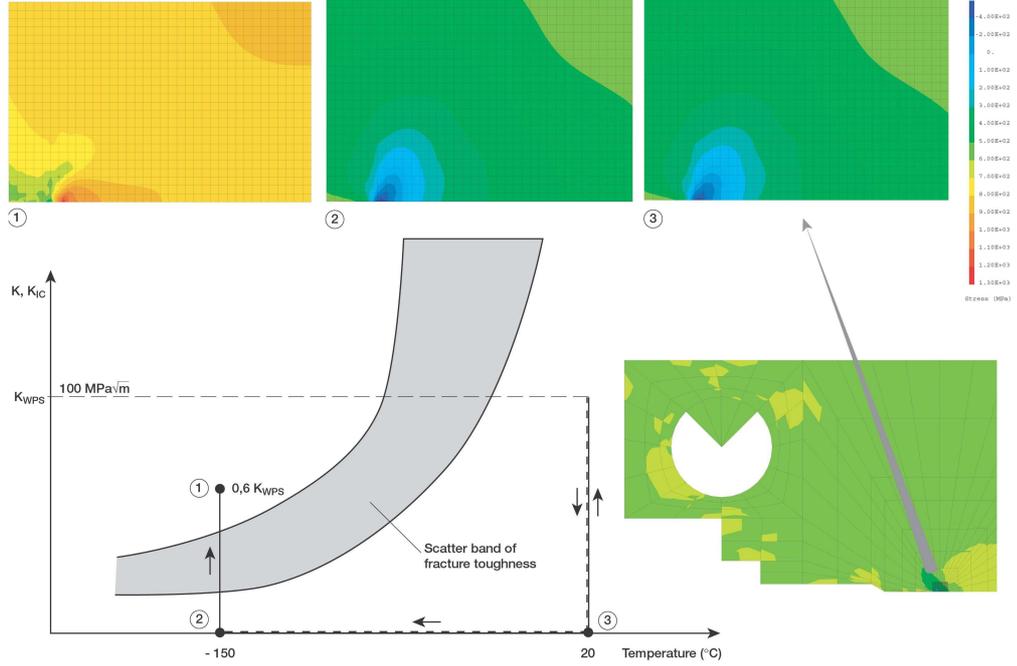


FIG. 4.1 – Illustration de l’effet de pré-chargement à chaud : une éprouvette CT est sollicitée à 20°C jusqu’à un facteur d’intensité des contraintes (FIC) de $100 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ puis déchargée, refroidie jusqu’à -150°C , puis chargée à nouveau à cette température. A -150°C , l’éprouvette ne casse pas pour des niveaux de FIC dépassant ses caractéristiques à rupture (autour de $40 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$). C’est l’effet bénéfique du pré-chargement à chaud (dans la zone ductile, ici à 20°C) qui explique cette augmentation de ténacité apparente dans la zone fragile, ici à -150°C . Les calculs mettent en évidence une forte mise en compression en pointe de défaut après décharge à 20°C (contraintes résiduelles).

inconnus sont solutions du problème différentiel suivant (hypothèse des petites perturbations, pas de forces de volume) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{u}(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{0} \quad \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}, 0) = \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{0} \\ \text{div}(\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t)) = \mathbf{0} \\ \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2}(\nabla\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) + (\nabla\mathbf{u}(\mathbf{x}, t))^T) \\ \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{M}^{e(s)} : \dot{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{x}, t) + \frac{\partial\phi^{(s)}}{\partial\boldsymbol{\sigma}}(\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t)) \\ \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}(t) \mathbf{x} \quad \text{pour tout } \mathbf{x} \text{ sur } \partial V. \end{array} \right. \quad (4.3)$$

Il n’existe pas à l’heure actuelle de méthode d’homogénéisation universelle et indiscutable pour résoudre le problème (4.3). En réalité, le problème a fait l’objet de nombreux travaux souvent complémentaires que l’on peut schématiquement répartir selon les thématiques suivantes :

- le traitement du couplage élasticité-viscoplasticité : plusieurs solutions existent allant d’un traitement découplé (homogénéisation séparée des déformations élastiques et viscoplastiques) à un traitement cohérent avec le traitement du cas viscoélastique linéaire (voir Rougier *et al.* (1994) et Masson and Zaoui (1999)), en passant par diverses solutions approchées (Sabar *et al.* (2002), Lahellec and Suquet (2007), ...);
- le traitement des non linéarités (voir Bornert *et al.* (2001) et, plus récemment, Rekik *et al.* (2007) pour une comparaison systématique des différentes méthodes de linéarisation proposées).

Parallèlement, ce sont aussi développées des méthodes visant à simplifier les approches d’homogénéisation classiques. Je pense en particulier à l’approche “en bêta”, (Cailletaud (1987) et Pilvin (1990)). Le modèle “RL” proposé plus récemment par Rousselier and Leclercq (2006), s’inspire de cette approche en bêta tout en cherchant à réduire drastiquement le nombre de variables internes pour le calcul des polycristaux. Enfin, l’approche “NTFA” proposée par Michel and Suquet (2003) reste sans doute la proposition la plus originale de ces dernières années sur ce thème de recherche. Elle permet de faire le lien avec les calculs de micro-structure dont elle tire des modes de déformations. Cette méthode semble redoutablement efficace, mais reste à généraliser (3D, chargements non monotones, polycristaux, ...).

C’est essentiellement la question du traitement du couplage élasticité-viscoplasticité que j’aborde dans ce travail de synthèse. Sur ce thème, je reviens tout d’abord (section 4.1) sur la démarche générale adoptée pour étendre à des comportements non linéaires les méthodes d’homogénéisation présentées dans les chapitres précédents. Dans la section 4.2 sont rapportées différentes contributions, le point de départ de ces travaux étant le modèle Affine élastoviscoplastique (Masson and Zaoui (1999)) dont je rappelle tout d’abord les principaux ingrédients (voir 4.2.1). Je reviens ensuite sur les variantes “quasi-élastiques” de ce modèle Affine. C’est l’occasion de décrire le modèle Affine quasi-élastique “amélioré” proposé en collaboration avec R. Brenner. Ce modèle combine l’efficacité de la méthode d’inversion quasi-élastique déjà présenté précédemment à la nouvelle méthode de linéarisation du second-ordre proposée par Ponte Castañeda (2002a). Ce travail sera détaillé dans la section 4.2.2. Enfin, la dernière section 4.3 de ce chapitre est la suite logique du nouveau point de vue proposé dans le chapitre consacré à la viscoélasticité linéaire (voir section 3.3). C’est en quelque sorte un “retour aux sources” puisqu’il s’agit de revisiter la proposition Masson and Zaoui (1999) avec le point de vue “variables internes”. Cette formulation équivalente présente l’avantage d’être directement “intégrable” dans un code aux éléments finis en vue de simuler les chargements thermomécaniques cités au début de cette introduction !

4.1 Extension à des comportements non linéaires, principe général

4.1.1 L'approche par "Milieu linéaire de Comparaison"

On considère un matériau hétérogène dont le comportement de chaque phase (r) est décrit par la loi de comportement élastoviscoplastique (4.1). Comme expliqué ci-dessus, le potentiel de dissipation ne dépend pas de variables internes pour simplifier les développements qui suivent (voir Masson and Zaoui (1999) pour le traitement du cas avec variables internes). Le principe général consiste à approcher à chaque instant (u) la vitesse de déformation viscoplastique par une relation linéaire selon :

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^v(\boldsymbol{x}, u) = \frac{\partial \phi^{(r)}}{\partial \boldsymbol{\sigma}}(\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{x}, u)) \approx \boldsymbol{M}^{v(r)}(u) : \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{x}, u) + \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{0(r)}(u),$$

plusieurs choix étant possibles pour les quantités $\boldsymbol{M}^{v(r)}(u)$ et $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{0(r)}(u)$. Pour aller plus loin avec la méthodologie proposée, ces quantités seront nécessairement choisies uniformes dans chacune des phases constituant le VER. A l'instant (u) considéré, la vitesse de déformation en chacun des points de la phase (r) est approchée par :

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}(\boldsymbol{x}, u) \approx \boldsymbol{M}^{e(r)} : \dot{\boldsymbol{\sigma}}(\boldsymbol{x}, u) + \boldsymbol{M}^{v(r)}(u) : \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{x}, u) + \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{0(r)}(u). \quad (4.4)$$

Dans chaque phase (r), on reconnaît à l'instant (u) considéré un comportement visco-élastique linéaire avec vitesse de déformation libre imposée. Les caractéristiques de ce composite fictif et le chargement (déformations libres) étant homogènes par phase, nous pouvons appliquer les méthodes d'homogénéisation linéaire exposées au chapitre précédent. Ce composite fictif est appelé par la suite matériau linéaire de comparaison (MLC), notion introduite par Ponte Castañeda (1991).

Illustrons l'emploi de cette méthodologie générale dans le cas de la linéarisation sécante (comme souligné dans Ponte Castañeda and Suquet (1998), le module sécant n'est pas défini de manière unique. On choisit ici le module sécant isotrope), la vitesse de déformation libre $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{0(r)}(u)$ s'annule de sorte que :

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^v(\boldsymbol{x}, u) = \frac{\partial \phi^{(r)}}{\partial \boldsymbol{\sigma}}(\boldsymbol{\sigma}) \approx \boldsymbol{M}^{v(r)}(u) : \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{x}, u).$$

Prenons par exemple le cas du composite biphasé étudié dans le chapitre 3. Supposons que les deux phases obéissent à présent à un comportement visqueux non linéaire incompressible selon :

$$\phi^{(r)}(\boldsymbol{\sigma}) = \frac{\dot{\varepsilon}_r^0 \sigma_r^0}{n_r + 1} \left[\frac{\sigma_{eq}}{\sigma_r^0} \right]^{n_r + 1},$$

($n_r, \dot{\varepsilon}_r^0, \sigma_r^0$) désignant des constantes caractéristiques du fluage dans la phase (r). La vitesse de déformation visqueuse dans chacune des phases (r) de ce composite obéit à :

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^v(\boldsymbol{x}, u) = \dot{\varepsilon}_r^0 \left[\frac{\sigma_{eq}(\boldsymbol{x}, u)}{\sigma_r^0} \right]^{n_r} \frac{3}{2\sigma_{eq}(\boldsymbol{x}, u)} \boldsymbol{s}(\boldsymbol{x}, u),$$

relation qui peut être approché à chaque instant (u) et en chacun des points \mathbf{x} de la phase considérée par la relation (4.4) avec :

$$\mathbf{M}^{v(r)}(u) = \frac{1}{2\mu_r^v(u)} \mathbf{K} \quad \text{et} \quad \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{0(r)}(u) = 0. \quad (4.5)$$

Au module sécant linéarisé de la phase (r) à l'instant (u) peut être associée arbitrairement une contrainte de référence dans cette phase et à cet instant $\sigma_r(u)$ selon la relation :

$$\frac{1}{2\mu_r^v(u)} = \frac{3\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_r^0}{2\sigma_r^0} \left[\frac{\sigma_r(u)}{\sigma_r^0} \right]^{n_r-1},$$

ou encore :

$$\mu_r^v(u) = \frac{2\sigma_r^0}{3\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_r^0} \left[\frac{\sigma_r(u)}{\sigma_r^0} \right]^{n_r-1}.$$

Il nous reste à définir les quantités de référence par phase $\sigma_r(u)$ à chaque instant (u). Là-encore, plusieurs choix sont possibles :

- le choix le plus simple est d'adopter la contrainte macroscopique $\bar{\boldsymbol{\sigma}}$, ce qui revient à adopter le modèle de Reuss pour le Milieu Linéaire de Comparaison obtenu ;
- on peut aussi utiliser la contrainte moyenne dans la phase (r) considérée telle qu'estimée avec le Milieu Linéaire de Comparaison soumis à la contrainte macroscopique $\bar{\boldsymbol{\sigma}}$;
- on peut, plus généralement, utiliser d'autres quantité déduites de ce Milieu Linéaire de Comparaison, par exemple le moment d'ordre deux des contraintes. Nous reviendrons sur ce choix plus loin.

Toutes ces quantités étant des tenseurs d'ordre deux, il faudra prendre un de leurs invariants pour définir le scalaire $\sigma_r(u)$. Pour le fluage (cisaillement), on adopte généralement la contrainte équivalente de von Mises. A noter que dans le cas particulier d'un comportement purement visqueux (les souplesses élastiques dans chacune des phases tendent vers zéro), ces deux derniers choix correspondent respectivement à l'extension sécante classique (Berveiller and Zaoui (1979) et Tandon and Weng (1988)) et l'extension sécante classique modifiée (Suquet (1995)), méthode qui coïncide avec l'approche variationnelle développée par Ponte Castañeda (1991).

Plutôt qu'une linéarisation sécante, on peut adopter une linéarisation tangente. C'est le choix retenu dans le cas de l'approche "Affine", on fait le choix d'un développement au premier ordre de la relation (vitesse de déformation viscoplastique - contrainte) autour d'une quantité de référence par phase $\bar{\boldsymbol{\sigma}}^{(r)}(t)$ définie à l'instant de linéarisation t comme la moyenne des contraintes dans la phase considérée apparaissant dans le Milieu Linéaire de Comparaison soumis à la contrainte macroscopique $\bar{\boldsymbol{\sigma}}(t)$ (voir Rougier *et al.* (1994)). Nous revenons sur cette méthode dans la section 4.2.1.

Enfin, on peut aussi supposer que la vitesse de déformation viscoplastique dépend peu de la contrainte de sorte qu'elle est assimilée à une déformation libre (Weng (1981)), la souplesse étant nulle. Nous avons vu les limites d'une telle approche (voir section 3.4),

lorsque la vitesse de déformation libre est choisie homogène par phase.

Dans tous les cas, il nous reste une étape à franchir pour estimer à l'instant t considéré la réponse macroscopique du VER (ici sa déformation macroscopique). Dans le cas de la méthode Affine, c'est la loi de comportement de chaque phase qui permet d'estimer la déformation moyenne (voir plus loin section 4.2.1). Ainsi, dans la phase (r) :

$$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^{(r)}(t) \approx LC\{\bar{\boldsymbol{\sigma}}^{(r)}(u)\}_{0 \leq u \leq t}, \quad (4.6)$$

LC désignant la loi de comportement de la phase (r) considérée. Quel est le sens physique de cette approximation ? Si en chaque point de chacune des phases (r) constituant le VER, la contrainte locale et la déformation locale sont liées par la loi de comportement de la phase considérée, ce ne sera plus vrai entre les quantités moyennes, sauf dans quelques cas particuliers (problèmes linéaires, champs uniformes, ...). La relation précédente n'est donc qu'une approximation permettant de calculer au mieux la moyenne des déformations dans la phase (r) considérée connaissant la moyenne des contraintes. Dans le paragraphe suivant, nous étudions plus précisément l'effet de cette approximation sur les estimations obtenues.

4.1.2 Comparaisons pour des régimes stationnaires

Lorsque dans chacune des phases constituant le VER, les souplesses élastiques tendent vers zéro, le comportement des constituants devient purement viscoplastique. La vitesse de déformation dans chacune des phases du VER s'identifie donc à la vitesse de déformation viscoplastique, selon :

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}(\boldsymbol{x}) = \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^v(\boldsymbol{x}) = \frac{\partial \phi^{(r)}}{\partial \boldsymbol{\sigma}}(\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{x})). \quad (4.7)$$

Ce comportement purement viscoplastique correspond en réalité à des situations particulières, comme par exemple, un état de fluage stationnaire. L'intérêt de considérer de telles situations repose sur le fait qu'on définit ainsi un cadre de comparaison simple qui permet de ne pas se préoccuper de l'histoire de chargement imposé. On se concentre sur le calcul de la courbe de réponse effective constituée des couples $(\bar{\boldsymbol{\sigma}}, \dot{\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}}(\bar{\boldsymbol{\sigma}}))$. Dans certains cas particuliers, la forme de ces courbes peut même être déterminée. Par exemple, si la vitesse de déformation dans chacune des phases s'écrit comme une loi puissance avec le même exposant pour toutes les phases, la courbe de réponse effective obéit aussi à une loi puissance.

L'étude de ces régimes stationnaires va nous permettre d'étudier les effets de l'approximation (4.6) sur la prédiction du comportement effectif de polycristaux puis nous considérerons le cas particulier des milieux poreux.

Cas des polycristaux

Le VER considéré à présent est un agrégat de cristaux désorientés. Une phase représente les cristallites possédant la même orientation caractérisée par trois angles d'Euler.

La déformation viscoplastique des cristallites se fait par glissement de dislocations sur des plans du mono-cristal. Dans le repère propre du cristal, un mécanisme de glissement (k) est défini par un plan de glissement (de normale $n_{(k)}$) et une direction de glissement dans ce plan (notée $m_{(k)}$). Dans ce même repère propre, la loi de comportement (fluage stationnaire) s'écrit :

$$\dot{\epsilon} = \sum_k \dot{\gamma}_{(k)} \boldsymbol{\mu}_{(k)},$$

le tenseur (du deuxième ordre) d'orientation $\boldsymbol{\mu}_{(k)}$ attaché au système (k) étant défini par :

$$\boldsymbol{\mu}_{(k)} = \frac{1}{2} (n_{(k)} \otimes m_{(k)} + m_{(k)} \otimes n_{(k)}).$$

Dans l'exemple considéré ici, la vitesse de glissement sur chaque système de glissement (k) obéit à une loi puissance,

$$\dot{\gamma}_{(k)} = \dot{\gamma}^0 \left| \frac{\tau_{(k)}}{\tau_{(k)}^0} \right|^{n_{(k)}} \quad (4.8)$$

$\tau_{(k)}$ désignant la cission résolue sur le système (k) (critère de Schmid) :

$$\tau_{(k)} = \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\mu}_{(k)},$$

Certains cristaux possèdent une seule famille de glissement. C'est par exemple le cas du cuivre de structure cristallographique cubique à faces centrées dans lequel les plans de glissement sont les plans octaédriques. Mais on trouve aussi d'autres situations pour lesquelles, il existe plusieurs familles de glissement. Dans ce cas, les constantes ($n_{(k)}$, $\tau_{(k)}^0$) peuvent être différentes selon le système de glissement considéré. Dans Bornert *et al.* (2001), nous avons en particulier étudié la glace dont les cristaux possèdent une structure hexagonale avec plusieurs familles de glissement (voir Figure 4.2). Ce type de structure polycristalline avait déjà été étudié par Hutchinson (1977) avec l'approche "incrémentale" développée dans Hutchinson (1976). L'étude de la glace présente en effet deux intérêts. Tout d'abord, ses propriétés viscoplastiques sont assez bien connues : des expériences menées à la fois sur des mono-cristaux et des polycristaux (voir Duval *et al.* (1983)) ont montré que :

- la déformation viscoplastique est principalement pilotée par le glissement basal et, dans une moindre mesure, par le glissement prismatique ;
- la loi de fluage macroscopique stationnaire est correctement approchée par une loi puissance avec un exposant voisin de 3.

A noter que les capacités d'accommodation offertes par les systèmes de glissement considérés pour la glace sont limitées. Il n'y a pas en particulier de possibilité d'accommodation selon l'axe du cristal. Cette situation conduit à des fortes incompatibilités des déformations entre les cristaux d'orientation différentes, situations pour lesquelles les écarts entre les différentes estimations du comportement effectif du polycristal (sécant, affine, ...) vont être importants. C'est pourquoi nous avons étudié cette situation dans Bornert *et al.* (2001).

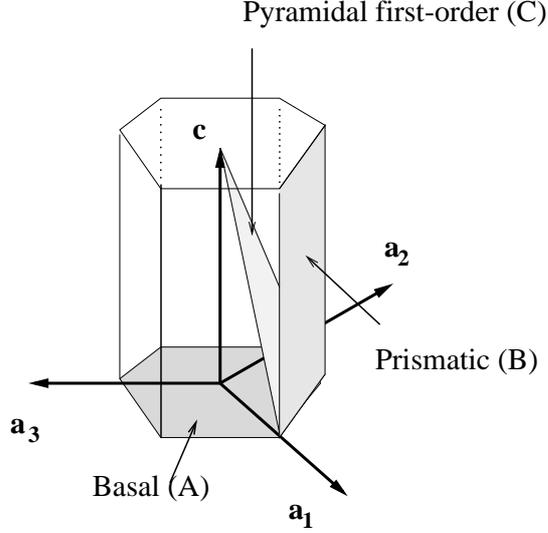


FIG. 4.2 – Plans de glissement basal, prismatique et pyramidal du premier ordre dans un cristal de symétrie hexagonale.

L'étude de ces états stationnaires présentent un autre intérêt que nous allons à présent exploiter : pour une contrainte macroscopique imposée $\boldsymbol{\sigma}$, la vitesse de déformation macroscopique $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}$ dérive d'un potentiel. Ainsi, soit $\bar{\phi}(\boldsymbol{\sigma})$ le potentiel effectif du VER défini par :

$$\bar{\phi}(\boldsymbol{\sigma}) = \min_{\boldsymbol{\sigma} \in S} \frac{1}{|V|} \int_V \phi(x, \boldsymbol{\sigma}) dx, \quad (4.9)$$

S désignant l'ensemble des champs de contrainte statiquement admissible avec la contrainte macroscopique $\bar{\boldsymbol{\sigma}}$ imposée au bord du VER. La vitesse de déformation macroscopique est alors donnée par :

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}} = \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial \bar{\boldsymbol{\sigma}}}(\bar{\boldsymbol{\sigma}}). \quad (4.10)$$

Réciproquement, pour une vitesse de déformation macroscopique imposée $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}$, on peut définir un potentiel dont dérive la réponse du VER (la contrainte macroscopique $\bar{\boldsymbol{\sigma}}$). Ce potentiel est défini par :

$$\bar{W}(\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}) = \min_{\dot{\boldsymbol{\varepsilon}} \in K} \frac{1}{|V|} \int_V w(x, \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}) dx \quad (4.11)$$

K désignant l'ensemble des champs de vitesse de déformation cinématiquement admissibles avec la vitesse de déformation moyenne $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}$. Dans une phase (r) donnée, le potentiel local $w^{(r)}(\dot{\boldsymbol{\varepsilon}})$ est tel que :

$$\boldsymbol{\sigma}(x) = \frac{\partial w^{(r)}}{\partial \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}}(\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}),$$

les potentiels $w^{(r)}$ et $\phi^{(r)}$ de chaque phase (r) étant liés par la relation :

$$w^{(r)}(\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}) = \max_{\boldsymbol{\sigma}} \left[\boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} - \phi^{(r)}(\boldsymbol{\sigma}) \right].$$

Il est important de souligner que la définition des potentiels effectifs $\bar{\phi}$ et \bar{W} n'est valable que pour l'étude des états stationnaires. Dans le cas général, la déformation en chaque point du VER se décompose en une partie élastique dérivant de l'énergie élastique complémentaire et une partie viscoplastique dérivant du potentiel de dissipation de sorte que les résultats précédents ne sont plus applicables. L'étude de ces régimes stationnaires nous permet néanmoins de jeter un regard critique sur un des ingrédients du modèle Affine exposé dans le paragraphe précédent (équation (4.6)) : ayant estimé la moyenne des contraintes dans chaque phase (à l'aide d'une méthode d'homogénéisation appliqué au Milieu Linéaire de Comparaison), cette hypothèse consiste à estimer la quantité duale (la moyenne de la vitesse de déformation) à l'aide de la loi de comportement de la phase considérée. Pour le comportement purement viscoplastique considéré, si on a déterminé la moyenne des vitesses de déformation dans la phase (r), la moyenne des contraintes dans cette même phase sera approchée par :

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_r \approx \frac{\partial w^{(r)}}{\partial \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}} (\langle \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} \rangle_r), \quad (4.12)$$

expression dont on déduit par simple moyenne la contrainte macroscopique :

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}} = \sum_r c_r \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_r.$$

L'approche par potentiel permet de s'affranchir de cette approximation (4.12) pour estimer la réponse effective, en particulier la méthode du second ordre proposée en 1996 dans Ponte Castañeda (1996). Comme la méthode Affine, cette méthode s'appuie sur une linéarisation tangente de la loi de comportement (soit donc un développement de Taylor au deuxième ordre du potentiel associé) et l'homogénéisation du Milieu Linéaire de Comparaison ainsi obtenu. De même, le choix de la quantité de référence par phase est la moyenne des vitesses de déformation (à vitesse de déformation macroscopique imposée) dans le Milieu Linéaire de Comparaison. L'approche du second ordre justifie même ce choix en établissant que parmi les choix possibles pour cette quantité de référence, celui-ci permet d'obtenir les deux conditions de stationnarité suivantes pour le potentiel effectif $\bar{W}(\dot{\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}})$:

$$\left(\frac{\partial \bar{W}}{\partial \dot{\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}}_r} \right)_{\dot{\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}}_r = \langle \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} \rangle_r} = \mathbf{0} \quad \left(\frac{\partial^2 \bar{W}}{\partial \dot{\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}}_r^2} \right)_{\dot{\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}}_r = \langle \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} \rangle_r} = \mathbf{0}$$

En revanche, la réponse effective est calculée par dérivation de l'estimation du potentiel effectif, ce qui permet d'éviter l'utilisation de l'approximation (4.12). On peut montrer (voir Masson *et al.* (2000)) que l'écart entre la contrainte macroscopique ainsi obtenue (notée $\bar{\boldsymbol{\sigma}}^{SOE}$) et la contrainte macroscopique (notée $\bar{\boldsymbol{\sigma}}^{AFF}$) prédite par la méthode Affine est égal à :

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}}^{SOE} - \bar{\boldsymbol{\sigma}}^{AFF} = \frac{1}{2} \sum_c c_s \left[\mathbf{N}_s : \frac{d\dot{\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}}_s}{d\dot{\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}}} \right] :: [\langle \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} \otimes \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} \rangle_s - \dot{\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}}_s \otimes \dot{\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}}_s],$$

avec $N_s = \frac{d^3 w_s}{d\dot{\epsilon}^3} (\dot{\epsilon}_s)$ et $\dot{\bar{\epsilon}}_s = \langle \dot{\epsilon} \rangle_s$. Cet écart n'est pas du tout négligeable dans certaines situations comme l'illustre la Figure 4.3 ¹. Sur cette figure est reportée l'évolution des propriétés en fluage de la glace. Dans ce cas particulier et pour une direction de traction selon e_3 , la courbe réponse $(\bar{\sigma}, \dot{\bar{\epsilon}}(\bar{\sigma}))$ s'écrit :

$$\bar{\sigma}_{33} = \tilde{\tau}^0 \left(\frac{\dot{\bar{\epsilon}}_{33}}{\dot{\gamma}^0} \right)^{\frac{1}{n}}.$$

Pour un exposant $n = 3$, les propriétés de fluage stationnaire de la glace sont donc définies par le paramètre $\tilde{\tau}^0$. Ont en particulier été comparés sur cette Figure 4.3 les résultats obtenus avec la méthode du second ordre (SOE) à ceux obtenus avec la méthode Affine (AFF). Le paramètre w contrôle la distribution des axes sénaires (axes c , voir Figure 4.2) dans le polycristal autour de l'axe de traction. $w = 10$ correspond à des axes sénaires situés dans un plan transverse à l'axe de traction. Dans ce cas, les incompatibilités de déformation entre cristallites sont faibles de sorte que les estimations des propriétés effectives avec ces deux modèles sont proches. En revanche, lorsque les axes sénaires des cristallites se rapprochent de la direction de traction, les écarts entre les prédictions des deux modèles deviennent très significatifs.

Nous ne reviendrons pas dans ce document sur la définition des modèles incrémental et tangent (INC et TAN sur la Figure 4.3). En revanche, nous attirons l'attention du lecteur sur le fait que, comme pour les estimations Affine ou du second ordre, le modèle d'homogénéisation linéaire utilisé pour ces modèles est le modèle auto-cohérent mais appliqué à des Milieux Linéaires de Comparaison différents. Vigilance donc lorsqu'on parle de modèle autocohérent : pour des comportements élastiques linéaires, le modèle autocohérent est unique tandis que pour des comportements non linéaires on trouve différentes "variétés" de ce modèle (...)

Nous nous sommes concentrés ici sur les comparaisons entre méthodes d'homogénéisation mais il faut souligner que les travaux rapportés dans Bornert *et al.* (2001) ont aussi mis clairement en évidence l'effet macroscopique des mécanismes de déformation dont l'intensité est du deuxième ordre à l'échelle du mono-cristal (glissements qualifiés de secondaire par opposition au mécanismes de glissement prépondérant (primaires) dans ce qui suit) dans le cas de polycristaux constitués de cristaux respectant la symétrie hexagonale :

- la nature des mécanismes de glissement secondaire (i.e. remplaçons le glissement prismatique (cas de la glace) par le glissement pyramidal (cas des alliages de zirconium)) a un effet du premier ordre sur la réponse effective. En particulier, on retrouve bien avec la méthode du second ordre la conjecture proposée dans Nebozhyn *et al.* (2000) ;
- si le système de glissement secondaire (prismatique ici) est caractérisé par une sensibilité à la vitesse différente ($n = 3$) du système de glissement primaire (basal, $n = 2$), la sensibilité à la vitesse macroscopique est, au premier ordre, celle du

¹Voir aussi les travaux de Bornert and Ponte Castañeda (1998) dans le cas de polycristaux bidimensionnels.

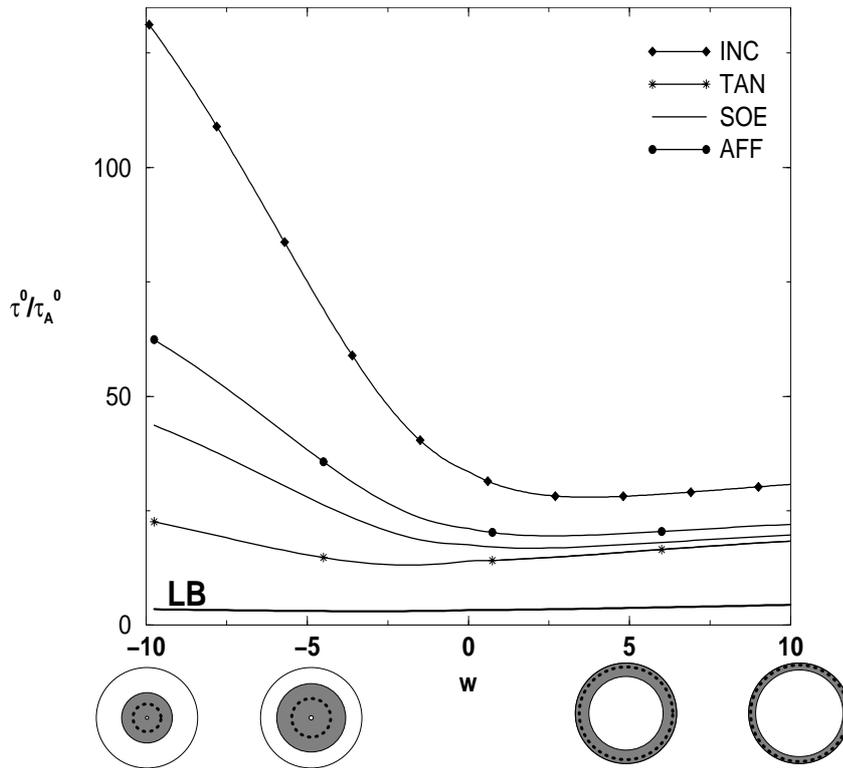


FIG. 4.3 – Fluage stationnaire de la glace : illustration des écarts obtenus entre les prédictions de la méthode Affine et la méthode du Second Ordre lorsque les incompatibilités entre grains deviennent élevées ($w = -10$).

glissement secondaire (donc $n \approx 3$). On conforte donc avec la méthode du second ordre (cette version de 1996) la proposition de Hutchinson (1977) d'adopter un exposant égal à 3 pour le fluage stationnaire de la glace.

Les systèmes de glissement dits secondaires ont un effet du premier ordre à l'échelle macroscopique, lorsqu'il y a peu de possibilités d'accommodation à l'échelle du cristal. Ce sont en fait ces systèmes secondaires qui permettent à l'agrégat de se déformer !

Du point de vue de la qualité des estimations, ce travail de comparaison nous a permis de mettre en évidence les effets négatifs de l'approximation (4.6) sur les estimations obtenues avec le modèle Affine. Dans le cas purement viscoplastique considéré dans cette section, cette approximation peut être corrigée (c'est la méthode du second ordre !). Dans le cas général (élastoviscoplastique) en revanche, cette correction est difficilement transposable. Nous verrons toutefois dans le paragraphe 4.2.2 qu'une proposition alternative peut être envisagée. A noter que nous nous sommes placés ici du point de vue des estimations et n'avons pas comparé ces estimations à des bornes (les bornes de Voigt et Reuss classiques mais aussi la borne supérieure établie dans Ponte Castañeda (1991)). Des tra-

vaux de comparaison avec ces bornes, entamés dès le milieu des années 1990 (Gilormini (1996) dans le cas de composites biphasés puis Nebozhyn *et al.* (2000) dans le cas de polycristaux, ...), ont clairement montré le caractère trop raide de certaines estimations, en particulier celles obtenues avec le modèle Affine.

Cas des milieux poreux

Le cas des milieux poreux constitués d'une matrice présentant un comportement viscoplastique non linéaire conduit à des situations nettement plus contrastées que la situation précédente.

Dans ce cas particulier, les limites de l'approximation (4.6) peuvent être simplement mises en évidence quelle que soit la microstructure (Masson *et al.* (2000)). La seule restriction dans le raisonnement qui suit porte sur le caractère incompressible de la matrice : le potentiel de dissipation ne dépend que du déviateur des contraintes \mathbf{s} . Dans ce cas, l'approximation (4.6) conduit à :

$$\langle \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} \rangle_m \approx \frac{\partial \phi^{(r)}}{\partial \boldsymbol{\sigma}} (\langle \mathbf{s} \rangle_m)$$

Or, pour un chargement macroscopique en contrainte défini par un cisaillement $\bar{\mathbf{s}}$ et une pression $-p_e \boldsymbol{\delta}$, on a :

$$\bar{\mathbf{s}} - p_e \boldsymbol{\delta} = (1 - f) \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_m$$

(f désigne la porosité). L'approximation (4.6) conduit donc à estimer une vitesse de déformation moyenne dans la matrice qui ne dépend pas de la pression macroscopique :

$$\langle \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} \rangle_m = \frac{\partial \phi^{(r)}}{\partial \boldsymbol{\sigma}} \left(\frac{1}{1 - f} \bar{\mathbf{s}} \right).$$

Les caractéristiques du Milieu Linéaire de Comparaison (modules sécants ou tangents calculés pour la contrainte moyenne dans la matrice) ne dépendent donc pas de la pression de sorte que la vitesse de déformation des pores dépend linéairement de la pression (relation de localisation linéaire donnée par le modèle d'homogénéisation linéaire retenu). Or, la vitesse de déformation dans les pores présente en générale une dépendance non linéaire à la pression macroscopique imposée, comme l'illustre la solution de la sphère creuse (voir, par exemple, Michel and Suquet (1992)).

A noter que même dans ce cas, la méthode du second ordre Ponte Castañeda (1996) présente des limitations. C'est pourquoi une alternative a été proposée dans Bilger *et al.* (2002) (voir aussi Vincent (2007) et, dans une version simplifiée, Julien *et al.* (2007)). L'approche proposée consiste à associer une linéarisation sécante modifiée et un problème d'inclusion multi-couches (au lieu du problème d'Eshelby dans le cadre de l'approche par motifs morphologiques proposée par Bornert *et al.* (1996)) pour limiter les effets (négatifs) de l'approximation (4.6). En parallèle, une version alternative de la méthode du second ordre a été proposée dans Ponte Castañeda (2002a) en 2002. Nous reviendrons plus loin sur cette proposition.

4.2 Le modèle Affine et ses variantes quasi-élastiques

4.2.1 Le modèle Affine, rappels

On considère un matériau hétérogène dont le comportement de chaque phase (r) est décrit par la loi de comportement élastoviscoplastique (4.1). Comme expliqué ci-dessus, le potentiel de dissipation ne dépend pas de variables internes pour simplifier les développements qui suivent (voir Masson and Zaoui (1999) pour le traitement du cas avec variables internes). Le développement au premier ordre autour d'une quantité de référence par phase $\bar{\sigma}^{(r)}(t)$ définie à l'instant de linéarisation t conduit à l'expression linéarisée (voir Rougier *et al.* (1994)) :

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{x}, u) = \mathbf{M}^{e(r)} : \dot{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{x}, u) + \mathbf{M}^{v(r)}(t) : \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, u) + \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{0(r)}(u, t). \quad (4.13)$$

Dans cette expression linéarisée, la souplesse visqueuse ne dépend plus de temps. Elle dépend seulement de l'instant de linéarisation t selon :

$$\mathbf{M}^{v(r)}(t) = \frac{\partial^2 \phi^{(r)}}{\partial \boldsymbol{\sigma}^2} \left(\bar{\boldsymbol{\sigma}}^{(r)}(t) \right) \quad (4.14)$$

La vitesse de déformation libre est définie de la façon suivante :

$$\begin{cases} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{0(r)}(u, t) = \frac{\partial^2 \phi^{(r)}}{\partial \boldsymbol{\sigma}^2} \left(\bar{\boldsymbol{\sigma}}^{(r)}(u) \right) - \mathbf{M}^{v(r)}(t) : \bar{\boldsymbol{\sigma}}^{(r)}(u) & u \leq t \\ \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{0(r)}(u, t) = \frac{\partial^2 \phi^{(r)}}{\partial \boldsymbol{\sigma}^2} \left(\bar{\boldsymbol{\sigma}}^{(r)}(t) \right) - \mathbf{M}^{v(r)}(t) : \bar{\boldsymbol{\sigma}}^{(r)}(t) & u \geq t \end{cases} \quad (4.15)$$

Cette linéarisation peut-être vue comme une approximation d'une linéarisation plus générale exprimée autour d'une histoire de contrainte (Pouya and Zaoui (1999)). La relation (4.13) définit ainsi un Milieu Linéaire de Comparaison qui dépend des quantités de référence par phase $\bar{\boldsymbol{\sigma}}^{(r)}(t)$, encore inconnues. Ce Milieu Linéaire de Comparaison, défini à l'instant (t) de linéarisation choisi, est de type viscoélastique linéaire non vieillissant avec déformation libre imposée. Si on adopte pour les quantités de référence par phase les contraintes moyennes estimées pour le Milieu Linéaire de Comparaison, on obtient le modèle Affine élastoviscoplastique tel que décrit dans Masson and Zaoui (1999).

Comme dans Masson and Zaoui (1999), on considère un polycristal constitué de grains parfaitement accolés et soumis à un trajet de chargement quelconque. La phase (r) représente le comportement moyen des grains possédant la même orientation cristalline tandis que $\bar{\boldsymbol{\sigma}}^{(r)}(t)$ et $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^{(r)}(t)$ désignent les valeurs à un instant t des moyennes sur ces grains de même orientation des contraintes et des déformations, respectivement.

Nous renvoyons à la référence Masson and Zaoui (1999) pour une description détaillée du modèle. Nous nous contentons ici d'en rappeler les équations constitutives dont sont solutions les évolutions des moyennes par phase des contraintes, les moyennes par phase des déformations étant estimées grâce à l'approximation $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^{(r)}(t) \approx \boldsymbol{\varepsilon}^{(r)}(t)$, cette dernière quantité étant solution de :

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{(r)}(t) = \mathbf{M}^{e(r)} : \dot{\bar{\boldsymbol{\sigma}}}^{(r)}(t) + \frac{\partial \phi^{(r)}}{\partial \boldsymbol{\sigma}} \left(\bar{\boldsymbol{\sigma}}^{(r)}(t) \right),$$

réponse que nous noterons formellement par la suite (réponse à la loi de comportement) :

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{(r)}(t) = \mathbf{LC}\{\boldsymbol{\sigma}^{(r)}(u)\}_{0 \leq u \leq t},$$

et donc :

$$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^{(r)}(t) \approx \mathbf{LC}\{\boldsymbol{\sigma}^{(r)}(u)\}_{0 \leq u \leq t},$$

approximation dont nous avons mentionné les limites dans le cas des forts contrastes (voir section 4.1.2).

A un instant t quelconque, les contraintes de référence par phase $\boldsymbol{\sigma}^{(r)}(t)$ sont solutions du système d'équations non linéaires suivant (état de déformation macroscopique imposé $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}(t)$) :

$$\begin{cases} \boldsymbol{\sigma}^{(r)}(t) - \bar{\boldsymbol{\sigma}}(t) = - \int_0^t \tilde{\mathbf{Q}}_{\text{SC}}(t-u) : \left[\bar{\mathbf{d}\boldsymbol{\varepsilon}}^{(r)}(u) - \bar{\mathbf{d}\boldsymbol{\varepsilon}}(u) \right] du \\ \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^{(r)}(t) = \mathbf{LC}\{\boldsymbol{\sigma}^{(r)}(u)\}_{0 \leq u \leq t} \\ \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}(t) = \sum_s c_s \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^{(s)}(t) \\ \bar{\boldsymbol{\sigma}}(t) = \sum_s c_s \bar{\boldsymbol{\sigma}}^{(s)}(t). \end{cases} \quad (4.16)$$

expression dans laquelle la transformée de Laplace-Carson $\tilde{\mathbf{Q}}_{\text{SC}}^*(p)$ de la fonction de relaxation $\tilde{\mathbf{Q}}_{\text{SC}}(t)$ fait référence à un Milieu Linéaire de Comparaison pseudo-élastique défini pour un réel p comme suit :

- ce milieu possède la même morphologie que le polycristal initial,
- les phases (cristaux de même orientation) de ce polycristal possèdent un comportement élastique linéaire caractérisé par une souplesse :

$$\mathbf{M}^{(r)*}(p) = \mathbf{M}^{e(r)} + \frac{1}{p} \frac{\partial^2 \phi^{(r)}}{\partial \boldsymbol{\sigma}^2} \left(\boldsymbol{\sigma}^{(r)}(t) \right)$$

Si $\tilde{\mathbf{M}}_{\text{SC}}^*(p) = \tilde{\mathbf{L}}_{\text{SC}}^{*-1}(p)$ désigne la souplesse effective de ce milieu linéaire élastique estimée par le modèle autocohérent, le tenseur d'influence $\tilde{\mathbf{Q}}_{\text{SC}}^*(p)$ est défini par (voir chapitre 2) :

$$\tilde{\mathbf{Q}}_{\text{SC}}^*(p) = \mathbf{P}_{\text{SC}}^{*-1}(p) - \tilde{\mathbf{L}}_{\text{SC}}^*(p), \quad (4.17)$$

avec :

$$\begin{cases} \tilde{\mathbf{M}}_{\text{SC}}^*(p) = \tilde{\mathbf{L}}_{\text{SC}}^{*-1}(p) = \sum c_s \mathbf{M}^{(s)*}(p) : \mathbf{B}_{\text{SC}}^{(s)*}(p) \\ \mathbf{B}_{\text{SC}}^{(r)*}(p) = \left(\mathbf{M}^{(r)*}(p) + [\tilde{\mathbf{Q}}_{\text{SC}}^*(p)]^{-1} \right)^{-1} : \left(\mathbf{M}_{\text{SC}}^*(p) + [\tilde{\mathbf{Q}}_{\text{SC}}^*(p)]^{-1} \right) \\ \sum_s c_s \mathbf{B}_{\text{SC}}^{(s)*}(p) = \mathbf{I} \end{cases}$$

(\mathbf{I} tenseur d'ordre 4 unité, $\mathbf{P}_{\text{SC}}^*(p)$ est le tenseur de polarisation de Hill (voir 2.2) associé au module élastique $\tilde{\mathbf{L}}_{\text{SC}}^*(p)$). Soulignons pour finir que dans le cas linéaire, le système d'équations (4.16) correspond au traitement classique par le théorème de correspondance d'un agrégat polycristallin constitué de phases viscoélastiques linéaires non vieillissantes (voir section 3).

4.2.2 Les variantes “quasi-élastiques” du modèle Affine

Nous avons vu dans les deux sections 4.1 et 4.2 précédentes que la linéarisation, qu'elle soit tangente ou sécante, conduit à la définition d'un Milieu Linéaire de Comparaison de type visco-élastique linéaire avec déformations libres. Nous avons par ailleurs montré dans le chapitre 3 que le traitement usuel par homogénéisation d'un tel Milieu Linéaire de Comparaison (théorème de correspondance) est en général incontournable mais reste lourd de mise en oeuvre. Ainsi la méthode des collocations conduit à chaque pas de temps à la résolution de plus d'une dizaine de problèmes élastiques linéaires avec déformations libres. Peut-on imaginer une alternative ne conduisant pas au traitement, à chaque pas de temps, d'un Milieu Linéaire de Comparaison de type viscoélastique linéaire mais élastique linéaire ? Dans le premier paragraphe de cette section, je reviens sur la méthode de linéarisation en raisonnant non plus sur des quantités continues mais des quantités discrétisées (dans le temps), ce qui permet de faire usage de la matrice tangente cohérente. Dans le deuxième paragraphe, une autre solution est envisagée : l'approximation quasi-élastique pour inverser les transformées de Laplace-Carson, ce qui conduit à un Milieu Linéaire de Comparaison de type élastique linéaire.

C'est ce traitement quasi-élastique qui est adopté dans le dernier paragraphe de cette section afin d'aborder un autre aspect, celui de l'amélioration des estimations.

Une mauvaise idée !

Ce mémoire est aussi l'occasion de rapporter des idées personnelles qui n'ont finalement pas abouti. En voici une qui paraissait bien séduisante au départ et qui s'est avérée décevante (...). L'idée était séduisante car elle était simple tout en paraissant relativement générale. Pour la présenter, il nous faut tout d'abord rendre opérationnel le problème initial (4.3) en adoptant une méthode de résolution temporelle implicite : le problème étant résolu jusqu'à l'instant t , le pas de temps suivant est noté $t + \Delta t$ et on adopte la notation suivante pour les différentes quantités inconnues : $X(t + \Delta t) = X + \Delta X$. Le problème discret pour les inconnues ΔX s'écrit alors :

$$\left\{ \begin{array}{l} \operatorname{div}(\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) + \Delta\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x})) = 0 \\ \Delta\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}(\nabla\Delta\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) + (\nabla\Delta\mathbf{u}(\mathbf{x}, t))^t) \\ \Delta\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) = \mathbf{M}^{e(r)} : \Delta\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) + \Delta t \frac{\partial\phi^{(r)}}{\partial\boldsymbol{\sigma}}(\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) + \Delta\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x})) \\ \mathbf{u}(\mathbf{x}) + \Delta\mathbf{u}(\mathbf{x}) = (\bar{\boldsymbol{\varepsilon}} + \Delta\bar{\boldsymbol{\varepsilon}})\mathbf{x} \text{ pour tout } \mathbf{x} \text{ sur } \partial V. \end{array} \right. \quad (4.18)$$

Si on considère en particulier l'expression discrétisée de la loi de comportement :

$$\Delta\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) = \mathbf{M}^{e(r)} : \Delta\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) + \Delta t \frac{\partial\phi^{(r)}}{\partial\boldsymbol{\sigma}}(\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) + \Delta\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x})),$$

que l'on différencie en un point \mathbf{x} donné par rapport à l'inconnue $\Delta\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x})$, on obtient :

$$\delta\Delta\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) = \left(\mathbf{M}^{e(r)} + \Delta t \frac{\partial^2\phi^{(r)}}{\partial\boldsymbol{\sigma}^2}(\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) + \Delta\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x})) \right) \delta\Delta\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}). \quad (4.19)$$

Le tenseur d'ordre quatre apparaissant dans le membre de droite de cette expression est généralement appelé la souplesse tangente-cohérente, fréquemment utilisé par la méthode des éléments finis (voir par exemple Bonnet M. (2006)). On peut donc définir un Milieu Linéaire de Comparaison de type élastique linéaire avec déformation libre imposée, en approchant, en chaque point \mathbf{x} de chacune des phases (r) la loi de comportement par :

$$\Delta\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) \approx \mathbf{M}^{tgcoh(r)} : \Delta\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) + \Delta\boldsymbol{\varepsilon}^{0(r)},$$

la souplesse tangente-cohérente et l'incrément de déformation libre étant à présent homogènes sur la phase (r) considérée et définis par :

$$\begin{cases} \mathbf{M}^{tgcoh(r)} = \frac{d\Delta\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x})}{d\Delta\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x})} (\bar{\boldsymbol{\sigma}}_r + \Delta\bar{\boldsymbol{\sigma}}_r) \\ \Delta\boldsymbol{\varepsilon}^{0(r)} = \Delta\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_r - \mathbf{M}^{tgcoh(r)} \Delta\bar{\boldsymbol{\sigma}}_r, \end{cases} \quad (4.20)$$

$\Delta\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_r$ désignant la réponse par la loi de comportement associée à la contrainte de référence ($\bar{\boldsymbol{\sigma}}_r + \Delta\bar{\boldsymbol{\sigma}}_r$) dans la phase (r) selon :

$$\Delta\boldsymbol{\varepsilon}_r = \mathbf{M}^{e(r)} : \Delta\bar{\boldsymbol{\sigma}}_r + \frac{\partial\phi^{(r)}}{\partial\boldsymbol{\sigma}} (\bar{\boldsymbol{\sigma}}_r + \Delta\bar{\boldsymbol{\sigma}}_r)$$

On obtient donc à chaque pas de temps un Milieu Linéaire de Comparaison de type linéaire élastique et on peut par ailleurs montrer que si, les constituants obéissent à une loi de comportement élastoplastique et qu'on adopte une méthode de résolution temporelle implicite, la forme du Milieu Linéaire de Comparaison est identique. Hélas, dans le cas élastoviscoplastique, l'examen de la sensibilité du modèle au pas de temps conduit à une cruelle désillusion : lorsque le pas de temps Δt tend vers zéro, les souplesses tangentes cohérentes locales tendent vers le module élastique de la phase considérée :

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \mathbf{M}^{tgcoh(r)} = \mathbf{M}^{e(r)}$$

Nous voici donc en présence d'une approche à accommodation élastique (voir par exemple Weng (1981)). Cette dernière remarque est rédhibitoire pour un lecteur habitué à traiter de ces questions (voir Masson and Zaoui (1999) pour une étude comparative détaillée). C'était donc une mauvaise idée !

Tout à fait indépendamment, l'équipe du LMA (voir Lahellec and Suquet (2007)) a répondu depuis à la question posée : comme précédemment, c'est le problème discrétisé qui est le point de départ de ces travaux afin de faire apparaître un potentiel pseudo-élastique (Mialon (1986)) à chaque pas de temps. L'astuce consiste alors à se démarquer de l'approche par champ moyen décrite précédemment. En particulier, la déformation libre n'est pas supposée homogène dans la phase considérée. Au final, les résultats obtenus avec cette nouvelle approche sont très satisfaisants et laissent penser que la démarche proposée pourrait constituer, sous certaines conditions (cadre des matériaux standards généralisés), une formulation générale pour les comportements dépendants du temps. A noter toutefois que cette nouvelle approche s'appuie sur le calcul de moments d'ordre deux (même dans le cas viscoélastique linéaire), ce qui peut s'avérer lourd en pratique.

Le modèle Affine quasi-élastique

Nous avons déjà présenté la méthode d'inversion approchée "quasi-élastique" de la transformée de Laplace-Carson (voir 3.2.2). On retrouve aisément les équations constitutives de ce modèle en appliquant le changement de variable $p = h(t)/t$ à l'ensemble d'équations (4.16) définissant le modèle Affine dans le cas de polycristaux (voir Brenner *et al.* (2002) pour une description détaillée). En pratique, seules les équations d'interaction du système (4.16) sont modifiées par cette approximation selon :

$$\bar{\sigma}^{(r)}(t) - \bar{\sigma}(t) = -\tilde{Q}_{SC}(t) : [\bar{\epsilon}^{(r)}(t) - \bar{\epsilon}(t)], \quad 1 \leq r \leq n_p$$

le tenseur d'influence étant calculé à l'aide de l'approximation quasi-élastique selon :

$$\tilde{Q}_{SC}(t) = \tilde{Q}_{SC}^*(p = h(t)/t),$$

le tenseur d'influence pour un réel (p) donné $\tilde{Q}_{SC}^*(p)$ ayant été défini en section 4.2.1.

La relative simplicité de cette méthode nous a conduit à envisager des comparaisons avec des calculs de micro-structure (Barbe *et al.* (2001)). L'objet de cette comparaison portait sur la simulation de la réponse effective (fluage thermique) d'un alliage de Zirconium assimilé à un agrégat de grains cristallins parfaitement accolés. Ces alliages de Zirconium sont utilisés comme matériau de gainage des crayons combustibles des réacteurs à eau sous pression. Ce travail a fait l'objet d'une collaboration avec O. Diard (Diard (2002)). Des calculs éléments finis d'agrégats ont en particulier été réalisés dans le cas d'un chargement de fluage biaxé (essais isothermes sur tube menés à 400°C). Les systèmes de glissement introduits à l'échelle du monocristal de symétrie hexagonale (voir Figure 4.2) étaient, par ordre décroissant d'importance (cission d'écoulement), les glissements prismatiques, puis les glissements basal et pyramidal $\langle a \rangle$ et enfin, le glissement pyramidal $\langle c + a \rangle$. Ces calculs de micro-structure montrent, pour un chargement de fluage, l'apparition de bandes de déformations intenses (voir Figure 4.4).

A noter que ces bandes de déformation ne sont correctement captées par le calcul de micro-structure que pour un maillage suffisamment fin : si on adopte un maillage grossier ne comptant qu'un élément fini par grain, ces structures de déformation ne sont pas représentées et la vitesse de fluage macroscopique est sous-estimée. En fait, il faut atteindre 15 éléments par grain pour décrire correctement ces bandes de déformation (soit près de 22000 éléments à 20 noeuds et 27 points d'intégration (c3d20)).

Dans le rapport Diard (2002), les comparaisons portaient essentiellement sur les régimes stationnaires (comportement purement viscoplastique) mais, l'introduction d'un seuil dans la loi d'écoulement viscoplastique a posé des problèmes de convergence pour la déclinaison du modèle Affine aux comportements viscoplastiques, partiellement résolu par l'introduction d'une pénalité. Afin d'éviter ces problèmes, il nous a fallu adopter un cadre de modélisation élastoviscoplastique, cadre pour lequel nous avons adopté le modèle Affine quasi-élastique. Les résultats complémentaires, ainsi obtenus avec l'Affine quasi-élastique, confirment avec plus de rigueur les tendances observées alors. En particulier,

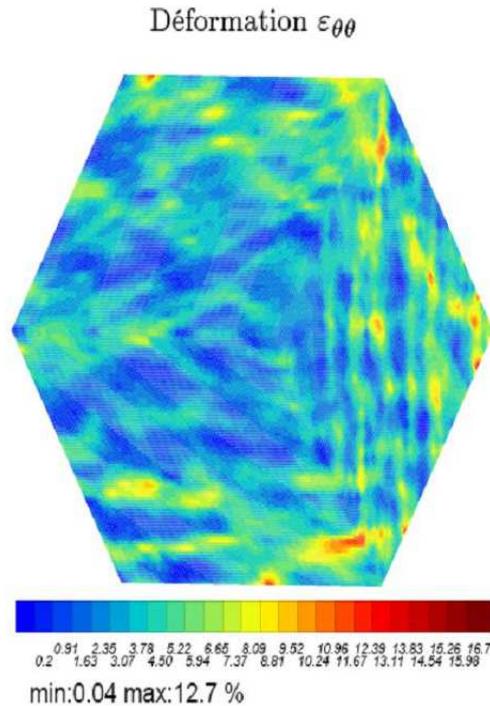


FIG. 4.4 – Essai de fluage sous chargement bi-axial à 400°C : simulation de la réponse d’un alliage de zirconium assimilé à un agrégat constitué de 1452 grains (583 orientations). Des bandes de localisation de la déformation apparaissent très nettement sur cette figure.

les résultats obtenus avec le modèle Affine sous-estiment (vitesse de déformation macroscopique) les résultats de référence. Malgré consolation, ces résultats semi-analytiques sont très proches de ceux obtenus dans ce cas avec le maillage grossier (un élément fini par grain), méthode que l’on peut qualifier d’homogénéisation numérique (voir Staroselsky and Anand (1998)). C’est, à la réflexion, assez flatteur pour l’approche Affine quasi-élastique proposée qui compte nettement moins de degrés de libertés (3600 degrés de liberté pour l’Affine (600 phases avec 6 degrés de liberté par phase) à comparer aux 87120 degrés de liberté pour le calcul éléments finis (1450 éléments cubiques comptant 20 nœuds et trois degrés de liberté

On retrouve toutefois les limites du modèle Affine, déjà rapportées dans le paragraphe 4.1.2, dans un cas, certes pathologique, mais réel : le cas étudié ici présente de fortes incompatibilités inter-granulaires, compte-tenu du faible nombre de possibilité d’accommodation viscoplastique dans les grains (les trois principaux mécanismes de glissement ne permettent pas d’accommoder certaines directions de sollicitation (comme pour la glace, selon l’axe sénnaire du monocristal)). Dans cette situation, c’est à nouveau

l'approximation :

$$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^{(r)}(t) \approx \mathbf{LC}\{\bar{\boldsymbol{\sigma}}^{(r)}(u)\}_{0 \leq u \leq t},$$

équation tirée de (4.16) mais qui reste vraie pour la variante quasi-élastique présentée ci-dessus, qui conduit aux écarts constatés. Dans la section 4.1.2, c'est la comparaison entre le modèle Affine et le modèle du second ordre (Ponte Castañeda (1996)) qui permet de tester l'effet de cette hypothèse sur la réponse effective du polycristal, le modèle du second-ordre ne s'appuyant pas sur cette hypothèse. Ici, c'est la comparaison avec des calculs de microstructure de référence qui nous permet de mettre en évidence l'effet de cette approximation.

Le modèle Affine quasi-élastique “amélioré”

Comment améliorer les prédictions du modèle Affine quasi-élastique ? C'est cette question que nous avons abordée en collaboration avec R. Brenner du CNRS-LPMTM (et aussi, bien sûr, P. Ponte-Castañeda de l'Université de Pennsylvannie (USA)). Le point de départ de ce travail est la proposition de Ponte Castañeda (2002a) (voir aussi Ponte Castañeda (2002b)) qui propose d'incorporer dans l'étape de linéarisation de la loi de comportement locale (4.4), non plus une, mais deux quantités de référence par phase, notées $\bar{\boldsymbol{\sigma}}^{(r)}$ et $\hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(r)}$, respectivement (ce sont deux tenseurs du second-ordre). La souplesse visqueuse et la déformation libre apparaissant dans la relation linéarisée (4.4) sont à présent la pente et l'ordonnée à l'origine de la droite passant par les points $(\bar{\boldsymbol{\sigma}}^{(r)}, \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^v(\bar{\boldsymbol{\sigma}}^{(r)}))$ et $(\hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(r)}, \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^v(\hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(r)}))$. Comme dans Ponte Castañeda (1996), cette analyse est limitée à des comportements purement viscoplastiques (ou élastiques non linéaires)², ce qui permet de définir des quantités homogènes par phase par des conditions d'optimalité vis-à-vis du potentiel viscoplastique effectif. En pratique, $\bar{\boldsymbol{\sigma}}^{(r)}$ est toujours identique à la moyenne de la contrainte dans la phase considérée tandis que le “degré” de liberté supplémentaire introduit, $\hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(r)}$, dépend de cette quantité moyenne ainsi que de la moyenne des carrés de la contrainte sur la phase considérée (voir Ponte Castañeda (2002a)). Cette dernière quantité est un tenseur du quatrième ordre défini dans chaque phase (r) par :

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \otimes \boldsymbol{\sigma} \rangle_r .$$

Comme la moyenne par phase des contraintes, cette quantité est celle calculée pour le milieu linéaire de comparaison. Quel que soit le modèle d'homogénéisation linéaire retenu pour résoudre le problème élastique linéaire associé au Milieu Linéaire de Comparaison, cette quantité peut être calculée par la relation générale suivante (Ponte Castañeda and Suquet (1998)) :

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \otimes \boldsymbol{\sigma} \rangle_r = \frac{2}{c_r} \frac{d\bar{\phi}^{MLC}}{d\mathbf{M}^{v(r)}}, \quad (4.21)$$

²C'est la raison pour laquelle les quantités mécaniques ne dépendent plus du temps dans ce paragraphe.

$\mathbf{M}^{v(r)}$ désignant la souplesse effective dans la phase (r) tandis que $\overline{\phi}^{MLC}$ est l'énergie complémentaire effective du Milieu Linéaire de Comparaison estimée avec le modèle d'homogénéisation retenu (pour la contrainte macroscopique imposée $\overline{\boldsymbol{\sigma}}$) :

$$\overline{\phi}^{MLC}(\overline{\boldsymbol{\sigma}}) = \langle \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{M}^v : \boldsymbol{\sigma} \rangle_V = \frac{1}{2} \overline{\boldsymbol{\sigma}} : \tilde{\mathbf{M}}^v : \overline{\boldsymbol{\sigma}}.$$

Lorsque le problème est de type thermo-élastique linéaire (champ de déformation libre $\boldsymbol{\varepsilon}^0(\mathbf{x})$ imposée), nous avons vu (cf. chapitre 2) que l'énergie potentielle effective doit tenir compte de ce chargement additionnel. Pour l'énergie complémentaire effective, on obtient pour les même raisons :

$$\overline{\phi}^{MLC}(\overline{\boldsymbol{\sigma}}) = \langle \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{M}^v : \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\varepsilon}^0 \rangle_V.$$

L'extension de ces travaux à des comportements elastoviscoplastiques est relativement aisée avec l'approximation quasi-élastique (voir Brenner and Masson (2005) pour plus de détails). Les inconnues sont à présent les évolutions avec le temps des deux quantités homogènes par phase définies ci-dessus. A chaque pas de temps, ces quantités dépendent de la valeur à l'instant considéré de la moyenne des contraintes dans la phase considérée (voir plus haut) et du moment d'ordre deux évalué au même instant. Ce dernier terme est estimé grâce à l'approximation quasi-élastique selon :

$$\langle \boldsymbol{\sigma}(t) \otimes \boldsymbol{\sigma}(t) \rangle_r \approx \langle \boldsymbol{\sigma}^*(p = h(t)/t) \otimes \boldsymbol{\sigma}^*(p = h(t)/t) \rangle_r = \frac{2}{c_r} \frac{d\overline{\phi}^{*(MLC)}(p)}{d\mathbf{M}^{v(r)*}(p)}, \quad (4.22)$$

$\overline{\phi}^{*(MLC)}(p)$ désignant l'énergie complémentaire effective du Milieu Linéaire de Comparaison pseudo-élastique défini dans la section 4.2.1. Dans Brenner and Masson (2005), les réponses évaluées dans le cas d'un composite biphasé avec ce nouveau modèle Affine quasi-élastique s'avèrent, comme prévu, meilleures (plus souples) que celles dérivées avec la proposition précédente, c'est pourquoi on parle de modèle Affine quasi-élastique "amélioré" (voir Figure 4.5 tirée de Brenner and Masson (2005)).

4.2.3 Perspectives

Si on en revient aux comparaisons calculs de micro-structure / modèle d'homogénéisation menées en collaboration avec O. Diard, la question qui suit est : pourquoi ne pas effectuer des simulations avec un Affine quasi-élastique amélioré basé sur les travaux de Liu and Ponte Castañeda (2004) étendant la proposition Ponte Castañeda (2002a) au cas des polycristaux (voir aussi plus récemment Lebensohn *et al.* (2007b)) ? C'est qu'il nous reste plusieurs difficultés à franchir. La première d'entre elles est la suivante : il faut introduire un calcul relativement précis des moments d'ordre deux dans le cas général (souplesse locales présentant les symétries majeures mais anisotropes), ce qui revient (relation (4.22)) à effectuer 21 dérivations dans chacune des phases (près de 600 orientations pour les calculs cités !). Si la méthode numérique s'appuie sur une simple différence finie, il faut donc effectuer pour chaque phase $2 * 21 * 600 = 25200$ calculs

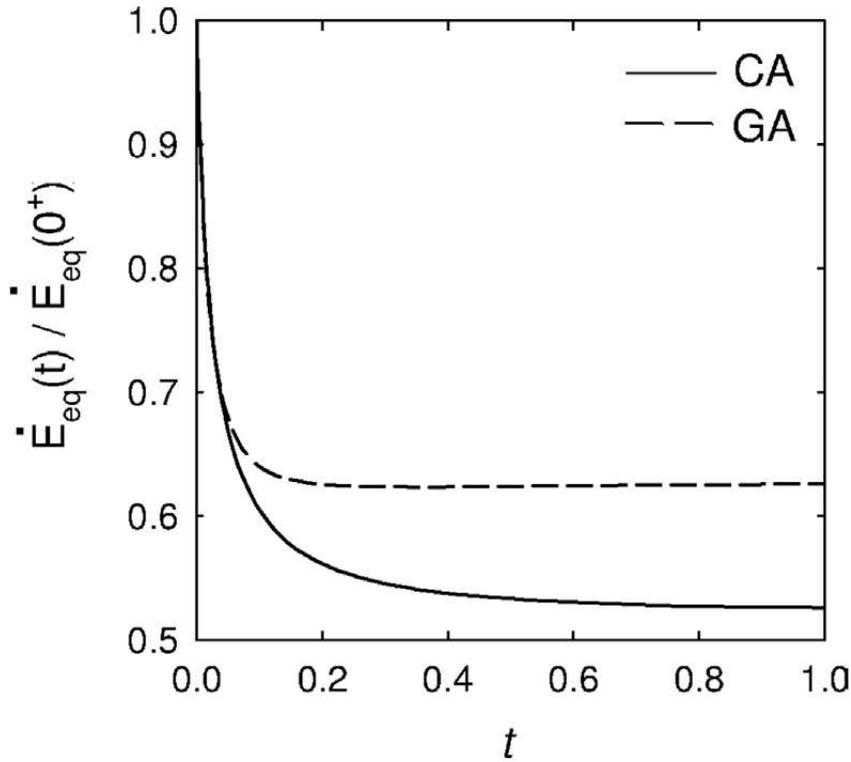


FIG. 4.5 – Evolution avec le temps de la vitesse de déformation macroscopique d’un composite biphasé lors d’un essai de fluage (cisaillement) : comparaison des prédictions obtenues avec le modèle Affine quasi-élastique (“CA”, trait plein) et le modèle Affine quasi-élastique amélioré (“GA”, pointillé). Le composite considéré est constitué de 15% d’inclusions élastiques distribuées de façon isotrope (estimation Mori-Tanaka du Milieu Linéaire de Comparaison) dans une matrice obéissant à une loi d’écoulement viscoplastique de type Norton ($n = 5$). Les caractéristiques élastiques du composite sont homogènes.

d’homogénéisation linéaire ! Sachant que chaque calcul d’homogénéisation nécessite cinq à dix calculs numériques du tenseur d’Eshelby (résolution de l’équation d’autocohérence), un peu moins de 300 000 calculs du tenseur de polarisation de Hill seraient nécessaires ... On mesure tout l’intérêt de la réduction de l’intégrale associée au calcul numérique du tenseur de polarisation de Hill, tel que proposé dans la section 2.2.3 ! Nous avons vu que ces nouvelles expressions pourraient aussi grandement faciliter le calcul de la dérivée du tenseur de polarisation de Hill. On voit aussi tout l’intérêt de propositions alternatives de calcul de ces moments d’ordre deux (voir Brenner *et al.* (2004)) susceptibles de réduire fortement le nombre de calculs d’homogénéisation nécessaires. C’est cette méthode de dérivation alternative, reprise dans Lebensohn *et al.* (2007a), qui permet dans le cas de polycristaux viscoplastiques d’utiliser efficacement les résultats établis par Liu and Ponte Castañeda (2004). La deuxième difficulté est d’ordre théorique : si le calcul du mo-

ment d'ordre deux est possible dans le cas d'un Milieu Linéaire de Comparaison élastique linéaire, la question reste ouverte pour un Milieu Linéaire de Comparaison de type viscoélastique linéaire. L'extension de cette méthode aux régimes transitoires (sans l'usage de l'approximation quasi-élastique) reste donc un problème ouvert (voir conclusions).

Du point de vue des calculs de micro-structure établis lors de ces comparaisons, nous avons souligné qu'un maillage trop grossier (un élément par grain cristallin) conduit à des résultats proches du modèle semi-analytique proposée. De ce point de vue, on pressent aussi tout l'intérêt d'une extension aux comportements élastoviscoplastiques de l'approche proposée dans la section 2.3. Les zones "grises" seraient dans ce cas les zones au voisinage des joints de grain.

4.3 Un modèle à variables internes équivalent à l'Affine élastoviscoplastique

Pour des comportement viscoélastiques linéaires, j'ai déjà souligné les difficultés liées à l'approche par convolution (voir 3.3). Sur le plan théorique tout d'abord, elle est, en l'état, inapte à traiter le cas où les caractéristiques des phases dépendent du temps, ce qui est malheureusement fréquent lorsqu'on étudie le comportement thermomécanique d'une structure. Sur le plan numérique, elle nécessite de stocker toute l'histoire des principales quantité mécaniques (contraintes et déformations macroscopiques, moyennes par phase, ...). S'il nous faut donc étudier une structure soumise à une sollicitation thermomécanique complexe (typiquement la simulation de la réponse thermomécanique d'un crayon combustible d'un réacteur REP couvre plusieurs années, soit plusieurs centaines de pas de temps de calcul en général!), il nous faudra stocker ces différentes variables, puis estimer les réponses à l'instant considéré à l'aide de convolutions s'appuyant sur des intervalles de temps de plus en plus larges, ... Pour celui qui voudrait introduire une tel loi dans un code éléments finis, cette lourdeur est réhhibitoire !

4.3.1 Formulation dans le cas des polycristaux

En pratique, cependant, nous avons vu (voir section 4.2.1) qu'on emploie la méthode des collocations afin d'inverser les transformées de Laplace-Carson, ce qui revient à introduire un nombre fini de variables internes, comme nous l'avons déjà souligné auparavant (voir 3.3). Dès Masson and Zaoui (1999), nous propositions (sans nous l'avouer ...) une formulation à variables internes. Reprenons l'exemple des polycristaux pour détailler cette proposition.

Dans le système d'équations (4.16) définissant le modèle Affine, c'est l'équation d'interaction :

$$\bar{\sigma}^{(r)}(t) - \bar{\sigma}(t) = - \int_0^t \tilde{Q}_{SC}(t-u) : [\bar{d\varepsilon}^{(r)}(u) - \bar{d\varepsilon}(u)] ,$$

qui fait apparaître un noyau intégral. Or, la méthode de collocation, telle que proposée dans Masson and Zaoui (1999), conduit à approcher les variations temporelles du tenseur

d'influence de la façon suivante :

$$\tilde{\mathbf{Q}}_{\text{SC}}(t) \approx \tilde{\mathbf{Q}}_{\text{SC}(a)}(t) = \sum_{i=1}^{N_p} \tilde{\mathbf{Q}}_{\text{SC}(\tau_i)} e^{-\frac{t}{\tau_i}}, \quad (4.23)$$

avec $\sum_{i=1}^{N_p} \tilde{\mathbf{Q}}_{\text{SC}(\tau_i)} = \tilde{\mathbf{Q}}_{\text{SC}}^e$, $\tilde{\mathbf{Q}}_{\text{SC}}^e$ désignant le tenseur d'influence associé au problème purement élastique ($p \rightarrow +\infty$). Avec cette approximation, l'équation d'interaction est désormais équivalente à :

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}}^{(r)}(t) - \bar{\boldsymbol{\sigma}}(t) = -\tilde{\mathbf{Q}}_{\text{SC}}^e : \left[\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^{(r)}(t) - \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}(t) - \sum_{i=1}^{N_p} \mathbf{q}_{\tau_i}^{(r)}(t) \right], \quad (4.24)$$

équation faisant apparaître N_p variables internes tensorielles (second-ordre) $\mathbf{q}_{\tau_1}^{(r)}(t), \dots, \mathbf{q}_{\tau_{N_p}}^{(r)}(t)$ pour chacune des phases (r). Ces variables internes satisfont aux équations d'évolution suivantes :

$$\dot{\mathbf{q}}_{\tau_i}^{(r)}(t) + \frac{1}{\tau_i} \mathbf{q}_{\tau_i}^{(r)}(t) = \frac{1}{\tau_i} \left[\tilde{\mathbf{Q}}_{\text{SC}}^e \right]^{-1} : \tilde{\mathbf{Q}}_{\text{SC}(\tau_i)} : \left[\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^{(r)}(t) - \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}(t) \right] \quad \text{avec} \quad \mathbf{q}_{\tau_i}^{(r)}(0) = 0. \quad (4.25)$$

L'approximation de l'inverse de la transformée de Laplace-Carson du tenseur d'influence symbolique $\tilde{\mathbf{Q}}_{\text{SC}}^*(p)$ conduit donc à l'équation d'interaction (4.24) dans laquelle a disparu l'opération de convolution. Cette équation d'interaction fait apparaître :

- le tenseur d'influence associé au problème élastique (même matériau hétérogène mais constitué de grains élastiques (souples élastiques $\mathbf{M}^{e(r)}$);
- un nombre fini de variables internes constituées des tenseurs du second ordre $\mathbf{q}_{\tau_1}^{(r)}, \dots, \mathbf{q}_{\tau_{N_p}}^{(r)}$ pour chacune des phases $r = 1, \dots, n_p$. Ces variables internes traduisent l'interaction viscoélastique au sein de l'agrégat ainsi que les contraintes moyennes par phase $\bar{\boldsymbol{\sigma}}^{(1)}, \dots, \bar{\boldsymbol{\sigma}}^{(n_p)}$, n_p désignant le nombre de phases considérées tandis que N_p désigne le nombre de termes dans l'approximation (4.23).

Le nombre de phases dans un polycristal restant élevé (n_p étant de l'ordre de quelques centaines) et le nombre de points de collocation (N_p) étant de l'ordre de 20, le modèle proposé conduit à un nombre de variables internes ($N_p * n_p$) non négligeable.

Finalement, l'approximation (4.23) (méthode des collocations) conduit au système d'équations non linéaires suivant (état de déformation macroscopique imposé $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}(t)$) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \bar{\boldsymbol{\sigma}}^{(r)}(t) - \bar{\boldsymbol{\sigma}}(t) = -\tilde{\mathbf{Q}}_{\text{SC}}^e : \left[\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^{(r)}(t) - \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}(t) - \sum_{i=1}^{N_p} \mathbf{q}_{\tau_i}^{(r)}(t) \right], \\ \dot{\mathbf{q}}_{\tau_i}^{(r)}(t) + \frac{1}{\tau_i} \mathbf{q}_{\tau_i}^{(r)}(t) = \frac{1}{\tau_i} \left[\tilde{\mathbf{Q}}_{\text{SC}}^e \right]^{-1} : \tilde{\mathbf{Q}}_{\text{SC}(\tau_i)} : \left[\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^{(r)}(t) - \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}(t) \right] \quad \text{avec} \quad \mathbf{q}_{\tau_i}^{(r)}(0) = 0 \\ \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^{(r)}(t) = \mathbf{LC} \{ \bar{\boldsymbol{\sigma}}^{(r)}(u) \}_{0 \leq u \leq t} \\ \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}(t) = \sum_s c_s \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^{(s)}(t) \\ \bar{\boldsymbol{\sigma}}(t) = \sum_s c_s \bar{\boldsymbol{\sigma}}^{(s)}(t). \end{array} \right. \quad (4.26)$$

dont sont solutions, à un instant t quelconque, les contraintes de référence par phase $\bar{\boldsymbol{\sigma}}^{(r)}(t)$ (ou, de façon équivalente, les déformations de référence par phase $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^{(r)}(t)$) ainsi

que les variables internes $\mathbf{q}_{\tau_1}(t), \dots, \mathbf{q}_{\tau_{N_p}}(t)$. Les tenseurs d'ordre quatre $\tilde{\mathbf{Q}}_{SC(\tau_i)}$ sont donnés par (méthode des collocations, voir relation (3.23)) :

$$1 \leq i \leq N_p \quad \tilde{\mathbf{Q}}_{SC}^*\left(\frac{1}{\tau_i}\right) = \tilde{\mathbf{Q}}_{SC(a)}^*\left(\frac{1}{\tau_i}\right). \quad (4.27)$$

$\tilde{\mathbf{Q}}_{SC}^*(p)$ étant défini par (4.17). Comme dans Masson and Zaoui (1999), il faut résoudre N_p problèmes d'homogénéisation linéaires par le modèle autocohérent pour déterminer les coefficients $(\tilde{\mathbf{Q}}_{SC(\tau_1)}, \dots, \tilde{\mathbf{Q}}_{SC(\tau_{N_p})})$ solution du système linéaire (4.27).

Nous concluons cette section en remarquant que si $N_p = 0$, on retrouve le modèle à accommodation élastique de Weng (1981), modèle dont les limites ont déjà été soulignées plus haut. On peut bien entendu imaginer différentes approximations visant à réduire le nombre de points de collocation . . .

4.3.2 Avantages de cette formulation, perspectives nouvelles d'utilisation

Prenons, pour illustrer notre propos, la situation d'un chargement cyclique à grands nombres de cycles (calculs à la fatigue polycyclique, typiquement). Avec le modèle à noyau intégral initial (relations (4.16)), le traitement d'un tel chargement nécessite de stocker toute l'histoire de chargement considéré, ce qui devient rapidement inextricable. On mesure bien l'intérêt dans cette situation du nouveau point de vue (à variables internes) proposé ici.

Si, dans l'exemple précédent, l'approche par noyau intégral posait des difficultés de mise en œuvre, cette approche bute aussi sur de sérieuses difficultés conceptuelles dans le cas de chargements anisothermes : en particulier, si les caractéristiques d'un des constituants varient avec la température (c'est en pratique souvent le cas), quel matériau linéaire de comparaison considérer ? A l'instar du traitement des non linéarités, une solution serait d'introduire une déformation libre, mais cela paraît bien vite lourd (...) La formulation à variables internes permet de traiter sans difficultés cette situation anisotherme : il nous suffit de considérer les caractéristiques instantannées associées à l'instant (et donc la température) considéré puis, d'appliquer les relations constitutives définies ci-dessus. Pour détailler la solution proposée, considérons le cas où ce sont les lois d'écoulement viscoplastique des phases qui dépendent de la température. La température est par ailleurs une fonction du temps, notée $T(t)$. Dans ce cas, le comportement linéarisé est toujours donné à un instant t par la relation (4.13) mais la souplesse visqueuse dans cette relation dépend aussi de la température à cet instant selon :

$$\mathbf{M}^{v(r)}(t) = \frac{\partial^2 \phi^{(r)}}{\partial \boldsymbol{\sigma}^2} \left(\bar{\boldsymbol{\sigma}}^{(r)}(t), T(t) \right) \quad (4.28)$$

A l'instant considéré, la vitesse de déformation libre est définie de la façon suivante :

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{0(r)}(t) = \frac{\partial \phi^{(r)}}{\partial \boldsymbol{\sigma}} \left(\bar{\boldsymbol{\sigma}}^{(r)}(t), T(t) \right) - \mathbf{M}^{v(r)}(t) : \bar{\boldsymbol{\sigma}}^{(r)}(t) \quad (4.29)$$

Dans chacune des phases (r) considérée, cette relation définit un matériau linéaire de comparaison viscoélastique linéaire à l'instant (t) considéré. L'application du principe de correspondance et du modèle autocohérent conduit alors aux équations constitutives (4.26), valables à l'instant t considéré.

4.4 Conclusions, perspectives

Du point de vue des applications, l'approximation quasi-élastique est une solution qui s'est avérée robuste et efficace et ce, de plusieurs points de vue : tout d'abord, elle a permis de traiter des problèmes complexes comme la prédiction quantitative du fluage d'alliages de zirconium (Brenner (2001)). Par ailleurs, j'ai pu apprécier sa relative simplicité liée au fait que la transformée de Laplace-Carson n'apparaît plus in fine, ce qui a permis à des collègues de rapidement aborder les problèmes de type viscoélastique linéaire ou non linéaire. Il y a cependant un risque à appliquer trop brutalement la méthode proposée : l'approximation proposée doit être réévaluée pour toute nouvelle situation rencontrée.

De ce point de vue, la re-formulation (4.26) de la solution par collocation sous forme de variables internes me paraît aussi très intéressante pour l'avenir. Si ce dernier résultat n'est pas fondamentalement nouveau, il offre un nouveau point de vue à la communauté scientifique sur le sujet, nouveau point de vue qui offre plusieurs avantages :

- Il aboutit à une formulation des lois de comportement homogénéisées conformes à celles classiquement utilisées dans les codes de simulation de structure ;
- Il permet naturellement de traiter des problèmes plus complexes comme les comportements dépendants du temps (vieillessement, sollicitations thermomécaniques, ...) ou non linéaires, comme les chargements cycliques pour des applications à la fatigue oligocycliques, ... (voir section 4.3).

Parmi les nombreuses perspectives de travail sur ce thème de la modélisation du comportement effectif des matériaux hétérogènes présentant un comportement élastoviscoplastique, certaines ont déjà été évoquées. Ce serait en particulier, à la fois utile et intéressant de prolonger le travail entamé dans Brenner and Masson (2005) aux polycristaux. On peut, plus généralement, envisager plusieurs voies se trouvant à la croisée des chemins entre la recherche sur les méthodes de linéarisation (Ponte Castañeda (1996), Ponte Castañeda (2002a), ...) et la recherche sur le couplage viscoélastique telle que rapportée dans ce mémoire. Ces voies, pas encore explorées à ma connaissance, sont reportées dans le tableau 4.4 suivant. Dans ce tableau qui n'est pas exhaustif, les différentes cases vides représentent autant de méthodes d'estimation à formuler et à mettre en oeuvre !

	Tangente	Sécante (MO1 ou MO2)	Mixte (Ponte Castañeda (2002a))
Collocation	Rougier <i>et al.</i> (1993) Masson and Zaoui (1999)	☹	☹
Quasi-élastique	Brenner <i>et al.</i> (2002)	☹	Brenner and Masson (2005)

TAB. 4.1 – Différentes associations possibles. Sur les colonnes, on trouve les choix de méthode de linéarisation (tangente, sécante autour des moments d'ordre un (MO1) ou deux (MO2) et mixte (voir Ponte Castañeda (2002a))). Sur les lignes, on trouve les deux méthodes d'inversion possibles des transformées de Laplace-Carson (collocation ou quasi-élastique).

Bilan des travaux effectués

Pour celui qui voudrait aller plus loin dans l'utilisation pratique des différentes méthodes d'homogénéisation présentées dans ce travail, il existe une bibliothèque orientée objet (langage C^{++}) nommée MicMac⁺⁺ qui permet de tester l'essentiel de ces méthodes dans des situations variées. Cette bibliothèque, développée depuis une dizaine d'années en collaboration avec des collègues du monde académique, est librement téléchargeable sous licence CeCiLL-B (voir <http://www.cecill.info/>) à l'adresse suivante : <http://pagesperso-orange.fr/renaud-masson/MicMac++/>.

Afin de conclure sur les travaux présentés dans ce mémoire, je rappelle la question initiale ayant motivé ces travaux : proposer une méthodologie de référence pour simuler par homogénéisation la réponse de matériaux hétérogènes élastoviscoplastiques vieillissants à des trajets de chargement non radiaux, non monotones et anisothermes. Pour atteindre cet objectif, j'avais identifié un certain nombre de questions générales en introduction. A l'issue de ces travaux, les éléments de réponse suivants ont pu être apportés à ces questions :

Le travail de comparaison entre différentes méthodes d'homogénéisation a fait l'objet de nombreuses publications dans le cas non linéaire (voir, par exemple, Masson *et al.* (2000) ou Bornert *et al.* (2001)). Ces comparaisons ont montré la nécessité d'améliorer la procédure de linéarisation employée lorsqu'on souhaite modéliser les propriétés effectives de matériaux hétérogènes dont (au moins) un constituant possède un comportement non linéaire. Suite à ces comparaisons, une méthode de linéarisation plus robuste, proposée par ailleurs (Ponte Castañeda (2002a)), a été adaptée de façon à pouvoir traiter le cas de constituants possédant un comportement non linéaire particulier : le cas élastoviscoplastique (Brenner and Masson (2005)).

La question de l'optimisation des temps de calcul est un domaine de recherche transverse aux différentes classes de comportement envisagées dans ce mémoire. Tous les schémas d'homogénéisation basés sur la résolution du problème d'Eshelby bénéficieront des efforts analytiques consentis (Masson (2008)) pour réduire l'intégrale double nécessaire

au calcul du tenseur d'Eshelby (le tenseur de polarisation de Hill, en pratique). Pour le traitement des situations transitoires (comportements élastoviscoplastiques), la méthode d'inversion quasi-élastique s'est avérée à la fois efficace et utile (voir Brenner *et al.* (2002) et Brenner and Masson (2005)).

L'équivalence "collocation - loi variables internes" (Ricaud and Masson (2009)) nous a permis de formuler différemment la proposition Masson and Zaoui (1999). Cette nouvelle formulation permet d'envisager avec confiance des situations pratiques hors de portée jusqu'à présent (trajet de chargement thermomécanique, fatigue, ...). Elle a aussi un intérêt pédagogique pour celui qui voudrait introduire une loi de comportement homogénéisée de ce type dans un code éléments finis puisqu'elle se réduit à une simple loi de comportement à variables internes. Elle est actuellement mise en oeuvre dans les outils de calcul éléments finis simulant le comportement en service des crayons combustibles.

Enfin, la méthodologie de calculs de VER de bétons proposée par Toulemonde (2006) nous a conduit à aborder un problème nouveau qui nous a amené à construire à l'aide d'une méthode variationnelle des nouvelles bornes permettant de réduire significativement l'incertitude sur le résultat final (Toulemonde *et al.* (2008)). Ces travaux théoriques ont été développés pour des comportements de type élastique linéaire.

Sur la base de ces différentes contributions, la méthodologie de référence recherchée pourrait s'appuyer sur les éléments suivants :

- une méthode de linéarisation robuste du type Ponte Castañeda (2002a) qui conduirait à chaque instant à définir un matériau linéaire de comparaison de type visco-élastique linéaire ;
- une homogénéisation par le théorème de correspondance de ce matériau linéaire de comparaison. Si le schéma d'homogénéisation retenu fait appel au calcul du tenseur d'Eshelby, il faudrait mettre à profit les formules établies ;
- l'emploi de la méthode de collocation pour l'inversion des transformées de Laplace, ce qui, comme nous l'avons vu, permettra d'appréhender des situations plus générales que l'approximation quasi-élastique ;
- l'application de l'équivalence traitement par collocation - représentation par variables internes afin de traduire les effets d'histoire à l'instant de linéarisation choisi par un ensemble fini de variables internes (c'est indispensable si on souhaite traiter les cas anisotherme vieillissant).

En sus des développements informatiques nécessaires pour mettre en oeuvre cette solution de référence, deux questions doivent être tranchées avant d'aller plus loin. Tout d'abord, la question de la méthode de linéarisation reste relativement ouverte : plutôt que Ponte Castañeda (2002a), on pourrait envisager d'autres méthodes de linéarisation (voir Lahellec and Suquet (2004)). Pour trancher cette question, des travaux de comparaison à des calculs de microstructure seront nécessaires. Par ailleurs, ces différentes méthodes de linéarisation s'appuient sur les moments d'ordre deux des champs mécaniques dans

le matériau hétérogène considéré. Si l'approximation quasi-élastique permet de calculer directement cette quantité, cette question reste ouverte dans le cas d'un traitement général : autrement dit, comment estimer $\langle \sigma_{ij}(t)\sigma_{kl}(t) \rangle_s$ à un instant (t) et dans la phase d'indice (s) d'un matériau hétérogène viscoélastique linéaire donné ?

Perspectives de recherche

Plus généralement, les perspectives de ce travail sont nombreuses. Pour les présenter dans les grandes lignes, je propose de les regrouper autour de trois thématiques de recherche qui sont décrites dans les paragraphes suivants.

La première question offre des perspectives de recherche très ouvertes. Elle a pour point de départ la méthodologie de calcul de micro-structure sur maillages libres présentée dans la section 2.3. Elle a donc trait aux calculs de micro-structure (la simulation de Volumes Élémentaires Représentatifs (VER)), problématique qui a fait l'objet de nombreuses contributions ces dernières années, tant du point de vue des méthodes de résolution (par exemple la méthode FFT proposée par Moulinec and Suquet (1998)) que du point de vue de la représentation des micro-structures (représentation des grains dans Barbe *et al.* (2001) , ...) ou des phénomènes modélisés (par exemple, l'endommagement intergranulaire dans les polycristaux, voir Diard *et al.* (2002)) ...

L'originalité de la question soulevée ici tient à la présence de zones grises dans le calcul de micro-structure, ce qui, comme nous l'avons montré dans la section 2.3, nécessite de marier les techniques de calcul de micro-structure décrites ci-dessus aux techniques d'homogénéisation développées ces dernières années. Ainsi, partant de notre contribution dans le cas élastique linéaire (voir Toulemonde *et al.* (2008)), les questions suivantes devront être abordées ces prochaines années, tout d'abord dans le cas élastique linéaire :

- la mise au point de bornes plus resserrées, ce qui permettra de diminuer l'incertitude sur le comportement effectif simulé ;
- la recherche d'estimations pertinentes, c'est à dire respectant les bornes établies et proches de solutions de référence qui peuvent être obtenues dans des cas particuliers ;

puis, l'extension à :

- des comportements viscoélastiques linéaires non vieillissant ou vieillissants ;
- des comportements non linéaires (élasticité non linéaire ou viscoplasticité) ;
- des comportements élasto-viscoplastiques.

Nous avons déjà expliqué dans la section 2.3 quels avantages on pouvait tirer de la métho-

dologie employée en homogénéisation (utilisation d'une polarisation à l'instar de Hashin and Shtrikman (1963)) pour notre calcul de micro-structure avec une zone grise. Les extensions de cette méthodologie aux comportements plus généraux définis ci-dessus devront elles-aussi s'appuyer sur les méthodes employées en homogénéisation. Ainsi, concernant l'extension de la méthodologie proposée dans le cas élastique linéaire à la viscoélasticité linéaire non vieillissante, plusieurs méthodes pourront être envisagées afin de déterminer les propriétés des zones grises : le théorème de correspondance, la proposition de Lahellec and Suquet (2007), une approche "à la Kröner", ... laquelle choisir ? Concernant l'extension à des comportements élastiques non linéaires, les méthodes variationnelles développées par Ponte Castañeda (1991) devraient nous permettre d'établir une borne supérieure dans ce cas.

Bien entendu, ces questions académiques répondent à des problèmes concrets abordés dans mon laboratoire. À ce titre, le cas viscoélastique linéaire vieillissant est le plus intéressant car il est caractéristique du comportement des combustibles MOX dans le régime de sollicitation considéré (régime nominal) : le fluage est alors linéaire (avec la contrainte) tandis que la dépendance à la température et au flux neutronique de la loi de comportement lui confère un caractère "vieillissant" (voir la discussion à ce sujet dans le chapitre 3). Plus généralement, cette question de la simulation des VER est portée par un nombre significatif de collègues du laboratoire (combustibles pour le futur réacteur expérimental RJH, ...) ainsi que des entités internes ou externes avec lesquelles le laboratoire entretient des collaborations (par exemple avec le LMA pour la méthode "FFT"). L'idée générale est de développer un outil permettant de simuler à différentes échelles la réponse à un trajet de chargement réaliste (irradiation, température, déformations) d'un VER d'un combustible donné. C'est une occasion concrète, en collaboration avec EDF et le LMA d'étendre la méthodologie de calcul de micro-structure sur maillages libres proposée.

La deuxième question a trait au développement de méthodes d'homogénéisation pour les matériaux hétérogènes possédant un comportement élasto-viscoplastique, en particulier les polycristaux, l'échelle granulaire étant souvent pertinente pour les problèmes d'intérêt traités (voir plus bas la thématique du couplage ou Pacull *et al.* (2009)). Ce thème de recherche reste très actif dans la bibliographie ouverte (...). Ma contribution dans ce domaine reprend tout d'abord les perspectives évoquées dans les chapitres 3 et 4 :

- L'amélioration de la méthode Affine quasi-élastique, en particulier sa méthode de linéarisation (voir 4.4, et plus précisément Brenner and Masson (2005)), ce qui nécessitera des travaux complémentaires dans le cas linéaire (dérivée du tenseur d'Eshelby, estimation des moments d'ordre deux dans le cas viscoélastique).
- La simulation de trajets de chargement généraux qui nécessitera d'abandonner l'approximation quasi-élastique pour adopter le traitement par collocation (on aura donc rempli une des autres cases, pour l'instant vide, du tableau 4.4!).

Concernant ce dernier point, je souhaite bien entendu tirer profit de l'équivalence "collo-

cation - loi à variables internes" discutée dans le chapitre (3). Comme expliqué précédemment, cette équivalence réduit la formulation classique à noyau intégral à une formulation à variables internes, ce qui permet de traiter beaucoup plus efficacement les problèmes d'évolution. Or, sous l'effet de la déformation (rotation des cristallites) ou du vieillissement (le vieillissement thermique de certains aciers austéno-ferritiques, par exemple) ou encore de l'irradiation, les propriétés granulaires des matériaux polycristallins sont susceptibles d'évoluer, ce qui conduit à une modification des propriétés d'usage : texture induite par la déformation, fragilisation liée au vieillissement, fluage d'irradiation, ... C'est donc un champ d'investigation large et dont l'intérêt pratique est évident qui s'ouvre grâce à cette équivalence "collocation - loi à variables internes" ; la nouveauté dans la méthode retenue, reposant sur un traitement solide du couplage viscoélastique.

D'un point de vue plus théorique, ce travail serait aussi l'occasion de nous pencher sur la question de la signification physique de ces variables internes macroscopiques. On pourrait pour cela étudier des microstructures modèles et déterminer, dans le cas viscoélastique linéaire, leur spectre de relaxation. Dans le cas de microstructures de type polycristalline, des résultats théoriques (cf. Rougier *et al.* (1993)) obtenus dans un cas particulier (composite biphasé dans lequel aucune des phases ne joue le rôle de matrice) ont montré que le spectre de relaxation estimé avec le modèle autocohérent est continu. Même pour des microstructures de type inclusion-matrice mais avec des interactions entre inclusion marquées, l'estimation de ce spectre de relaxation avec le modèle autocohérent généralisé (voir Christensen (1979)) conduit aussi à un spectre continu. On pourrait donc commencer par étudier des microstructures de type inclusion-matrice à différentes fractions volumiques d'inclusion afin d'en simuler par des calculs de microstructure le spectre de relaxation. On imagine que si la matrice de ce composite présente un spectre de relaxation discret, on retrouvera aux très faibles fractions volumiques d'inclusion un spectre discret. Existe-il alors une fraction volumique critique pour laquelle ce spectre simulé devient continu ? Peut-on capter avec des modèles analytiques (dérivé de l'association du principe de correspondance avec différents modèles d'homogénéisation en élasticité linéaire : Mori-Tanaka, autocohérent généralisé, ...) les tendances obtenues avec ces calculs de microstructure ? Dans le cas des faibles fractions volumiques d'inclusion étudiées dans le chapitre 3, le spectre obtenu avec le modèle proposé est-il pertinent ? On pourrait ensuite considérer des microstructures polycristallines afin de déterminer si elles présentent systématiquement un spectre continu. On pourrait ensuite examiner plus en détails la nature de ce spectre (valeur des temps de relaxation bornant le spectre par exemple). On pourrait alors affiner l'emploi de la méthode des collocations à ce type de microstructures, point critique pour la question de départ : la détermination du comportement effectif des polycristaux élastoviscoplastiques.

Enfin, une question incontournable se pose si on souhaite adopter une modélisation polycristalline à des matériaux d'usage : il s'agit de la détermination expérimentale des mécanismes de déformation. Si on prend le cas du dioxyde d'Uranium et qu'on se limite à un mécanisme de déformation par glissement, il n'est pas inutile de rappeler que ce matériau polycristallin est bien de structure cristallographique cubique à faces centrées mais que, compte-tenu de la nature (ionique) des liaisons atomiques dans ce matériau,

il possède deux plans de glissement (plans (110) et (100)) contrairement aux métaux de structure CFC (plan (111)). Pour cela, nous envisageons des essais mécaniques sur des mono-cristaux de dioxyde d'uranium, ce qui permettrait d'identifier ces mécanismes tout en étudiant de plus près les origines du pic de compression par ailleurs observé sur le dioxyde d'uranium (en observe-t-on un sur les mono-cristaux ? Dans quelles conditions ? ...). On pourrait alors avancer sur la question de la simulation de ce pic de compression. En parallèle, il faudrait étudier l'évolution de ces mécanismes de déformation avec la température afin de prédire la transition fragile-ductile de ce matériau polycristallin, par ailleurs caractérisée expérimentalement (matériau vierge d'irradiation). L'étape suivante (de longue haleine) sera d'étudier les effets de l'irradiation sur ces mécanismes de déformation (...).

La troisième question s'inscrit dans une thématique générale et pluridisciplinaire : la simulation des effets de l'irradiation sur la tenue en service des matériaux de structure.

Cette modélisation des effets de l'irradiation est un problème récurrent dans de nombreux problèmes soulevés par les industriels du secteur de l'énergie électronucléaire : pour les réacteurs de 2ème et 3ème génération, on peut citer, par exemple, la fragilisation de l'acier de cuve par l'irradiation. Pour les réacteurs à venir (4ème génération pour les réacteurs à fission, réacteurs à fusion), cette question est encore plus d'actualité compte-tenu des conditions de température et d'irradiation envisagées. Parmi les différentes manifestations des effets de l'irradiation sur les matériaux de structure, on peut citer :

- la modification des propriétés mécaniques : durcissement, accélération du fluage thermique, fluage induit par l'irradiation, fragilisation, ...
- les déformations de gonflement induites par l'irradiation.

L'étude du premier point, formulé à l'échelle locale (le grain cristallin), nous ramène à la question précédente. Par exemple, on peut exprimer à l'échelle granulaire l'accélération du fluage par l'irradiation, et donc en déduire ses effets macroscopiques (...). Ici, je souhaite me concentrer sur le second point, la problématique du gonflement induit par l'irradiation, question particulièrement critique pour la question de la tenue de l'élément combustible (constitué du combustible et de sa gaine, dont l'étanchéité garantit le confinement des produits de fission et actinides). En sus des dilatations thermiques, le gonflement induit par l'irradiation n'est en général pas négligeable, ce qui, pour l'élément combustible des réacteurs de puissance actuels, comme pour ceux en projet (réacteurs à neutrons rapides, par exemple), peut conduire à une perte d'étanchéité de l'élément combustible.

Dans le cas des combustibles MOX, on attend de la simulation qu'elle prédise correctement les effets de ce gonflement sur les évolutions dimensionnelles de ces combustibles en réacteur. On attend aussi de la simulation qu'elle prédise l'état de fissuration de ces combustibles (conduisant à un relâchement gazeux des produits de fission gazeux dans le crayon et donc à une augmentation de la pression interne du crayon). Dans ce combustible hétérogène (procédé de fabrication actuel), la réaction nucléaire étant plus intense dans les phases plutonifères, le gonflement gazeux (induit par l'irradiation) y est poten-

tiellement plus élevé. Mais, comme ce gonflement dépend de l'état de pression dans cette phase plutonifère, il est difficile de dire quel sera le gonflement local (et effectif) résultant. La "feuille de route" sur ce sujet est relativement claire. Elle a pour cadre la simulation de crayons pour lesquels sont connues expérimentalement les principales caractéristiques après irradiation (hauteur de la colonne combustible notamment). Elle a pour point de départ le modèle à variables internes présenté dans la section 3.3.2, le combustible MOX étant vu comme un composite biphasé (une matrice uranifère et des inclusions (les amas) plutonifères). Elle nécessitera des développements particuliers dans notre outil de simulation par éléments finis. Il nous faudra en particulier coupler à l'échelle de chacune des phases en présence le modèle micro-mécanique et les modèles de gaz disponibles (...). Du point de vue académique, la question de l'extension du modèle biphasé proposé dans Ricaud and Masson (2009) à des comportements non linéaires devra nécessairement être abordée.

La modélisation des effets de l'irradiation est aussi nécessaire pour mieux simuler l'interaction pastille-gaine en lien avec les essais de qualification expérimentale menés par le CEA pour les industriels du secteur électro-nucléaire (voir Julien *et al.* (2006) pour le détail). Ainsi, dans le modèle micro-mécanique développé par J. Julien (voir Julien *et al.* (2007)), deux échelles sont définies : celle des pores de fabrication et celles des petites bulles à l'origine du gonflement d'irradiation dans les combustibles nucléaires. Le modèle micro-mécanique proposé dans ces travaux permet d'estimer l'état de pression moyen à chacune de ces échelles. Réciproquement, les modèles de gaz établis par les physiciens permettent de calculer le nombre de moles de gaz dans ces porosités. A l'issue des travaux de thèse de J. Julien, les perspectives sont les suivantes, par ordre de difficulté croissante :

- Optimiser le modèle micro-mécanique développé (modèle de type "N-phases"). A nouveau, il ne s'agit pas ici d'une optimisation informatique mais analytique visant à diminuer drastiquement le nombre de degrés de liberté du modèle.
- Rendre effectif le couplage avec le "cahier des charges" établi par J. Julien, ce qui nécessitera forcément des comparaisons avec des données expérimentales concernant des crayons combustibles (mesure des déformées après sollicitation, du relâchement gazeux, ...).
- Distinguer (du point de vue micro-mécanique) les bulles intra-granulaires des bulles inter-granulaires, ce qui devra se faire en lien avec la modélisation micro-mécanique de polycristaux, question clairement identifiée plus haut.

Bibliographie

- Barbe, F., Decker, L., Jeulin, D. and Cailletaud, G. (2001) Intergranular and intragranular behavior of polycrystalline aggregates. Part 1 : F.E. model. *Int. J. Plast.* **17**, 513–536.
- Baron, D., Thevenin, P., Largenton, R. and Masson, R. (2008) CYRANO3 the EDF fuel code performance especially designed for engineering applications. In *2008 Water Reactor Fuel Performance Meeting (Corée)*. Longman, Harlow.
- Barthélémy, J. (2009) Compliance and Hill polarization tensor of a crack in an anisotropic matrix. *International Journal of Solids and Structures* **46**, 4064–4072.
- Beremin, F. M. (1983) A local criterion for cleavage fracture of a nuclear Pressure Vessel Steel. *Met. Trans. A* **14A**, 2277–2287.
- Berveiller, M. and Zaoui, A. (1979) An extension of the self-consistent scheme to plastically-flowing polycrystals. *J. Mech. Phys. Solids* **26**, 325–344.
- Bilger, N., Bornert, M., Auslender, F., Zaoui, A. and Masson, R. (2002) New bounds and estimates for porous media with rigid perfectly plastic matrix. *cras* **330**, 127–132.
- Bonnet M., F. A. (2006) Les éditions de l’Ecole Polytechnique.
- Bornert, M. (1996) Thèse de l’École Nationale des ponts et chaussées, Paris.
- Bornert, M. and Ponte Castañeda, P. (1998) Second-order estimates of the self-consistent type for viscoplastic polycrystals. *Proc. R. Soc. Lond.* **A356**, 1979, 3035–3045.
- Bornert, M., Stolz, C. and Zaoui, A. (1996) Morphologically representative pattern-based bounding in elasticity. *J. Mech. Phys. Solids* **44**, 3, 307–331.

- Bornert, M., Masson, R., Zaoui, A. and Ponte Castañeda, P. (2001) Second-order estimates for the effective behaviour of viscoplastic polycrystalline materials. *J. Mech. Phys. Solids*, **49**, 2737–2764.
- Brenner, R. (2001) Thèse de l'Université Paris XIII, Paris.
- Brenner, R. and Masson, R. (2005) Improved affine estimates for nonlinear composites. *Eur. J. Mech., A/Solids* **24**, 1002–1015.
- Brenner, R., Masson, R., Castelnau, O. and Zaoui, A. (2002) A quasi-elastic affine formulation for the homogenised behaviour of nonlinear viscoelastic polycrystals and composites. *Eur. J. Mech., A/Solids* **21**, 943–960.
- Brenner, R., Castelnau, O. and Badea, L. (2004) Mechanical field fluctuations in polycrystals estimated by homogenization technique. *Proc. R. Soc. Lond.* **460**, 3589–3612.
- Brinson, L. C. and Lin, W. S. (1998) Comparison of micromechanics methods for effective properties of multiphase viscoelastic composites. *Composite Structures* **41**, 353–367.
- Cailletaud, G. (1987) Thèse de l'Université Paris VI, Paris.
- Carrier, G. F., Krook, M. and Pearson, C. E. (1966) McGraw-Hill, New-York.
- Christensen, R. M. (1969) Viscoelastic properties of heterogeneous media. *J. Mech. Phys. Solids* **17**, 23–41.
- Christensen, R. M. (1979) *Mechanics of Composite Materials*. Wiley-Intersciences, New York.
- Diard, O. (2002) *Évaluation de différentes approches poly et multicristallines pour la modélisation du comportement des gaines en alliage de zirconium M5*. Tech. rep., Armines.
- Diard, O., Leclercq, S., Rousselier, G. and Cailletaud, G. (2002) Distribution of normal stress at grain boundaries in multicrystals : application to an intergranular damage modeling. *Computational Materials Science* **25**, 73–84.
- Duval, P., Ashby, M. F. and Anderman, I. (1983) Rate-Controlling Processes in the Creep of Polycrystalline Ice. *The Journal of Physical Chemistry* **87**(21), 4066–4074.
- Eshelby, J. (1961) Elastic inclusions and inhomogeneities. In *Progress in Solid Mechanics* **2**, eds. I. N. Sneddon and R. Hill, pp. 89–140. North-Holland, Amsterdam.
- Ghahremani, F. (1977) Numerical evaluation of the stresses and strains in ellipsoidal inclusions in an anisotropic elastic material. *Mech. Res. Comm.* **4**(2), 89–91.
- Gilormini, P. (1996) A critical evaluation of various nonlinear extensions of the self-consistent model. In *Micromechanics of plasticity and damage of multiphase materials*, eds. A. Pineau and A. Zaoui, pp. 67–74. Kluwer Academic Publishers.

- Gruescu, G., Monchiet, V. and Kondo, D. (2005) Eshelby tensor for a crack in an orthotropic elastic medium. *C. R. Acad. Sci. Paris, Série II* **333**, 467–473.
- Hashin, Z. (1962) The elastic moduli of heterogeneous materials. *J. Appl. Mech.* **29**, 143–150.
- Hashin, Z. and Shtrikman, S. (1963) A variational approach to the theory of the elastic behaviour of multiphase materials. *J. Mech. Phys. Solids* **11**, 127–140.
- Hill, R. (1963) Elastic properties of reinforced solids : Some theoretical principles. *J. Mech. Phys. Solids* **11**, 357–372.
- Hill, R. (1965) Continuum micro-mechanics of elastoplastic polycrystals. *J. Mech. Phys. Solids* **13**, 89–101.
- Hutchinson, J. W. (1976) Bounds and self-consistent estimates for creep of polycrystalline materials. *Proc. R. Soc. Lond.* **A348**, 101–127.
- Hutchinson, J. W. (1977) Creep and plasticity of hexagonal polycrystals as related to single crystal slip. *Metall. Trans. A* **8A**, 1465–1469.
- Julien, J. (2008) Thèse de l'Université de Provence.
- Julien, J., Masson, R. and Michel, B. (2006) Porosity and gaseous swelling effects on fuel rod behaviour during class 2 power ramp transient. In *Top Fuel conference, Salamanca*.
- Julien, J., Michel, J. and Garajeu, M. (2007) Modélisation micromécanique du comportement viscoplastique d'un milieu à deux populations de cavités pressurisées. In *18ème Congrès Français de Mécanique*.
- Kneer, G. (1965) Über die Berechnung der Elastizitätsmoduln vielkristalliner Aggregate mit Textur. *Phys. Stat. Sol.* **9**, 825.
- Kröner, E. (1958) Berechnung der elastischen Konstanten des Vielkristalls aus den Konstanten des Einkristalls. *Z. Physics* **151**, 504.
- Lahellec, N. and Suquet, P. (2004) Nonlinear composites : a linearization procedure, exact to second order in contrast and for which the strain-energy and the affine formulation coincide. *C. R. Acad. Sci. Paris, Série II* **332**, 693–700.
- Lahellec, N. and Suquet, P. (2007) Effective behavior of linear viscoelastic composites : A time integration approach. *International Journal of Solids and Structures* **44**, 507–529.
- Laws, N. and McLaughlin, R. (1978) Self consistent estimates for the viscoelastic creep compliances of composite materials. *Proc. R. Soc. Lond.* **359**, 251–273.
- Lebensohn, R. (2001) N-site modeling of a 3D viscoplastic using Fast Fourier Transform. *Acta Metall. Mater.* **49**, 2723–2737.

- Lebensohn, R. and Tomé, C. N. (1993) A self-consistent anisotropic approach for the simulation of plastic deformation and texture development of polycrystals : application to zirconium alloys. *Acta Metall. Mater.* **41**, 2611–2624.
- Lebensohn, R., Tomé, C. and Castañeda, P. (2007a) Self-consistent modelling of the mechanical behaviour of viscoplastic polycrystals incorporating intragranular field fluctuations. *philmag* **28**, 4287–4322.
- Lebensohn, R., Tomé, C. N. and Ponte Castañeda, P. (2007b) Self-consistent modelling of the mechanical behaviour of viscoplastic polycrystals incorporating intragranular field fluctuations. *Phil. Mag.* **87**, 28, 4287–4322.
- Lefevre, W., Barbier, G., Masson, R. and Rousselier, R. (2001) A modified Beremin model to simulate the warm pre-stress effect. *Nuclear. Eng. Design* **216**, 27–42.
- Lin, S. C. and Mura, T. (1973) Elastic field of inclusions in anisotropic media (II). *Phys. Stat. Sol.* **15**, 281–285.
- Liu, Y. and Ponte Castañeda, P. (2004) Second-order theory for the effective behavior and field fluctuations in viscoplastic polycrystals. *J. Mech. Phys. Solids* **52**, 467–495.
- Mandel, J. (1966) *Cours de Mécanique des milieux continus*. Gauthier-Villars, Paris.
- Masson, R. (2006) *Enrichissement tangentiel de la modélisation 1,5D du crayon combustible*. Tech. rep., HT-25/05/062/A, EDF-R&D.
- Masson, R. (2008) New explicit expressions of the Hill polarization tensor for general anisotropic elastic solids. *International Journal of Solids and Structures* **45/3-4**, 757–769.
- Masson, R. and Zaoui, A. (1999) Self-consistent estimates for the rate-dependent elastoplastic behaviour of polycrystalline materials. *J. Mech. Phys. Solids* **47**, 1543–1568.
- Masson, R., Bornert, M., Suquet, P. and Zaoui, A. (2000) An affine formulation for the prediction of the effective properties of nonlinear composites and polycrystals. *J. Mech. Phys. Solids* **48**, 1203–1227.
- Masson, R., Nicolas, L. and Moinereau, D. (2002) RPV structural integrity assessment during a PTS event : application of an extended Beremin model consistent with WPS test results. In *ASME Pressure Vessels and Piping Conference Vancouver, Canada*.
- Mialon, P. (1986) Éléments d’analyse et de résolution numérique des relations de l’élastoplasticité. *EDF Bull. Dir. Etud. Rech. Série C Math. Inf.* **3**, 57–89.
- Michel, J.-C. and Suquet, P. (1992) The constitutive law of nonlinear viscous and porous materials. *J. Mech. Phys. Solids* **40**, 783–812.
- Michel, J. C. and Suquet, P. (2003) Nonuniform transformation field analysis. *International Journal of Solids and Structures* **40**, 6937–6955.

- Michell, J. (1902) The inversion of plane stress. *Proc. London Math. Soc.* **34**, 134–142.
- Moinereau, D., Dahl, A., Masson, R., Gilles, P., Chapuliot, S. and Yuritzinn, T. (2006) The effect of warm prestress in RPV assesment : some experimental results and thier interpretation by local approach to fracture. In *EMMC9 Local approach to fracture conference, Morêt-sur-Loing*.
- Molinari, A., Canova, G. R. and Ahzi, S. (1987) A self-consistent approach of the large deformation polycrystal viscoplasticity. *Acta Metall.* **35**, 12, 2983–2994.
- Mori, T. and Tanaka, K. (1973) Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions. *Acta Metall.* **21**, 597–629.
- Moulinec, H. and Suquet, P. (1998) A numerical method for computing the overall response of nonlinear composites with complex microstructures. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* **157**, 69–94.
- Mura, T. (1982) Martinus Nijhoof Publishers, The Netherlands.
- Nebozhyn, M. V., Gilormini, P. and Ponte Castañeda, P. (2000) Variational self-consistent estimates for viscoplastic polycrystals with highly anisotropic grains. *C.R. Acad. Sc. Paris II* **328**, 11–17.
- Pacull, J., Michel, B. and Débordes, R. M. O. (2009) Modèle numérique d'agrégat polycristallin pour le comportement des combustibles oxides. In *19ème Congrès Français de Mécanique*.
- Pilvin, P. (1990) Thèse de l'Université Paris VI, Paris.
- Ponte Castañeda, P. and Suquet, P. (1998) *Nonlinear composites*, vol. 34, pp. 171–302. Academic Press, New York.
- Ponte Castañeda, P. (1991) The effective mechanical properties of nonlinear isotropic composites. *J. Mech. Phys. Solids* **39**, 1, 45–71.
- Ponte Castañeda, P. (1996) Exact second-order estimates for the effective mechanical properties of nonlinear composite materials. *J. Mech. Phys. Solids* **44**, 6, 827–862.
- Ponte Castañeda, P. (2002a) Second-order homogenization estimates for nonlinear composites including field fluctuations. I-Theory. *J. Mech. Phys. Solids* **50**, 737–757.
- Ponte Castañeda, P. (2002b) Second-order homogenization estimates for nonlinear composites including field fluctuations. II-Applications. *J. Mech. Phys. Solids* **50**, 759–782.
- Ponte Castañeda, P. and Willis, J. (1995) The effect of spatial distribution on the effective behavior of composite materials and cracked media. *J. Mech. Phys. Solids* **43**, 12, 1919–1951.

- Pouya, A. and Zaoui, A. (1999) Linéarisation et homogénéisation en viscoélasticité. *C. R. Acad. Sci. Paris, Série II Sér. IIB*, 327, 365–370.
- Rekik, A. and Brenner, R. (2007) Evolution de la méthode de collocation pour l’homogénéisation en viscoélasticité linéaire. In *18ème Congrès Français de Mécanique*.
- Rekik, A., Auslender, F., Bornert, M. and Zaoui, A. (2007) Objective evaluation of linearization procedures in nonlinear homogenization : a methodology and some implications on the accuracy of micromechanical schemes. *International Journal of Solids and Structures* **44**, 3468–3496.
- Ricaud, J. and Masson, R. (2009) Effective properties of linear viscoelastic heterogeneous media : internal variables formulation and extension to ageing behaviours. *International Journal of Solids and Structures* **46**, 1599–1606.
- Rougier, Y., Stolz, C. and Zaoui, A. (1993) Représentation spectrale en viscoélasticité linéaire des matériaux hétérogènes. *C. R. Acad. Sci. Paris, Série II* **316**, 1517–1522.
- Rougier, Y., Stolz, C. and Zaoui, A. (1994) Self-consistent modelling of elastic-viscoplastic polycrystals. *C. R. Acad. Sci. Paris, Série II* **318**, 145–151.
- Rousselier, G. and Leclercq, S. (2006) A simplified polycrystalline model for viscoplastic and damage finite element analysis. *Int. J. Plast.* **22**, 685–712.
- Sabar, H., Berveiller, M., Favier, V. and Berbenni, S. (2002) A new class of micro-macro models for elastic-viscoplastic heterogeneous materials. *International Journal of Solids and Structures* **39**, 3257–3276.
- Salençon, J. (1996) Cours de l’Ecole Nationale des Ponts et Chaussées.
- Schapery, R. (1962) Approximate methods of transform inversion for viscoelastic stress analysis. In *U.S. Nat. Congr. Appl. Mech. ASME 4th*, vol. 2, pp. 1075–1085.
- Staroselsky, A. and Anand, L. (1998) Inelastic deformation of polycrystalline face centered cubic materials by slip and twinning. *J. Mech. Phys. Solids* **46**, 671–696.
- Suquet, P. (1995) Overall properties of nonlinear composites : a modified secant moduli theory and its link with Ponte Castañeda’s nonlinear variational procedure. *C. R. Acad. Sci. Paris, Série II* **320**, 563–571.
- Suvorov, A. and Dvorak, G. (2002) Rate form of the Eshelby and Hill tensors. *International Journal of Solids and Structures* **39**, 5659–5678.
- Tandon, G. P. and Weng, G. J. (1988) A theory of particle-reinforced plasticity. *J. Appl. Mech.* **55**, 126–135.
- Timoshenko, S. and Goodier, J. (1951) 2nd edition, New York, McGraw-Hill Book Co.

- Ting, T. C. T. and Lee, V. (1997) The three-dimensional elastostatic Green's Function for general anisotropic linear elastic solids. *Q. Jl Mech. appl. Math.* **50**, 407–426.
- Toulemonde, C., Masson, R. and El Gharib, J. (2008) Modeling the effective elastic behavior of composites : a mixed Finite Element and homogenisation approach. *C. R. Acad. Sci. Paris, Série II* **336**, 275–282.
- Toulemonde, C. e. a. (2006) *Bétons homogénéisés numériques (BENHUR) : proposition de méthodologie et illustration de calculs simplifiés*. Tech. rep., EDF.
- Turner, P., Tomé, C. and Woo, C. (1994) Self-consistent modelling nonlinear visco-elastic polycrystals : an approximate scheme. *Phil. Mag. A* **70**, 689–711.
- Vincent, P. (2007) Thèse de l'Université de Provence.
- Wang, Y. M. and Weng, G. J. (1992) The influence of inclusion shape on the overall viscoelastic behavior of composites. *J. Appl. Mech.* **59**, 510–518.
- Weng, G. (1981) Self consistent determination of time dependent behavior of metals. *J. Appl. Mech.* **48**, 41–46.
- Willis, J. R. (1981) *Variational and related methods for the overall properties of composites*, vol. 21, pp. 1–78. Academic Press, New York.
- Zohdi, T. and Wriggers, P. (2001) Aspects of the computational testing of the mechanical properties of microheterogeneous material samples. *Int. J. Numer. Meth. Eng.* **50**, 2573–2599.

ÉDITÉ PAR
LA DIRECTION DES SYSTEMES
D'INFORMATION

CEA / SACLAY 91191 GIF-SUR-YVETTE CEDEX FRANCE